Modélisation des écoulements de plasmas d'arc soufflé : Application à la projection de matériaux pulvérulents

Rodolphe Bolot

▶ **To cite this version:**

Rodolphe Bolot. Modélisation des écoulements de plasmas d'arc soufflé : Application à la projection de matériaux pulvérulents. Sciences de l'ingénieur [physics]. Université de Franche-Comté, 1999. Français. NNT : . tel-03345342

HAL Id: tel-03345342

https://theses.hal.science/tel-03345342

Submitted on 15 Sep 2021

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

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

N° d'ordre : **42** Année **1999**

U.F.R.S.T.G.I.

THESE

présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Franche-Comté

Ecole doctorale : Sciences pour l'Ingénieur
Spécialité : Sciences des Matériaux

par

Rodolphe BOLOT

Modélisation des écoulements de plasmas d'arc soufflé : Application à la projection de matériaux pulvérulents

---

Soutenue le 6 Mai 1999 devant la commission d'examen :

Christopher BERNDT, Professeur, Université de New-York (USA)
Maher BOULOS, Professeur, Université de Sherbrooke (Président du jury)
Bruno CHERON, Professeur, Université de Rouen (Rapporteur)
Christian CODDET, Professeur, UTBM (Directeur de thèse)
Pierre FAUCHAIS, Professeur, Université de Limoges (Rapporteur)
Michel IMBERT, Professeur, UTBM (Co-directeur de thèse)
Per NYLEN, Docteur, Université de Trollhättan (Suède)

Université de **T**echnologie de **B**elfort-**M**ontbéliard

N° d'ordre : **42** Année **1999**

U.F.R.S.T.G.I.

THESE

présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Franche-Comté

Ecole doctorale : Sciences pour l'Ingénieur
Spécialité : Sciences des Matériaux

par

Rodolphe BOLOT

Modélisation des écoulements de plasmas d'arc soufflé : Application à la projection de matériaux pulvérulents

---

Soutenue le 6 Mai 1999 devant la commission d'examen :

Christopher BERNDT, Professeur, Université de New-York (USA)
Maher BOULOS, Professeur, Université de Sherbrooke (Président du jury)
Bruno CHERON, Professeur, Université de Rouen (Rapporteur)
Christian CODDET, Professeur, UTBM (Directeur de thèse)
Pierre FAUCHAIS, Professeur, Université de Limoges (Rapporteur)
Michel IMBERT, Professeur, UTBM (Co-directeur de thèse)
Per NYLEN, Docteur, Université de Trollhättan (Suède)

Université de **T**echnologie de **B**elfort-**M**ontbéliard

REMERCIEMENTS

Cette étude a été réalisée au sein du Laboratoire d'Etudes et de Recherches sur les Matériaux et les Propriétés de Surface (LERMPS) de l'Université de Technologie de Belfort-Montbéliard.

J'exprime toute ma reconnaissance à Monsieur le Professeur Christian Coddet, Directeur du LERMPS, qui m'a accueilli dans son équipe et m'a accordé une confiance permanente pour réaliser cette étude.

Je remercie très sincèrement Monsieur le Professeur Michel Imbert, qui a dirigé cette étude, et dont l'expérience et les conseils me furent toujours très précieux.

Je remercie Monsieur le Professeur Bruno Chéron et Monsieur le Professeur Pierre Fauchais pour avoir accepté d'être rapporteurs de ce travail.

I express my gratitude to Mr. Professor Maher I. Boulos, Mr. Professor Christopher C. Berndt and Mr. Doctor Per Nylén : I feel very honored with their attendance at my examination commitee.

Je tiens également à remercier Mademoiselle Pascale Eichert, qui a initié le travail de simulation sur Phoenics au sein du laboratoire, Monsieur Young-Myung Yang de la Société Korean Gas (Corrée du Sud) qui m'a incité à réaliser un travail théorique sur les propriétés des plasmas ainsi que Monsieur Anthony B. Murphy (Dr., Principal Research Scientist, SCIRO, Telecommunications and Industrial Physics, Lindfield, Australie) pour ses précieux conseils concernant le calcul des coefficients de transport des plasmas.

Enfin je ne saurais terminer sans remercier l'ensemble de mes collègues qui ont rendu cette étude agréable et en particulier Mesdemoiselles Marie-Pierre Planche et Crisalia Mateus pour leur aide lors de l'élaboration de ce manuscrit.

SOMMAIRE

Introduction *6*

1. Calcul des propriétés thermodynamiques et des coefficients de transport des plasmas *10*

1.1. Détermination de la composition chimique des plasmas **11**

1.1.1. Mise en équation du problème 11

1.1.2 Résolution par l'algorithme RAND 12

1.1.3. Application de RAND au cas des plasmas 13

1.1.4. Propriétés thermodynamiques des espèces individuelles 15

1.1.5. Correction de Debye 15

1.1.6. Résultats numériques 16

1.2. Propriétés thermodynamiques des mélanges plasma **18**

1.2.1. Déduction à partir de la composition 18

1.2.2. Résultats numériques 20

1.3. Coefficients de transport **25**

1.3.1. Espèces pures 26

1.3.2. Cas des mélanges 27

1.3.3. Détermination des intégrales de collision 30

1.3.4. Résultats numériques 38

2. Jets libres de plasma *47*

2.1. Mise en équation **48**

2.2. Conditions aux limites **51**

2.3. Etude des paramètres sensibles **54**

Conclusion 65

2.4. Comparaison avec les mesures expérimentales **66**

Conclusions *67*

3. Jets de plasma impactants - Echanges thermiques jets/substrats *73*

3.1. Les modèles **75**

3.1.1. Equations générales 75

3.1.2. Modèles de turbulence 76

3.1.3. Modèle à bas Reynolds de Lam & Bremhorst 78

3.1.4. Modèle à deux couches 79

3.1.5. Exemple de la linéarisation des termes sources pour k et ε. 79

3.1.6. Lois de mélanges pour les coefficients de transport 80

3.2. Résultats numériques **81**

3.2.1. Résultats obtenus avec les extensions au modèle *k-ε* standard 81

Conclusion 87

3.2.2. Modèle *k-ε* de Chen & Kim 88

3.2.3. Profils radiaux du flux thermique transmis 92

3.2.4. Influence de la distance axiale jet/substrat 94

3.2.5. Influence de la température du substrat 100

Conclusions *101*

4. L'entraînement des particules dans le jet *102*

4.1. Les échanges jet de plasma/particules **103**

4.2. Les corrélations existantes **105**

4.3. L'effet Knudsen (effet de raréfaction) **109**

4.4. L'effet de vaporisation **111**

4.5. Exemple de la projection d'une poudre de fer **112**

4.5.1. Résultats expérimentaux 113

4.5.2. L'injection des particules dans le jet de plasma 114

4.5.3. Résultats numériques 116

Conclusion **124**

4.6. Exemple de la projection de la poudre d'alumine rutile 124

4.6.1. Conduction en régime transitoire au sein d'une particule 124

4.6.2. Les propriétés de l'Ampérit proches de celles de l'alumine 127

4.6.3. Mesures expérimentales 130

4.6.4. Corrélations pour Cd et Nu 131

4.6.5. Résultats numériques 134

4.7. Retour à la projection de fer 140

Conclusions* *141

Conclusion générale* *144

Annexe - Le code de calcul PHOENICS* *149

1. Structure 150

2. Formulation générale des équations de conservation 151

3. Discrétisation des équations de conservation 151

4. Linéarisation des termes sources 154

5. Conditions aux limites 155

6. Equation de correction de pression 157

7. Relaxation 159

8. Méthodes de résolution 160

9. Calculs paraboliques 161

10. Fonctions de paroi 162

Introduction

De par une recherche permanente de la performance, les matériaux sont soumis à des contraintes spécifiques de plus en plus sévères qui imposent souvent des traitements permettant d'atteindre des propriétés de surface mieux adaptées du point de vue des interactions avec le milieu dans lequel ils évoluent (usure, corrosion, sollicitations thermiques, ...). La technique de projection thermique se caractérise par l'utilisation d'une source d'énergie (combustion d'un mélange de gaz, décharge électrique) en vue de fondre un matériau et de le projeter sur la surface à traiter. Parmi les techniques de projection thermique, le procédé de projection à la torche à plasma d'arc soufflé présente l'avantage d'utiliser une source d'énergie à très haute température (supérieure à 10000 K) et permet ainsi notamment la projection de matériaux réfractaires tels que les céramiques. Une torche à plasma d'arc soufflé à courant continu est constituée d'une cathode et d'une anode coaxiales. Sous l'effet de l'arc électrique crée, le mélange de gaz s'écoulant à travers l'anode est partiellement ionisé. Le jet de plasma obtenu en sortie de torche présente alors non seulement une température importante mais aussi une très grande vitesse. Le matériau à projeter est introduit dans le jet en sortie de la torche sous forme de poudre. Les transferts intervenant entre le jet de plasma et les particules de poudres sont de types cinétiques (accélération par frottement) et thermiques (échanges par conduction et convection principalement). Les particules de poudre accélérées et fondues s'écrasent sur le substrat et forment progressivement un revêtement par empilement.

La technique la plus courante est la projection sous air à pression atmosphérique (APS pour “Atmospheric Plasma Spraying”). Pour ce procédé, la température du jet en sortie de torche est souvent de l'ordre de 13000 K et sa vitesse peut atteindre 2000 m/s. Toutefois, suivant le matériau projeté, la nature du gaz environnant peut être un paramètre important, notamment pour les matériaux sensibles à l'oxydation. On distingue donc des techniques spécifiques telles que la projection sous gaz inerte (IPS pour “Inert Plasma Spraying”) ou sous vide (VPS pour “Vaccum Plasma Spraying”) pour laquelle la vitesse du jet est encore supérieure (jets supersoniques). La qualité d'un dépôt ne dépend pas seulement de l'état des particules lors de leur écrasement sur le substrat mais aussi de nombreux éléments tels que l'état de surface de ce dernier ou sa température. Des techniques de préparation du substrat telles que le dégraissage et le sablage sont donc requises en vue d'une bonne adhérence. Toutefois, à l'heure actuelle, des techniques de préparation novatrices font leur apparition : on peut citer le procédé Protal® faisant usage d'un traitement LASER simultané à la projection.

La simulation des jets de plasmas et des interactions jet/particules est d'un intérêt majeur quant à la compréhension du procédé de projection thermique. En effet, le choix des paramètres de projection relève encore aujourd'hui de connaissances essentiellement empiriques. Par contre, différents aspects sont couramment abordés dans la littérature au niveau simulation.

La partie la plus en “amont” concerne la détermination des propriétés thermodynamiques et de transport des plasmas : de nombreux travaux y sont consacrés dans la mesure où il s'agit d'un travail clé sans lequel d'autres travaux de simulation ne peuvent généralement pas être envisagés.

Le second centre d'intérêt des chercheurs concerne la modélisation des jets de plasma. A ce niveau, l'accent peut être porté sur différents points en fonction du but principal recherché. Ainsi, si certains auteurs se focalisent sur l'étude de la formation de l'arc électrique, d'autres s'intéressent plus particulièrement au mécanisme d'entraînement du gaz ambiant dans le jet. Le but à atteindre étant la détermination des champs de température et de vitesse dans le jet de plasma, la question primordiale est de savoir dans quelle mesure les prédictions obtenues avec tel ou tel modèle correspondent à la réalité : les auteurs cherchent donc souvent à comparer leurs prédictions à des mesures expérimentales. Toutefois, au niveau des jets de plasma, la question de la validité des mesures se pose souvent. En effet, de par la gamme des températures des jets de plasma, l'utilisation de techniques spécifiques est requise. Par exemple, d'éventuelles sondes doivent notamment pouvoir résister aux conditions d'utilisation. A l'heure actuelle, aussi bien pour les vitesses que pour les températures, les mesures expérimentales dans les jets de plasma dépendent souvent de la technique de mesure utilisée.

Le troisième centre d'intérêt des chercheurs concerne la simulation de la formation des dépôts en passant de l'accélération et de l'échauffement des particules injectées dans le jet de plasma aux mécanismes d'écrasement de ces particules lors de leur impact sur le substrat.

Une étude numérique du procédé de projection thermique APS (“Atmospheric Plasma Spraying”) est proposée dans cette thèse dans le but d'en obtenir une meilleure connaissance. L'objectif final est de pouvoir améliorer la qualité des dépôts par simulation.

Dans le premier chapitre, un calcul des propriétés thermodynamiques et des coefficients de transport des plasmas thermiques est réalisé et les résultats sont comparés à ceux obtenus par d'autres auteurs. Le cas des plasmas thermiques à l'équilibre thermodynamique local est considéré. Toutefois, cette étude pourrait être étendue si besoin était.

Dans le second chapitre, le code de calcul PHOENICS™ est utilisé pour traiter le cas des jets libres de plasma et résoudre les équations régissant leur comportement. Une étude paramétrique est réalisée dans le but d'identifier les éléments les plus influents.

Dans le troisième chapitre, le cas d'un jet de plasma impactant sur une surface plane refroidie est considéré. Le modèle utilisé permet d'appréhender les échanges thermiques par l'utilisation d'un affinement important du maillage dans la couche limite à la surface du solide, et par l'utilisation d'un modèle de turbulence permettant de prédire la relaminarisation de l'écoulement dans la sous-couche visqueuse. Les prédictions obtenues sont ensuite comparées à des résultats expérimentaux de mesures de flux thermiques transmis à la paroi.

Dans le quatrième chapitre, une approche Lagrangienne est utilisée pour quantifier les interactions jet/particules et nous comparons les résultats obtenus à des mesures de caractéristiques de particules en vol réalisées avec un système optique (DPV 2000). Le couplage avec l'équation de conduction de la chaleur en régime transitoire au sein d'une particule isolée est réalisé et nous suggérons des corrections à appliquer aux expressions traditionnellement utilisées pour caractériser les échanges dynamiques et thermiques pour une particule en vol dans un jet de plasma.

Chapitre 1

Propriétés thermodynamiques et coefficients de transport des plasmas

1. Calcul des propriétés thermodynamiques et des coefficients de transport des plasmas

Le but de ce premier chapitre est de décrire les méthodes développées dans cette étude pour déterminer les propriétés thermodynamiques et les coefficients de transport des plasmas utilisés en projection thermique. Nous présenterons tout d'abord la méthode de minimisation de l'énergie de Gibbs permettant le calcul de la composition chimique des plasmas. Nous en déduirons les propriétés thermodynamiques des plasmas puis nous présenterons les méthodes de calcul des coefficients de transport. En parallèle, des résultats numériques seront présentés où nous comparerons notamment nos résultats à ceux obtenus par d'autres auteurs. Ce travail servira de base pour la modélisation des jets de plasma et des interactions jet/particules.

1.1. Détermination de la composition chimique des plasmas

Dans cette partie, nous détaillons la méthode de minimisation de l'énergie de Gibbs utilisée lors de la détermination de la composition des plasmas à l'équilibre thermodynamique local (homogénéité des températures). La mise en équation du problème aboutit à l'obtention d'un système d'équations non linéaires. Smith et Missen [1] ont détaillé différentes procédures permettant la résolution d'un tel système. Il en résulte que les méthodes les plus performantes sont celles utilisant une méthode de linéarisation du système de type Newton-Raphson. Le cas des plasmas reste néanmoins particulier. En effet, les méthodes proposées font toutes intervenir dans les équations, le nombre d'atomes de chaque type d'élément contenu dans chaque espèce chimique. Le cas des électrons, qui doivent être considérés comme une espèce chimique à part entière, est donc particulier dans la mesure où ils ne contiennent aucun élément et où ils ne peuvent être traités comme une espèce neutre. A partir de ces considérations, nous avons choisi d'utiliser l'algorithme RAND (White et al. 1958) détaillé par Smith & Missen [1] que nous avons modifié dans le but de prendre en compte l'espèce électron. Cet algorithme fait partie de la même famille que les algorithmes Brinkley (Brinkley 1947) et NASA (Huff & al. 1951) qui utilisent tous une méthode de linéarisation de type Newton-Raphson. Il diffère notamment des deux autres dans le sens où il utilise n_i, le nombre de moles de l'espèce *i*, comme variable, au lieu de $\ln(n_i)$.

1.1.1. Mise en équation du problème

En considérant un mélange de (N) espèces chimiques en quantités respectives n_i, l'énergie de Gibbs totale du système à la température T et la pression P s'écrit

$$G(T,P,\mathbf{n}) = \sum_{i=1}^{N} \mu_i n_i$$

où **n** est un vecteur représentant les (N) espèces
et μ_i le potentiel chimique de l'espèce i est défini par

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_{k\neq i}}$$

L'équilibre chimique est obtenu à T et P lorsque **n** vérifie

$$dG(T,P,\mathbf{n}) = 0 \qquad c.a.d. \qquad \sum_{i=1}^{N} \mu_i dn_i = 0$$

Soit (M) le nombre total d'éléments différents contenus dans le système, l'abondance b_k de l'élément k dans ce système doit vérifier la contrainte

$$b_k = \sum_{i=1}^{N} a_{ki} n_i \qquad k = 1, M$$

où a_{ki} est le nombre d'atomes de l'élément k contenu dans l'espèce i.
En utilisant la méthode des multiplicateurs de Lagrange pour vérifier cette contrainte, il vient

$$\mathcal{L}(\mathbf{n},\lambda) = \sum_{i=1}^{N} \mu_i n_i + \sum_{k=1}^{M} \lambda_k \left(b_k - \sum_{i=1}^{N} a_{ki} n_i \right)$$

dans laquelle λ est un vecteur de (M) multiplicateurs de Lagrange.
En dérivant $\mathcal{L}$ par rapport à chaque n_i et chaque λ_k, on obtient un système de (N+M) équations en λ_k et n_i :

$$\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial n_i} \right)_{n_{j\neq i}\lambda} = \mu_i - \sum_{k=1}^{M} a_{ki}\lambda_k = 0 \qquad i = 1, N$$

$$\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_k} \right)_{\mathrm{n},\lambda_{j\neq k}} = b_k - \sum_{i=1}^{N} a_{ki} n_i = 0 \qquad k = 1, M$$

En considérant le cas d'un gaz parfait, le potentiel chimique de chaque espèce i s'écrit

$$\mu_i(T,P,n_i) = \mu_i^0(T) + RT \ln(p_i)$$

où p_i est la pression partielle de l'espèce i dans le mélange définie par

$$p_i = \left(\frac{n_i}{n_t} \right) P = x_i P \qquad \text{avec} \qquad n_t = \sum_i n_i$$

et où $\mu_i^0(T)$, le potentiel chimique à l'état de référence P_0 (état traduit par l'exposant ^{0}) est une fonction de la température T uniquement.

1.1.2 Résolution par l'algorithme RAND

Dans le cas de l'algorithme RAND, la linéarisation des (N) premières équations suivant la méthode de Newton-Raphson [1] aboutit après réarrangement à

$$-\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial \mu_h}{\partial n_i}\right)_{\mathbf{n}^{(m)}} \delta n_i^{(m)} + \sum_{k=1}^{M} a_{kh}\delta\lambda_k^{(m)} = \mu_h^{(m)} - \sum_{k=1}^{M} a_{kh}\lambda_k^{(m)} \qquad h = 1, N$$

avec

$$\delta\lambda_k^{(m)} = \lambda_k - \lambda_k^{(m)}$$

et

$$\delta n_i^{(m)} = n_i - n_i^{(m)}$$

où m désigne l'étape de calcul.

Les (M) dernières équations deviennent alors

$$\sum_{i=1}^{N} a_{ki}\delta n_i^{(m)} = b_k - b_k^{(m)} \qquad k = 1, M$$

avec

$$b_k^{(m)} = \sum_{i=1}^{N} a_{ki} n_i^{(m)}$$

Dans le cas d'un mélange de gaz parfaits, en combinant les équations ci-dessus, il est possible de réduire le système précédent à un système de (M+1) équations d'inconnues λ_k et u.

$$\sum_{k=1}^{M}\left(\sum_{i=1}^{N} a_{ki}a_{ji}n_i^{(m)}\right)\lambda_k + b_j^{(m)}u = \sum_{i=1}^{N} a_{ji}n_i^{(m)}\mu_i^{(m)} + b_j - b_j^{(m)} \qquad j = 1, M$$

et

$$\sum_{k=1}^{M} b_k^{(m)}\lambda_k = \sum_{i=1}^{N} n_i^{(m)}\mu_i^{(m)}$$

où

$$u = \frac{\delta n_t^{(m)}}{n_t^{(m)}}$$

Chaque itération consiste alors en la résolution du système et au calcul de $\mathbf{n}$ à l'étape $(m+1)$ suivant

$$\mathbf{n}^{(m+1)} = \mathbf{n}^{(m)} + \omega^{(m)}\delta\mathbf{n}^{(m)}$$

où

$$\delta n_i^{(m)} = n_i^{(m)}\left(\sum_{k=1}^{M} a_{ki}\lambda_k + u - \mu_i^{(m)}\right) \qquad i = 1, N$$

et $\omega^{(m)}$ est un facteur de relaxation qui doit être calculé à chaque itération de manière à éviter notamment l'obtention de valeurs négatives pour $n_i^{(m+1)}$.

1.1.3. Application de RAND au cas des plasmas

Comme nous l'avons dit en introduction, l'application directe de cet algorithme au cas des plasmas n'est pas possible du fait de la présence d'électrons (e^-) dans le milieu. Il est donc nécessaire d'apporter quelques modifications. Nous avons choisi de réécrire l'énergie de Gibbs du mélange suivant

$$G(T,P,\mathbf{n}) = \sum_{i=1}^{N} \mu_i n_i = \sum_{i=1}^{N_1} \mu_i n_i + \sum_{i=N_1+1}^{N_1+N_2} \mu_i n_i + \mu_{e-} n_{e-}$$

où N_1 est le nombre d'espèces non ionisées et N_2 est le nombre d'espèces ionisées. La N$^{\text{ième}}$ espèce étant $e-$, on a $N = N_1 + N_2 + 1$.

En considérant uniquement les ions positifs de première ionisation, l'équation de neutralité électrique implique

$$n_{e-} = \sum_{i=N_1+1}^{N_1+N_2} n_i$$

Ce qui nous permet de réécrire l'énergie de Gibbs du mélange suivant

$$G(T,P,\mathbf{n}) = \sum_{i=1}^{N_1} \mu_i n_i + \sum_{i=N_1+1}^{N_1+N_2} (\mu_i + \mu_{e-}) n_i$$

Dans cette expression de l'énergie de Gibbs, le nombre de moles de $e-$ n'apparaît plus et le potentiel chimique de l'électron est additionné à celui de chaque ion positif. Le nombre total de moles devant alors être calculé suivant

$$n_t = \sum_{i=1}^{N_1} n_i + \sum_{i=N_1+1}^{N_1+N_2} n_i + n_{e-} = \sum_{i=1}^{N_1} n_i + 2\sum_{i=N_1+1}^{N_1+N_2} n_i$$

Le fonctionnement du nouvel algorithme est donc le suivant : le système à (M) équations

$$\sum_{k=1}^{M} \left(\sum_{i=1}^{N} a_{ki} a_{ji} n_i^{(m)} \right) \lambda_k = \sum_{i=1}^{N} a_{ji} n_i^{(m)} \mu_i^{(m)} + b_j - b_j^{(m)} \qquad j = 1, M$$

est résolu à chaque étape.

La correction des $n_i^{(m)}$ est ensuite réalisée suivant

$$\delta n_i^{(m)} = n_i^{(m)} \left(\sum_{k=1}^{M} a_{ki} \lambda_k - \mu_i^{(m)} \right) \qquad i = 1, N_1 + N_2$$

et

$$n_i^{(m+1)} = n_i^{(m)} + \omega^{(m)} \delta n_i^{(m)}$$

avec

$$\omega^{(m)} = \min \left[0.75 \; ; \; 1 / \max_{i=1}^{N} \left(\left| \frac{\delta n_i^{(m)}}{n_i^{(m)}} \right| \right) \right]$$

Ce facteur de relaxation nous permet à la fois de limiter les $\delta n_i^{(m)}$ à chaque étape et d'éviter l'obtention de $n_i^{(m+1)}$ négatifs au cours des itérations. Il permet d'obtenir la convergence dans 100% des cas. Lors des premières itérations, une valeur de 0.99 peut remplacer la valeur 0.75 si l'on part d'un vecteur $n_i^{(0)}$ initial très éloigné de la solution finale.

Le nombre de moles d'électrons est ensuite calculé suivant

$$n_{e-=} \sum_{i=N_1+1}^{N_1+N_2} n_i$$

et le nombre total de moles suivant

$$n_t = \sum_{i=1}^{N_1} n_i + 2\sum_{i=N_1+1}^{N_1+N_2} n_i$$

et ainsi de suite jusqu'à ce que

$$\max_{i=1}^{N1+N2}\left(\left|\delta n_i^{(m)}\right|\right) < \varepsilon$$

Cette procédure permet le calcul de l'équilibre chimique d'un mélange plasmagène à température et pression fixées quel que soit le mélange de gaz. Néanmoins, dans certains cas, cette procédure n'est pas nécessaire. C'est pourquoi, nous avons également développé un second algorithme qui permet quant à lui de traiter tous les cas des plasmas où chaque espèce ne contient qu'une seule sorte d'élément. Ce second algorithme (qui s'applique notamment à tous les mélanges argon/hélium, argon/hydrogène, ...) est utilisé prioritairement dans la mesure où il permet un résultat plus précis concernant notamment les espèces présentes en faible quantité sur une plage réduite ou non de température. Cet avantage provient plus précisément du fait qu'un critère de convergence de type

$$\max_{i=1}^{N1+N2}\left(\left|\frac{\delta n_i^{(m)}}{n_i^{(m)}}\right|\right) < \varepsilon$$

est alors utilisé. Ce second algorithme est basé sur le fait que si aucune espèce ne possède plusieurs sortes d'éléments (NO par exemple ne convient pas car elle possède les éléments de types N et O), alors on pourrait montrer que, à n_{e-} et n_t fixés, les taux de dissociation et d'ionisation peuvent être obtenus par résolution d'équations algébriques du premier ordre pour les monoatomiques et du second ordre pour les diatomiques. La méthode est donc une méthode itérative qui consiste à partir d'une estimation initiale de n_{e-} et n_t, à calculer les $n_{i\neq e-}$ puis à corriger n_{e-} et n_t et ainsi de suite jusqu'à convergence. Tout comme la précédente, cette méthode nécessite l'utilisation d'un facteur de relaxation.

1.1.4. Propriétés thermodynamiques des espèces individuelles

Les données thermodynamiques des espèces pures permettant la détermination des $\mu_i^0(T)$ sont prises dans les tables de Gurvich [2] qui ont l'avantage de couvrir une gamme de température très large : de 0 à 20000K. La température des jets externes ne dépassant pas 15000 K même pour des intensités de courant et des puissances électriques importantes, ces tables répondent tout à fait à nos besoins. Elles fournissent l'évolution de la chaleur spécifique de chaque espèce à partir de laquelle l'enthalpie et l'entropie sont déduites. Elles donnent également pour chaque espèce, les valeurs de l'enthalpie standard de formation et de l'entropie à l'état de référence. Finalement de ces données, on déduit

$$H_i^0(T) = Hf_i^{0,T_0} + \int_{T_0}^{T} Cp_i dT$$

et

$$S_i^0(T) = S_i^{0,T_0} + \int_{T_0}^{T} \frac{Cp_i}{T} dT$$

Le potentiel chimique de chaque espèce i s'exprime alors par

$$\mu_i(T) = \mu_i^0(T) + RT\ln(p_i) = H_i^0(T) - TS_i^0(T) + RT\ln(P) + RT\ln\left(\frac{n_i}{n_t}\right)$$

Dans cette expression, la pression de référence étant de 1 bar, l'unité de P est le bar et à la pression normale de 1 bar, on a donc $\ln(P) = 0$.

1.1.5. Correction de Debye

De par la présence d'espèces chargées dans le mélange, nous effectuons une correction sur l'équation d'état en fonction de la longueur de Debye [3]. Dans le cas où les atomes ne sont ionisés qu'une seule fois au maximum, la longueur de Debye s'exprime de la manière suivante

$$\lambda_d = \left(\frac{\varepsilon_0 kTV}{e^2 2n_{e-}}\right)^{1/2}$$

où ε_0 est la constante diélectrique du vide, k la constante de Boltzmann, e la charge de l'électron et $2n_{e-}/V$ la quantité d'espèces ionisées par unité de volume.

Il convient alors de tenir compte de la correction suivante sur l'équation d'état

$$P + \Delta P = kT\sum_{i=1}^{N} n_i \Big/ V \qquad avec\ \Delta P = \frac{kT}{24\pi(\lambda_d)^3}$$

Dans le cas des plasmas thermiques, cette correction sur l'équation d'état demeure néanmoins toujours très faible (de l'ordre du % au maximum) et pourrait donc être négligée en première approximation.

1.1.6. Résultats numériques

La Figure 1 présente l'évolution de la composition chimique à l'équilibre de l'argon, l'hélium, l'hydrogène et l'azote en fonction de la température à une pression de 1 bar. L'évolution du nombre de moles de chaque espèce est indiquée pour une mole initiale de chaque gaz à 300 K. Dans le cas des gaz diatomiques, la dissociation aboutit à l'obtention de deux moles par mole initiale. Quel que soit le cas, l'ionisation des espèces monoatomiques mène là aussi à une augmentation du nombre total de moles (1 mole de monoatomiques donne 1 mole d'ions positifs et 1 mole d'électrons). On remarque que le comportement de l'hydrogène et de l'azote vis à vis de la dissociation est différent. La dissociation de l'azote s'effectue en effet à température plus élevée que celle de l'hydrogène. Concernant l'ionisation des espèces monoatomiques, si elle s'effectue dans une gamme de température très semblable pour l'argon, l'hydrogène et l'azote, on remarque qu'elle se produit plus tardivement pour l'hélium dont l'ionisation n'apparaît qu'au delà de 12000K.

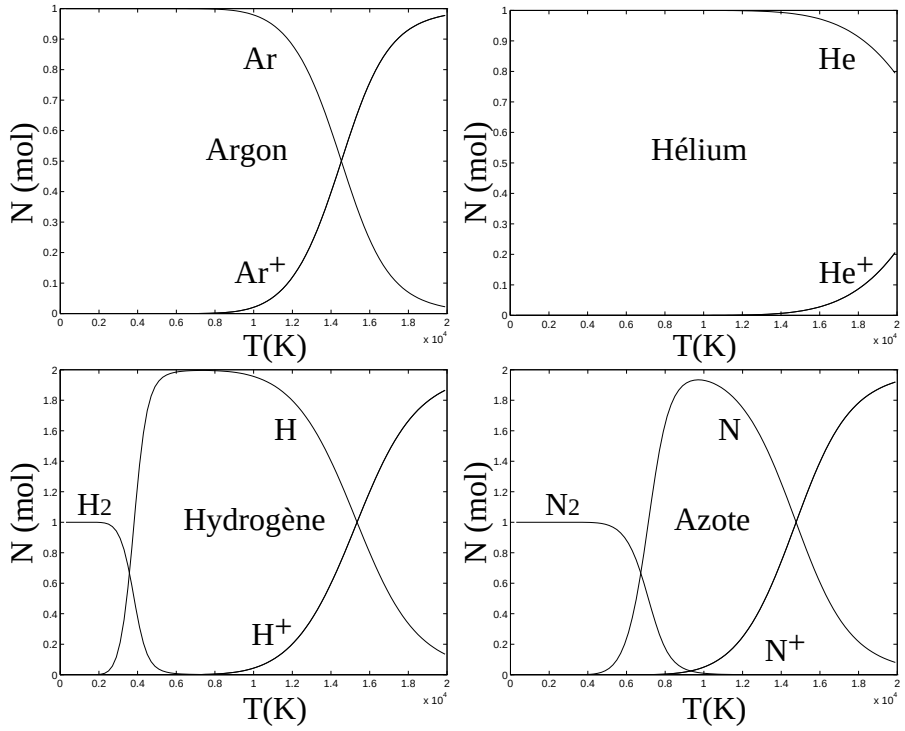


Figure 1 *: Evolution de la composition chimique à l'équilibre des plasmas d'argon, d'hélium, d'hydrogène et d'azote en fonction de la température à une pression de 1 bar.*

La Figure 2 présente l'évolution de la composition chimique du mélange argon/hydrogène (40/14) toujours pour une mole initiale de ce mélange à 300 K. Si l'échelle linéaire présente l'avantage de fournir plus de précision concernant les espèces majoritaires, elle présente aussi l'inconvénient de ne pas faire apparaître les espèces minoritaires. La représentation en échelle semi-logarithmique (Figure 3) permet de corriger ce défaut tout en perdant de la lisibilité pour les espèces majoritaires.

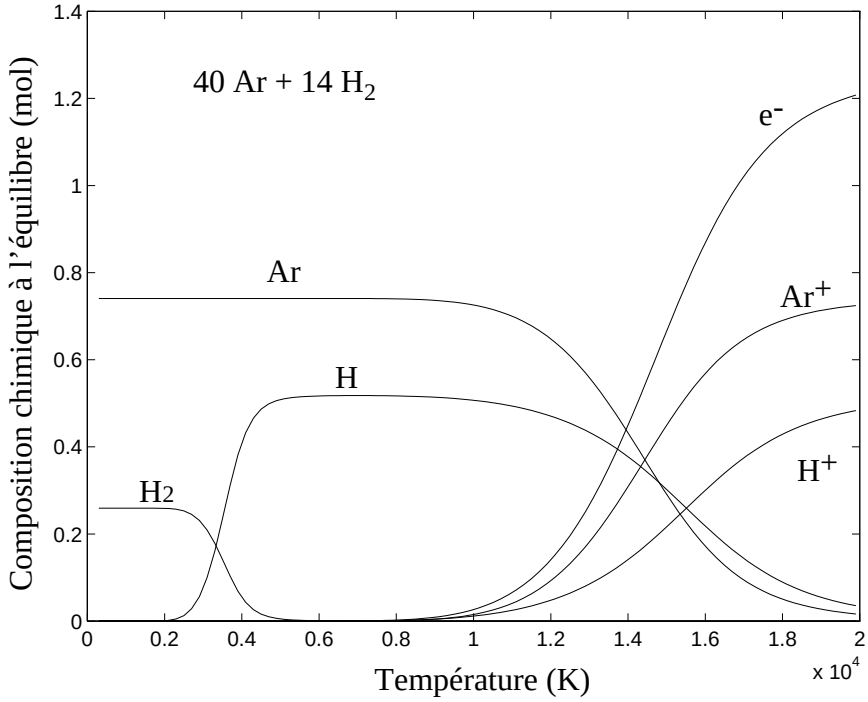


Figure 2 *: Evolution de la composition chimique à l'équilibre du mélange argon/hydrogène (40/14) en fonction de la température à la pression de 1 bar.*

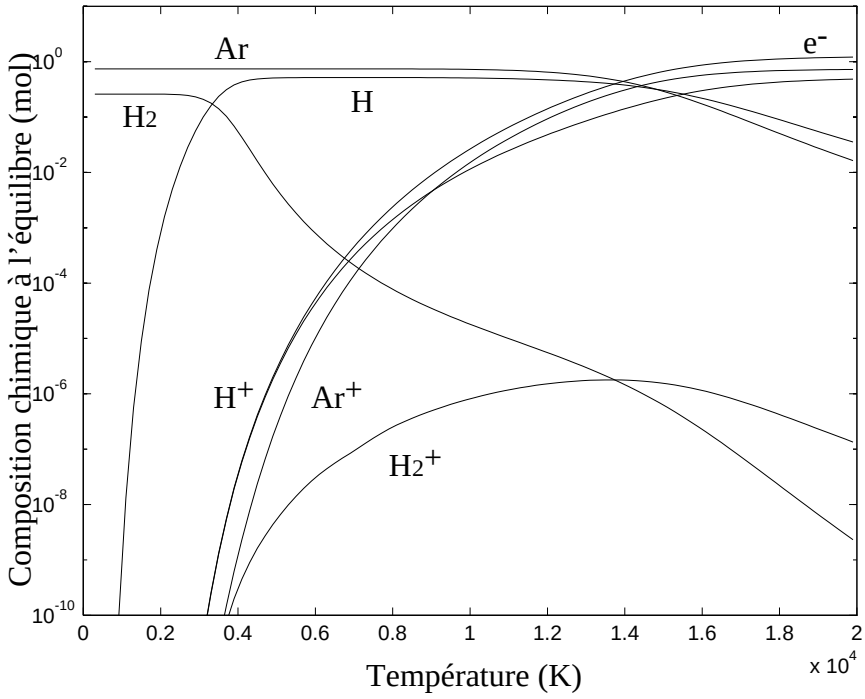


Figure 3 *: Evolution de la composition chimique à l'équilibre du mélange argon/hydrogène (40/14) en fonction de la température à la pression de 1 bar (représentation semi-log)*

En comparant les allures des représentations des compositions des plasmas d'argon et d'hydrogène à celle du mélange argon/hydrogène (40/14), on pourrait penser qu'il est possible de déduire la composition d'un mélange par sommation à partir de celle des gaz qui le constitue. En fait il n'en est rien et les taux de dissociation et d'ionisation dans le mélange varient en fonction des proportions de chaque gaz au sein du mélange. Ceci est lié au fait que la pression partielle de chaque espèce intervenant dans l'expression des potentiels chimiques est différente suivant le taux de dilution de l'espèce. La Figure 4 présente un exemple de cet effet (paradoxe de Gibbs). Les taux de dissociation de l'hydrogène sont représentés pour différents mélanges argon/hydrogène. Dans la gamme de température de dissociation de l'hydrogène, l'argon peut être considéré comme un gaz neutre qui modifie uniquement les pressions partielles des différentes espèces. Son effet sur la dissociation de l'hydrogène est donc comparable à celui d'une diminution de pression et a donc tendance à augmenter le taux de dissociation quand la proportion d'argon augmente. Nous avons ici défini le taux de dissociation de l'hydrogène comme étant de rapport entre la quantité d'hydrogène sous forme monoatomique à l'abondance de l'élément H ($n_H / b_H = n_H / \left(n_H + 2n_{H_2} \right)$).

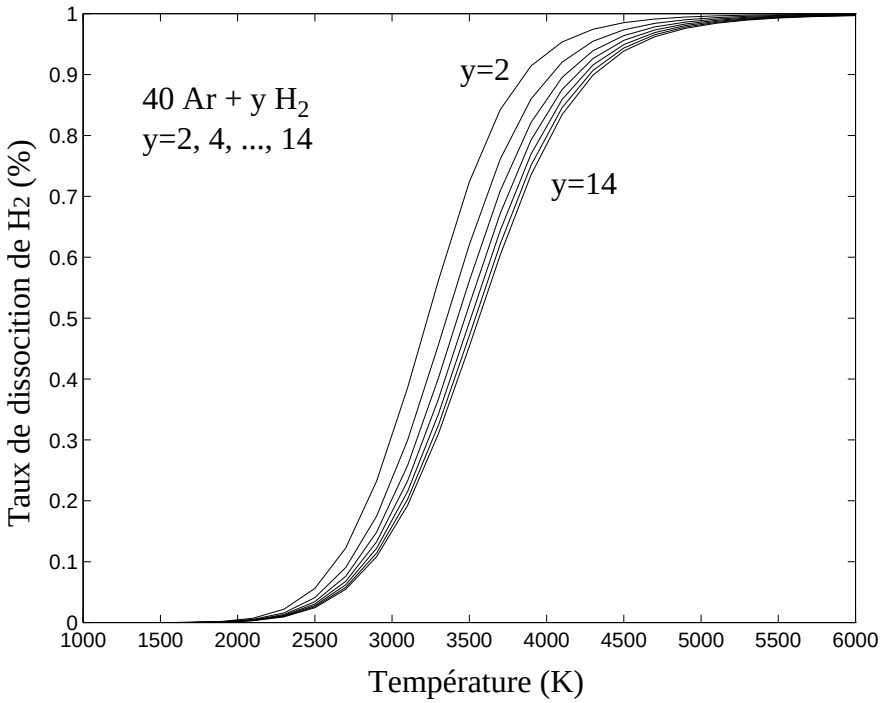


Figure 4 *: Evolution du taux de dissociation de l'hydrogène en fonction de son taux de dilution au sein d'un mélange argon/hydrogène.*

1.2. Propriétés thermodynamiques des mélanges plasma

1.2.1. Déduction à partir de la composition

Après avoir exposé la méthode de détermination de la composition chimique des plasmas, il est important d'expliciter la procédure d'obtention des propriétés thermodynamiques.

♦ les fractions molaires de chaque espèce

$$x_i = \frac{n_i}{n_t} = n_i \Big/ \sum_{i=1}^{N} n_i$$

♦ les fractions massiques

$$y_i = \frac{m_i}{m_t} = n_i M_i \Big/ \sum_{i=1}^{N} n_i M_i$$

♦ la masse molaire M en kg.mol^{-1}

$$M = \sum_{i=1}^{N} x_i M_i \qquad \text{ou} \qquad \frac{1}{M} = \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i}{M_i}$$

♦ l'enthalpie spécifique massique h en J.kg^{-1}

$$h = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{N} x_i H_i = \sum_{i=1}^{N} y_i \frac{H_i}{M_i}$$

(H_i désigne l'enthalpie molaire de l'espèce i)

♦ la chaleur spécifique massique en $J.kg^{-1}.K^{-1}$

$$Cp = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P$$

L'expression des dérivées thermodynamiques permet également de déduire la vitesse du son au sein du milieu. Par définition, la vitesse du son *c* dans le milieu vérifie

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_S = \left(\frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho}\right)_S \frac{P}{\rho} = \gamma_S \frac{P}{\rho}$$

En exprimant la dérivée thermodynamique à entropie constante en fonction des dérivées thermodynamiques à température constante et à pression constante dans le cas des milieux réactifs, Zeleznik et Gordon [4] arrivent finalement à l'expression de γ_S suivante

$$\gamma_S = \left(\frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho}\right)_S = \frac{C_p}{C_p\left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln P}\right)_T - \frac{R}{M}\left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T}\right)_P^2}$$

Dans le cas d'un milieu non réactif composé de gaz parfaits, on aurait

$$\left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln P}\right)_T = 1$$

et

$$\left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T}\right)_P = -1$$

si bien que l'on retrouverait

$$\gamma_S = \frac{Cp}{Cp - R/M}$$

1.2.2. Résultats numériques

La Figure 5 présente l'évolution de l'enthalpie de mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à une pression de 1 bar. Les mélanges représentés correspondent à un plasma contenant 40 Nl d'argon pour y Nl d'hydrogène avec y évoluant de 0 à 14 par pas de 2. L'enthalpie massique de l'hydrogène étant bien plus importante que celle de l'argon, l'enthalpie massique des mélanges argon/hydrogène augmente avec la fraction d'hydrogène. Les pics observés sur les courbes des chaleurs spécifiques (Figure 6) sont liés aux réactions chimiques. A température donnée, ils traduisent la part de l'énergie utilisée pour dissocier ou ioniser les espèces plutôt que pour augmenter la température. La chaleur spécifique étant la dérivée de l'enthalpie, à chaque augmentation de la pente de la courbe représentant l'enthalpie correspond un pic sur la chaleur spécifique.

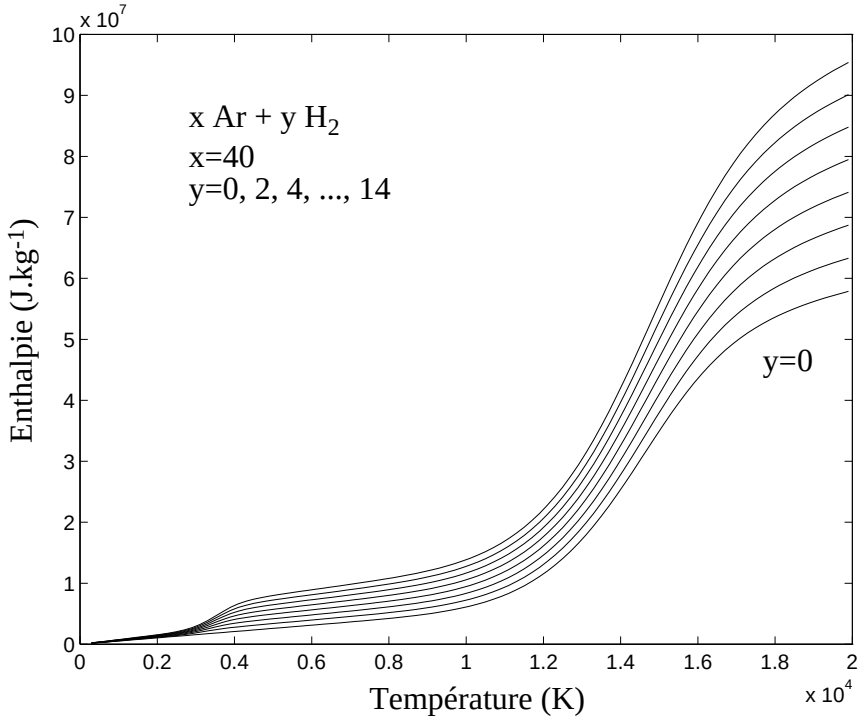


Figure 5 *: Evolution de l'enthalpie massique des mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à la pression de 1 bar*

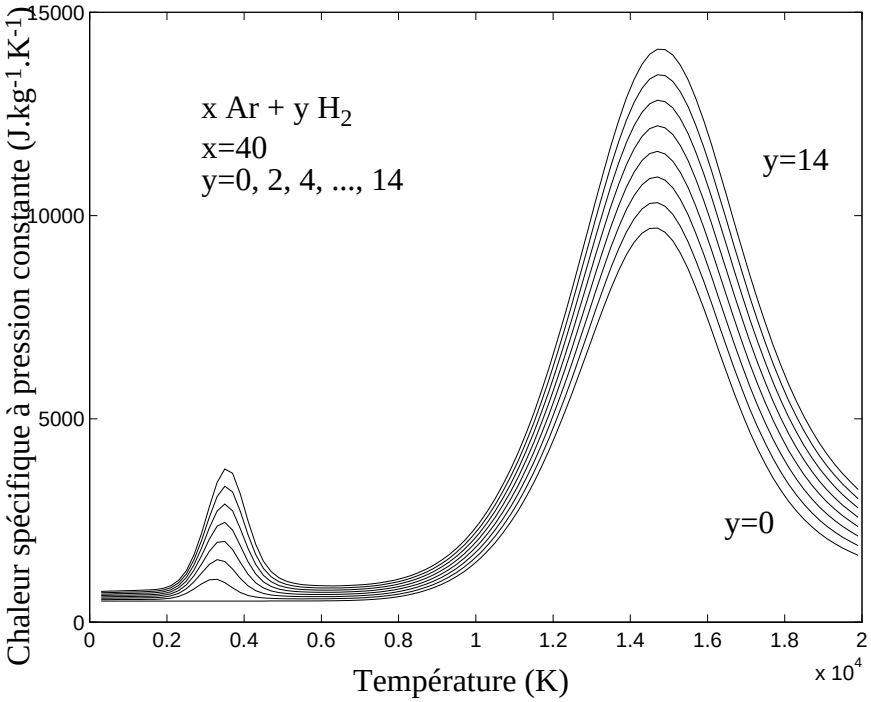


Figure 6 *: Evolution de la chaleur spécifique à pression constante des mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à la pression de 1 bar*

La Figure 7 présente l'évolution de la masse molaire pour les mélanges argon/hydrogène précités. Lors de la dissociation de H_2, pour une masse donnée, il y a augmentation du nombre de moles, si bien que la masse molaire des mélanges argon/hydrogène diminue par paliers. Le mécanisme est identique lors de l'ionisation des atomes d'argon et d'hydrogène.

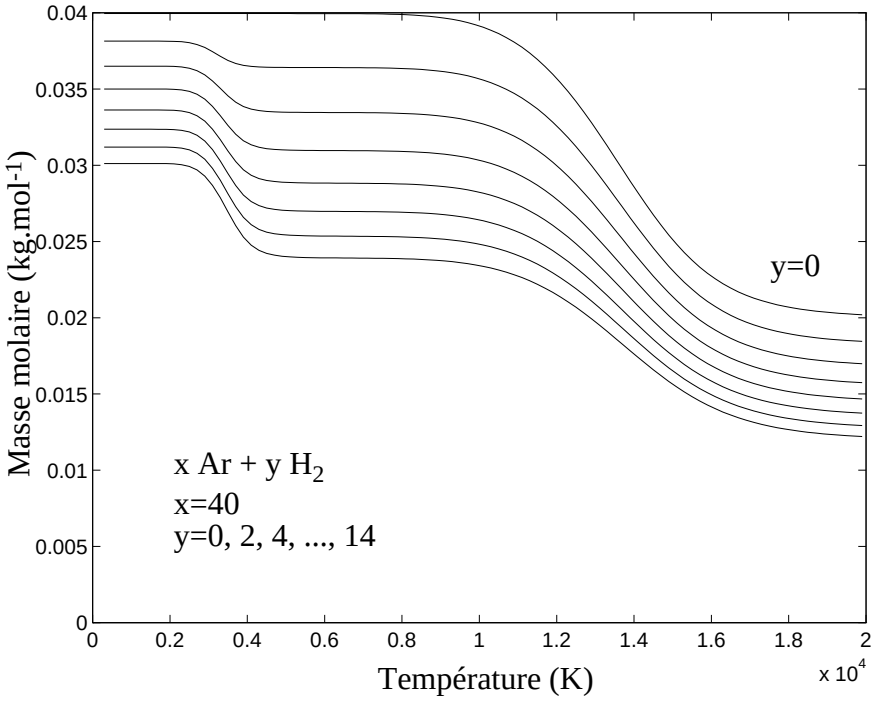


Figure 7 *: Evolution de la masse molaire des mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à une pression de 1 bar.*

La Figure 8 présente l'évolution de la dérivée $(\partial \ln V / \partial \ln T)_P$ pour les mêmes mélanges argon/hydrogène. V étant le volume massique, on a $V = 1/\rho$ et $\ln V = -\ln \rho$. La dérivée $(\partial \ln V / \partial \ln T)_P$ est égale à 1 dans le cas d'un mélange de gaz parfaits non réactifs. Dans le cas présent, la dissociation de H_2 se traduit par une augmentation de 50% pour le mélange 40/14 alors que l'ionisation conduit à des valeurs supérieures à 2.5 pour une température de 15000K.

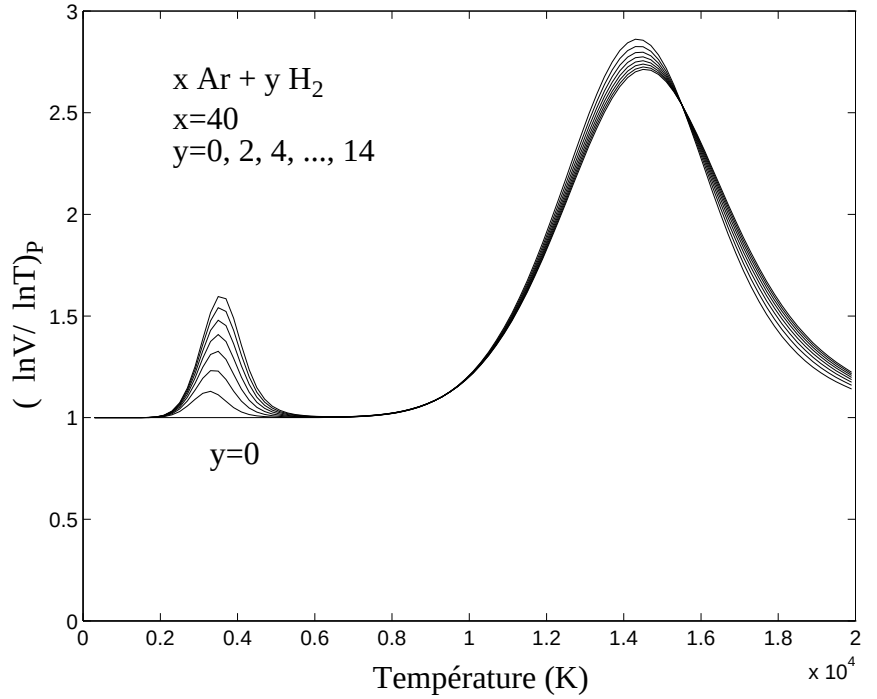


Figure 8 *: Evolution de la dérivée $(\partial \ln V / \partial \ln T)_P$ pour différents mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à une pression de 1 bar.*

La Figure 9 présente l'évolution de la dérivée $(\partial \ln V / \partial \ln P)_T$ en fonction de la température à une pression de 1 bar. La valeur de cette dérivée pour un mélange de gaz parfaits non réactifs serait de -1. Si on note une évolution très semblable à celle de la dérivée précédente (Figure 8), l'amplitude des variations est néanmoins beaucoup plus faible et la dérivée reste comprise entre –1 et –1.13 sur toute la gamme de température. Ceci traduit le fait que l'influence de la température est plus importante que celle de la pression sur la composition d'un gaz à l'équilibre.

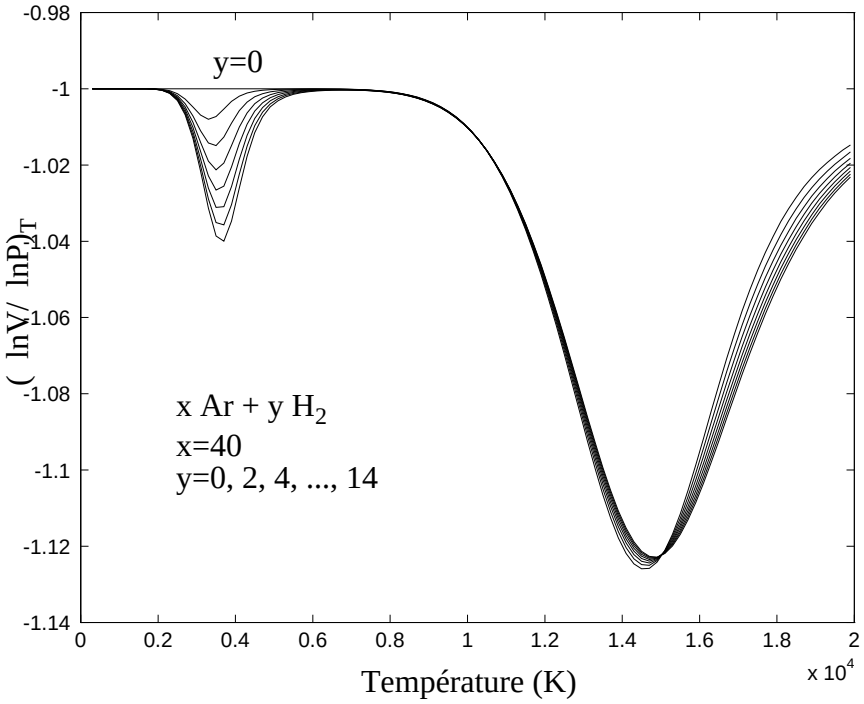


Figure 9 *: Evolution de la dérivée $(\partial \ln V / \partial \ln P)_T$ pour différents mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à une pression de 1 bar.*

La Figure 10 présente l'évolution de la dérivée $\gamma_s = (\partial \ln P / \partial \ln \rho)_s$ en fonction de la température à une pression de 1 bar. Pour l'argon pur, γ_s reste égal à 5/3 tant que la température reste inférieure à 6000 K. En revanche, γ_s est très sensible à la fraction de H_2 présente dans le mélange : même pour un mélange contenant peu d'hydrogène (5%), γ_s est inférieur à 1.4 au voisinage de 3000 K. Quelle que soit la proportion d'hydrogène, γ_s chute rapidement à partir de 6000 K pour atteindre des valeurs inférieures à 1.2 à 12000 K.

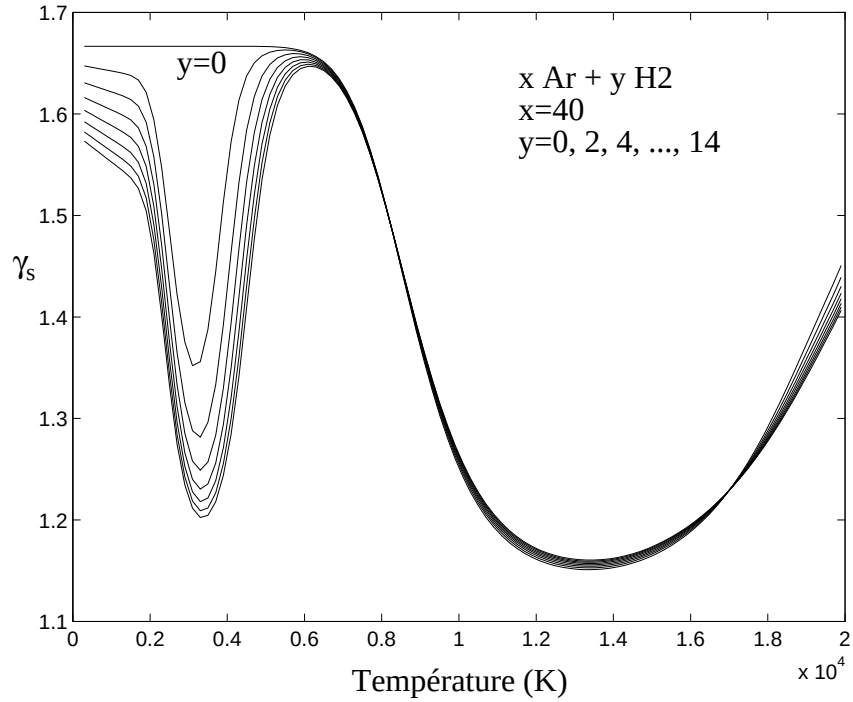


Figure 10 *: Evolution de la dérivée* $\gamma_s = (\partial \ln P / \partial \ln \rho)_s$ *pour différents mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à une pression de 1 bar.*

La Figure 11 présente l'évolution de la vitesse du son en fonction de la température pour les mélanges cités précédemment. On remarque qu'à T=3000 K, l'évolution du γ_s fait plus que compenser la diminution de la masse molaire et que la vitesse du son est peu dépendante de la fraction d'hydrogène. Par contre, au delà de 5000 K, la vitesse du son au sein du milieu augmente avec la proportion d'hydrogène qu'il contient, ceci dû à la diminution de la masse molaire.

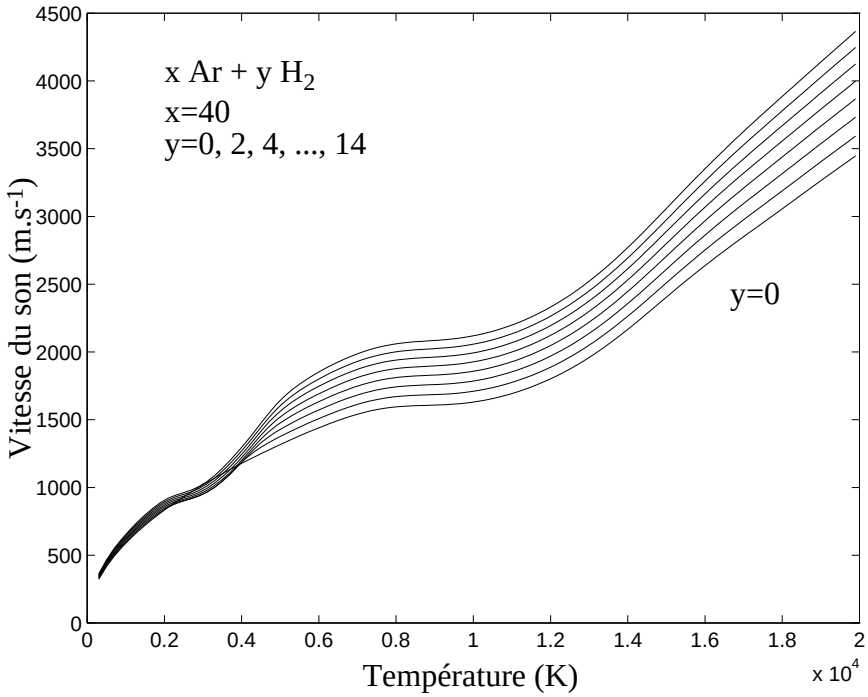


Figure 11 : *Evolution de la vitesse du son au sein de différents mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à une pression de 1 bar.*

Dans un souci d'alléger cette partie, des commentaires similaires pouvant être faits pour les autres mélanges, seuls les résultats obtenus pour l'exemple des mélanges argon/hydrogène ont été présentés ici. La Figure 12 est néanmoins présentée de manière à se rendre compte de la validité de l'hypothèse γ_s constant. Pour les gaz monoatomiques, $\gamma_s = 5/3$ reste valide jusqu'à 6000 K pour l'argon et jusqu'à 9000 K pour l'hélium. Au delà, l'effet d'ionisation est significatif et γ_s chute rapidement. Pour les gaz diatomiques, l'hypothèse $\gamma_s = 7/5$ n'est valide qu'à basse température. Dès que celle-ci augmente, l'évolution de la chaleur spécifique à pression constante provoque une diminution du γ_s. L'effet de dissociation va ensuite dans le même sens. Dans le cas de l'hydrogène et de l'oxygène (qui se dissocient plus tôt que l'azote), γ_s remonte du fait de la présence quasi exclusive de monoatomiques à 6000 K.

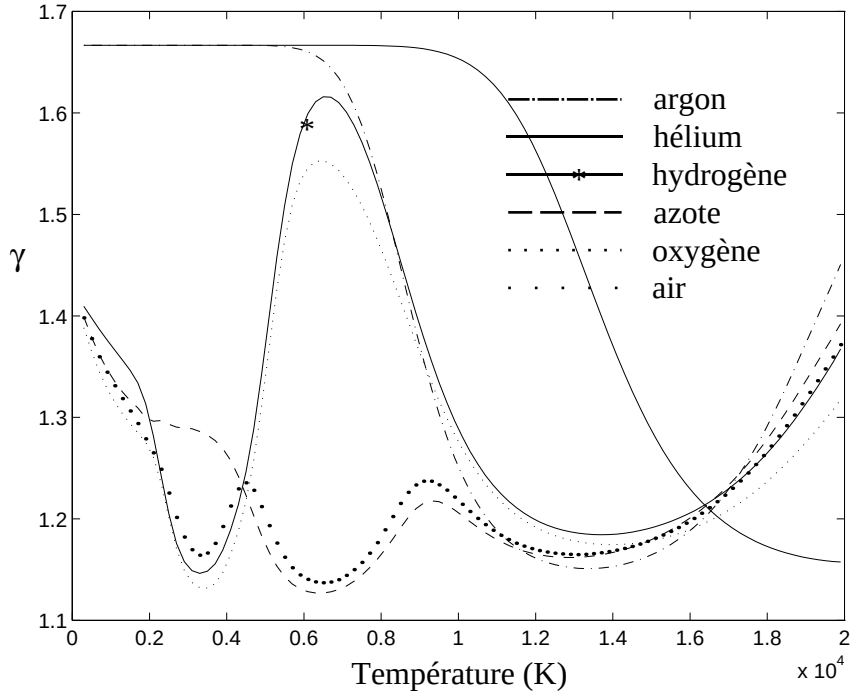


Figure 12 : *Evolution du γ_S de différents plasmas en fonction de la température à une pression de 1bar.*

1.3. Coefficients de transport

Nous venons d'exposer une méthode de calcul permettant de déterminer les propriétés thermodynamiques de plasmas couramment utilisés en projection thermique. L'étape suivante concerne le calcul des coefficients de transport : viscosité, conductivité thermique, coefficients de diffusion, conductivité électrique. Ce calcul, plus délicat que celui des propriétés thermodynamiques fait intervenir la théorie cinétique des gaz [5], traduisant les forces d'interactions entre les particules composant un mélange. Sans faire mention de plus de détails sur cette théorie, on aboutit finalement à l'expression des coefficients de transport en fonction de la masse atomique ou molaire des différents composants, de la température, ainsi que d'une série d'intégrales de collision qui

dépendent des interactions entre espèces [5, 6, 7]. La difficulté de ce calcul réside dans l'estimation des potentiels d'interaction entre espèces qui sera déterminante au niveau des résultats numériques. Dans la littérature, différentes formulations sont utilisées pour expliciter les intégrales de collision. Finalement, nous avons retenu la formulation utilisée par Devoto qui peut s'appliquer à tous les types de potentiels.

1.3.1. Espèces pures

Les coefficients de transport des espèces pures sous forme gazeuse peuvent s'exprimer en fonction de leur masse atomique ou molaire, de la température du milieu et d'intégrales de collision $\overline{Q}_{ij}^{(L,S)}$ représentant les influences de la géométrie des particules (taille) et de la façon dont elles interagissent.

La viscosité dynamique d'une espèce pure s'exprime suivant

$$\mu_i = \frac{5}{16}\frac{\sqrt{\pi m_i kT}}{\overline{Q}_{ii}^{(2,2)}} \qquad (kg.m^{-1}.s^{-1})$$

Pour une espèce monoatomique, la conductivité thermique est reliée à la viscosité dynamique par la relation

$$\lambda_i^0 = \frac{15}{4}\frac{k}{m_i}\mu_i = \frac{15}{4}\frac{R}{M_i}\mu_i = \frac{75}{64}\frac{\sqrt{\pi k^3 T/m_i}}{\overline{Q}_{ii}^{(2,2)}} \qquad (W.m^{-1}.K^{-1})$$

Dans le cas d'une espèce diatomique ou autre, on inclut une contribution due à la présence des degrés de liberté internes de l'espèce. Finalement, on a

$$\lambda_i = \lambda_i^0 + \lambda_i^{\text{int}} = \frac{R}{M_i}\left[\frac{15}{4} + f_{\text{int}}\left(\frac{Cp_i}{R} - \frac{5}{2}\right)\right]\mu_i$$

avec $f_{\text{int}} = \dfrac{\rho_i \mathcal{D}_{ii}}{\mu_i}$

Cette correction est due à Eucken qui proposait initialement $f_{\text{int}} = 1$.

Le coefficient de self diffusion $\mathcal{D}_{ii}$ s'écrivant

$$\mathcal{D}_{ii} = \frac{3}{8}\frac{\sqrt{\pi k^3 T^3/m_i}}{P\,\overline{Q}_{ii}^{(1,1)}} \qquad (m^2.s^{-1})$$

on arrive finalement à

$$\lambda_i^{\text{int}} = \frac{3}{8}\frac{\sqrt{\pi k^3 T/m_i}}{\overline{Q}_{ii}^{(1,1)}}\left(\frac{Cp_i}{R} - \frac{5}{2}\right)$$

Dans toutes ces expressions, les intégrales de collision notées $\overline{Q}_{ii}^{(L,S)}$ seront explicitées par la suite en fonction des potentiels d'interactions. Néanmoins, certains auteurs utilisent l'intégrale de collision $\overline{\Omega}_{ii}^{(L,S)}$ à rapprocher de $\overline{Q}_{ii}^{(L,S)}$ par la relation

$$\overline{Q}_{ii}^{(L,S)} = \pi \overline{\Omega}_{ii}^{(L,S)}$$

1.3.2. Cas des mélanges

Dans le cas des mélanges de gaz [5], on fait intervenir les coefficients binaires suivant

- Viscosité:

$$\mu_{ij} = \frac{5}{16}\frac{\sqrt{2\pi m_i m_j kT/(m_i + m_j)}}{\overline{Q}_{ij}^{(2,2)}}$$

- Conductivité thermique

$$\lambda_{ij}^{0} = \frac{75}{64}k\frac{\sqrt{(m_i + m_j)\pi kT/2m_i m_j}}{\overline{Q}_{ij}^{(2,2)}}$$

- Coefficient de diffusion

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{3}{8}\frac{\sqrt{(m_i + m_j)\pi k^3 T^3/2m_i m_j}}{P\,\overline{Q}_{ij}^{(1,1)}}$$

ainsi que des coefficients adimensionnels, exprimant les rapports entre différentes intégrales de collision

$$A_{ij}^{*} = \overline{Q}_{ij}^{(2,2)} / \overline{Q}_{ij}^{(1,1)}$$
$$B_{ij}^{*} = \left\{5\overline{Q}_{ij}^{(1,2)} - 4\overline{Q}_{ij}^{(1,3)}\right\} / \overline{Q}_{ij}^{(1,1)}$$
$$C_{ij}^{*} = \overline{Q}_{ij}^{(1,2)} / \overline{Q}_{ij}^{(1,1)}$$
$$E_{ij}^{*} = \overline{Q}_{ij}^{(2,3)} / \overline{Q}_{ij}^{(2,2)}$$
$$F_{ij}^{*} = \overline{Q}_{ij}^{(3,3)} / \overline{Q}_{ij}^{(1,1)}$$
$$G_{ij}^{*} = \overline{Q}_{ij}^{(4,4)} / \overline{Q}_{ij}^{(2,2)}$$

Ces coefficients adimensionnels sont souvent mentionnés dans la littérature dans la mesure où ils permettent la manipulation de grandeurs proches de l'unité, ce qui est plus pratique notamment lors de la tabulation des données.

a) Viscosité

Pour le calcul de la viscosité, nous avons utilisé la méthode décrite par Hirschfelder [5] et utilisée par l'ensemble des auteurs traitant de l'estimation des coefficients de transport des plasmas

$$\mu_{mix} = -\begin{vmatrix} H_{11} & \cdots & H_{1N} & x_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ H_{1N} & \cdots & H_{NN} & x_N \\ x_1 & \cdots & x_N & 0 \end{vmatrix} \Bigg/ \begin{vmatrix} H_{11} & \cdots & H_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{1N} & \cdots & H_{NN} \end{vmatrix}$$

où x_i désigne la fraction molaire de l'espèce i et où les coefficients H_{ij} sont définis par

$$H_{ii} = \frac{x_i^2}{\mu_i} + \sum_{\substack{k=1 \\ k\neq i,\,e}}^{N} \frac{2x_i x_k}{\mu_{ik}} \frac{m_i m_k}{(m_i + m_k)^2}\left[\frac{5}{3A_{ik}^{*}} + \frac{m_k}{m_i}\right]$$

et

$$H_{\substack{ij \\ i\neq j}} = -\frac{2x_i x_j}{\mu_{ij}} \frac{m_i m_j}{\left(m_i + m_j\right)^2} \left[\frac{5}{3A_{ij}^*} - 1 \right]$$

b) Conductivité thermique

Concernant la conductivité thermique, conformément aux travaux de nombreux auteurs, nous avons décomposé cette grandeur en quatre contributions que nous avons calculées séparément

$$\lambda = \lambda_{tr} + \lambda_{\text{int}} + \lambda_{tre-} + \lambda_R$$

Comme pour le calcul de la viscosité, les expressions décrites par Hirschfelder [5] ont été utilisées pour calculer les contributions de la conductivité thermique de translation des lourds et des degrés de liberté internes. Ces expressions sont toujours utilisées par les différents auteurs traitant du calcul des coefficients de transport des plasmas.

- Pour la conductivité thermique de translation des espèces lourdes, il vient

$$\lambda_{tr} = 4 \begin{vmatrix} L_{11} & \cdots & L_{1N} & x_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ L_{1N} & \cdots & L_{NN} & x_N \\ x_1 & \cdots & x_N & 0 \end{vmatrix} \Bigg/ \begin{vmatrix} L_{11} & \cdots & L_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{1N} & \cdots & L_{NN} \end{vmatrix}$$

où les coefficients L_{ij} sont cette fois définis par

$$L_{ii} = -\frac{4x_i^2}{\lambda_i^0} - \sum_{k\neq i,e}^{N} \frac{2x_i x_k \left[\frac{15}{2} m_i^{\,2} + \frac{25}{4} m_k^{\,2} - 3m_k^{\,2} B_{ik}^* + 4m_i m_k A_{ik}^* \right]}{\left(m_i + m_k\right)^2 A_{ik}^* \lambda_{ik}^0}$$

et

$$L_{\substack{ij \\ i\neq j}} = \frac{2x_i x_j m_i m_j}{\left(m_i + m_j\right)^2 A_{ij}^* \lambda_{ij}^0} \left[\frac{55}{4} - 3B_{ij}^* - 4A_{ij}^* \right]$$

Remarque : Pour la conductivité thermique de translation des espèces lourdes comme pour la viscosité, *N* n'inclut pas l'espèce électron.

- La contribution des degrés de liberté internes est déterminée suivant une extension de la théorie d'Eucken au cas des mélanges. On a

$$\lambda_{\text{int}} = \sum_i \frac{x_i \left(\lambda_i - \lambda_i^0\right)}{\sum_j x_j \frac{\mathcal{D}_{ii}}{\mathcal{D}_{ij}}}$$

et en utilisant

$$\lambda_i^{\text{int}} = \left(\lambda_i - \lambda_i^0\right) = \frac{P\mathcal{D}_{ii}}{T} \left(\frac{Cp_i}{R} - \frac{5}{2} \right)$$

on arrive à

$$\lambda_{\text{int}} = \frac{P}{T} \sum_i \frac{x_i \left(\frac{Cp_i}{R} - \frac{5}{2} \right)}{\sum_j x_j / \mathcal{D}_{ij}}$$

- La conductivité thermique de translation des électrons est déterminée suivant la méthode de Devoto reprise par Capitelli [8, 9], Bonnefoi [10] ou Aubreton [3, 11] par exemple. Elle s'exprime de la manière suivante

$$\lambda_{tre} = \frac{75}{64} x_e^2 \left(\frac{2\pi k^3 T}{m_e} \right)^{1/2} q^{(2,2)} \Big/ \begin{vmatrix} q^{(1,1)} & q^{(1,2)} \\ q^{(1,2)} & q^{(2,2)} \end{vmatrix}$$

où x_e est la fraction molaire d'$e-$ et où les termes $q^{(i,j)}$ s'expriment en fonction des intégrales de collision [10] suivant

$$q^{(1,1)} = \sqrt{2} x_e^2 \overline{Q}_{ee}^{(2,2)} + x_e \sum_{i \neq e} x_i \left(\tfrac{25}{4} \overline{Q}_{ie}^{(1,1)} - 15 \overline{Q}_{ie}^{(1,2)} + 12 \overline{Q}_{ie}^{(1,3)} \right)$$

$$q^{(1,2)} = \sqrt{2} x_e^2 \left(\tfrac{7}{4} \overline{Q}_{ee}^{(2,2)} - 2 \overline{Q}_{ee}^{(2,3)} \right) + x_e \sum_{i \neq e} x_i \left(\tfrac{175}{16} \overline{Q}_{ie}^{(1,1)} - \tfrac{315}{8} \overline{Q}_{ie}^{(1,2)} + 57 \overline{Q}_{ie}^{(1,3)} - 30 \overline{Q}_{ie}^{(1,4)} \right)$$

$$q^{(2,2)} = \sqrt{2} x_e^2 \left(\tfrac{77}{16} \overline{Q}_{ee}^{(2,2)} - 7 \overline{Q}_{ee}^{(2,3)} + 5 \overline{Q}_{ee}^{(2,4)} \right)$$

$$+ x_e \sum_{i \neq e} x_i \left(\tfrac{1225}{64} \overline{Q}_{ie}^{(1,1)} - \tfrac{735}{8} \overline{Q}_{ie}^{(1,2)} + \tfrac{399}{2} \overline{Q}_{ie}^{(1,3)} - 210 \overline{Q}_{ie}^{(1,4)} + 90 \overline{Q}_{ie}^{(1,5)} \right)$$

Remarque : dans les références précitées, les termes $q^{(i,j)}$ sont égaux à 8 fois les coefficients indiqués ici et un coefficient 75/8 est utilisé au lieu de 75/64, ce qui revient au même.

- La contribution des réactions chimiques est incluse de manière à tenir compte du transport d'enthalpie dû à la diffusion des espèces par gradient de concentration. Bien que ce terme s'exprime initialement en fonction des coefficients de diffusion multi-composant [12, 13, 14], Butler et Brokaw [15] ont développé une expression où seuls les coefficients de diffusion binaires apparaissent. Afin de pouvoir utiliser cette expression, il y a lieu dans un premier temps de séparer les espèces en deux catégories : celles qui interviennent dans une seule réaction et les autres. On écrit donc chacune des réactions de telle sorte que les espèces apparaissant à gauche n'apparaissent plus à droite dans aucune des réactions (puisqu'elles n'interviennent que dans une seule réaction) et que toutes les autres espèces apparaissent au moins une fois à droite. On obtient donc *M* réactions écrites sous la forme

$$E^i = \sum_{k=M+1}^{N} n_{ik} E^k \qquad i = 1, M$$

où E^i désigne l'espèce i et n_{ik} est le coefficient stœchiométrique de l'espèce E^k apparaissant dans la réaction i.

Ainsi, on arrive à l'expression suivante de la conductivité thermique de réaction

$$\lambda_R = -\frac{1}{RT^2} \begin{vmatrix} 0 & \Delta H_1 & \cdots & \Delta H_M \\ \Delta H_1 & A_{11} & \cdots & A_{1M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta H_M & A_{1M} & \cdots & A_{MM} \end{vmatrix} \Big/ \begin{vmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1M} & \cdots & A_{MM} \end{vmatrix}$$

Capitelli [8, 9] ou Gleizes [16, 17] ont utilisé une expression plus simple des A_{ik} que celle initialement formulée par Butler et Brokaw [15]. Finalement, on obtient

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=j+1}^{N} \frac{RT}{P\mathcal{D}_{kl}} x_k x_l \left(\frac{n_{ik}}{x_k} - \frac{n_{il}}{x_l} \right) \left(\frac{n_{jk}}{x_k} - \frac{n_{jl}}{x_l} \right) \qquad i, j = 1, M$$

ΔH_i correspond à la variation d'enthalpie associée à chaque réaction et dépend de la température

$$\Delta H_i = \sum_{k=M+1}^{N} n_{ik} H_k - H_i \qquad i = 1, M$$

A titre d'exemple, pour un mélange argon/hydrogène, il vient *M=4* et *N=7* et les équations considérées sont

$$Ar = Ar^+ + e^-$$
$$H_2 = 2H^+ + 2e^-$$
$$H_2{}^+ = 2H^+ + e^-$$
$$H = H^+ + e^-$$

Butler et Brokaw [15] ont également donné une expression simplifiée de la conductivité thermique réactive dans le cas particulier d'une réaction unique de dissociation alors que Devoto en a fait de même dans le cas d'une réaction unique d'ionisation [18].

c) Conductivité électrique

La conductivité électrique est calculée suivant la formulation de Devoto utilisée par Aubreton [3, 11] ou Gleizes [16, 17]. Elle s'exprime ainsi suivant

$$\sigma_e = \frac{3}{16} e^2 x_e^2 \left(\frac{2\pi}{m_e kT} \right)^{1/2} \begin{vmatrix} q^{(1,1)} & q^{(1,2)} \\ q^{(1,2)} & q^{(2,2)} \end{vmatrix} \Bigg/ \begin{vmatrix} q^{(0,0)} & q^{(0,1)} & q^{(0,2)} \\ q^{(0,1)} & q^{(1,1)} & q^{(1,2)} \\ q^{(0,2)} & q^{(1,2)} & q^{(2,2)} \end{vmatrix} \qquad (A.V^{-1}.m^{-1})$$

Les $q^{(i,j)}$ manquant [10] s'expriment suivant

$$q^{(0,0)} = x_e \sum_{i \neq e} x_i \overline{Q}_{ie}^{(1,1)}$$

$$q^{(0,1)} = x_e \sum_{i \neq e} x_i \left(\tfrac{5}{2} \overline{Q}_{ie}^{(1,1)} - 3\overline{Q}_{ie}^{(1,2)} \right)$$

$$q^{(0,1)} = x_e \sum_{i \neq e} x_i \left(\tfrac{35}{8} \overline{Q}_{ie}^{(1,1)} - \tfrac{21}{2} \overline{Q}_{ie}^{(1,2)} + 6\overline{Q}_{ie}^{(1,3)} \right)$$

(les autres $q^{(i,j)}$ étant identiques à ceux utilisés dans l'expression de la contribution de la conductivité thermique de translation des électrons)

1.3.3. Détermination des intégrales de collision

Les coefficients de transport ont été exprimés en fonction des intégrales de collision $\overline{Q}_{ij}^{(L,S)}$ qu'il est maintenant nécessaire d'expliciter pour chaque potentiel d'interaction. En règle générale, soit il est possible de calculer assez simplement ces intégrales de collision, soit elles ont été tabulées dans la littérature en fonction de grandeurs adimensionnelles pour un potentiel d'interaction donné. Par conséquent, le calcul de ces intégrales de collision par le biais d'intégrations numériques compliquées [5]

$$\chi(g,b) = \pi - 2b\int_{r_m}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{\varphi(r)}{\frac{1}{2}\mu g^2}}}$$

$$Q^{(L)}(g) = 2\pi\int_0^{\infty} (1 - \cos^L \chi) b \; db$$

$$\overline{Q}^{(L,S)}(T) = \frac{4(L+1)}{(S+1)!\left[2L+1-(-1)^L\right]}\int_0^{\infty} e^{-\gamma^2}\gamma^{2S+3} Q^{(L)}(g) d\gamma$$

avec

$$\gamma^2 = \tfrac{1}{2}\mu g^2 / kT$$

a pu être évité.

χ désigne ici l'angle de déflection lors de la collision, *b* le paramètre d'impact, *g* la vitesse relative et μ la masse réduite des particules qui interagissent $\mu = (m_1 m_2)/(m_1 + m_2)$.

- Interactions entre particules neutres :

Le potentiel le plus simple et qui sert de référence à la définition de grandeurs adimensionnelles pour les autres potentiels est le modèle des “sphères rigides”. Pour une sphère rigide de rayon σ, ce potentiel s’exprime suivant [5]

$$\varphi(r) = \infty \qquad pour\ r < \sigma$$
$$\varphi(r) = 0 \qquad pour\ r > \sigma$$

et on obtient pour chaque intégrale de collision

$$\overline{Q}^{(L,S)} = \pi\sigma^2$$

Le potentiel (12-6) de Lennard-Jones constitue l’un des potentiels les plus utilisés pour les interactions neutre/neutre. Il s’exprime suivant

$$\varphi(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$$

où ε et σ sont deux paramètres caractéristiques des espèces qui interagissent. σ représente la plus petite distance d'approche alors que ε représente l'énergie maximale d'attraction des deux molécules qui interagissent. A grande distance $r >> \sigma$, la partie attractive en $-(\sigma/r)^6$ est dominante alors qu'à courte distance $r << \sigma$, la partie répulsive en $(\sigma/r)^{12}$ domine.

Pour ce potentiel, on trouve les valeurs des intégrales de collision adimensionnelles $\Omega^{(L,S)*}$ tabulées dans la littérature [5, 7] en fonction d’une température adimensionnelle $T^* = kT/\varepsilon$. Cette intégrale de collision est directement reliée à $\overline{Q}^{(L,S)}$ par

$$\overline{Q}^{(L,S)} = \pi\sigma^2\Omega^{(L,S)*}$$

Pour ce potentiel, les valeurs des deux paramètres ε et σ sont assez largement répandues dans la littérature et ce pour une gamme d’espèces chimiques assez large [5, 6, 19].

Dans notre cas, nous avons préféré utiliser le potentiel exponentiel répulsif pour les interactions entre particules neutres car il représente bien les interactions à haute température et peut simultanément interpoler des données à plus basse température [20]. Ce potentiel s'écrit sous la forme

$$\varphi(r) = A\ \exp\left(\frac{-r}{\rho}\right)$$

Dans cette expression, A et ρ sont là aussi des paramètres dépendant des espèces considérées. Monchick [20] a tabulé les intégrales de collision $I^{(L,S)}$ en fonction de la grandeur adimensionnelle $\alpha = \ln(A/kT)$. Ces intégrales se corrèlent aux $\overline{Q}^{(L,S)}$ que nous avons précédemment définies par

$$\overline{Q}^{(L,S)} = \frac{8\pi\alpha^2\rho^2 I^{(L,S)}}{(S+1)!\left[\frac{2L+1-(-1)^L}{2(L+1)}\right]}$$

D'une manière générale, pour chaque interaction neutre/neutre, soit les grandeurs A et ρ étaient directement disponibles dans la littérature, soit nous avons lissé les intégrales de collision proposées par différents auteurs à l'aide d'un potentiel exponentiel répulsif.

Pour l'interaction Ar/Ar par exemple, différentes valeurs de A et ρ ont été proposées dans la littérature. Amdur & Masson [21] avait proposé $A = 32300$ eV et $\rho = 0.224$ Å. Après avoir utilisé ces données dans une première étude du plasma d'Argon [22], Devoto avait ensuite préféré utiliser $A = 7100$ eV et $\rho = 0.258$ Å dans une seconde étude [18]. Toutefois, les données utilisées par Devoto mènent à une surestimation de la viscosité à basses températures auxquelles les résultats obtenus par exemple avec un potentiel de Lennard-Jones [5, 6, 7, 19] sont notamment plus en accord avec les données proposées par Aubreton [3] ou Mexmain [23]. Dans le cas de l'argon, les valeurs couramment retenues lors de l'utilisation du potentiel de Lennard-Jones sont $\sigma = 3.542$ Å et $\varepsilon/k = 93.3$ K [6, 19] ou $\sigma = 3.418$ et $\varepsilon/k = 124$ K [7, 19]. A partir de ces considérations, nous avons déterminé numériquement les valeurs de A et ρ permettant d'interpoler les intégrales de collision obtenues à basse température par Aubreton et Mexmain (ou par utilisation d'un potentiel de Lennard-Jones), et à haute température par Devoto. Finalement, nous avons déduit $A = 2915$ eV et $\rho = 0.2936$ Å. La Figure 13 présente l'évolution de l'intégrale de collision $\overline{Q}^{(2,2)}$ calculée en utilisant les références précédentes ainsi que la solution que nous avons retenue.

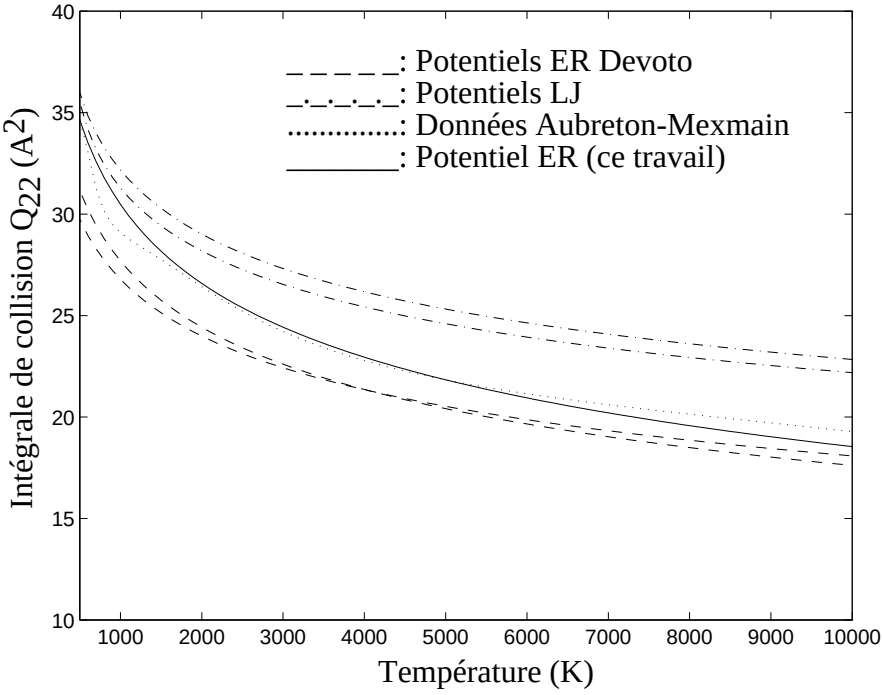


Figure 13 *: Intégrale de collision* $\overline{Q}^{(2,2)}$ *calculée pour l'interaction Ar/Ar pour différents potentiels d'interaction.*

Comme nous pouvons le vérifier sur cette figure, l'intégrale calculée avec le potentiel exponentiel répulsif que nous avons utilisé est proche des données obtenues par utilisation d'un potentiel de Lennard-Jones à basse température et tend vers les données proposées par Devoto à haute température. La différence entre nos résultats et ceux proposés par Aubreton et Mexmain reste relativement faible quelle que soit la température. L'utilisation des potentiels de Lennard-Jones couramment utilisés à basse température mène progressivement à une différence significative quand la température augmente.

Le Tableau 1 présente un récapitulatif des potentiels que nous avons utilisés dans notre étude. La technique de lissage a été retenue non seulement pour Ar/Ar mais aussi pour H/H, N/N, O/O, O_2/O_2 et NO/NO. Les données proposées par Aubreton [3], Mexmain [23], Capitelli et Devoto [24] et Svehla [19] ont été principalement utilisées lors des interpolations.

Interaction	A (eV)	ρ (A)	Référence
Ar-Ar	2915	0.2936	[3, 23] *
He-He	196	0.2368	[25]
H_2-H_2	252.5	0.3002	[25, 26, 27, 3]
H-H	70.25	0.3770	[3] *
N_2-N_2	450	0.3810	[24 ,26]
N-N	483	0.3064	[24] *
O_2-O_2	7910	0.2731	[23] *
O-O	521.5	0.2959	[23] *
Ar-H	138.3	0.3593	[3, 25, 26]
H-H_2	61.5	0.3388	[3, 25, 26, 27]
N-N_2	285	0.3540	[26, 24]
O-O_2	6053	0.2490	[3, 23]
NO-NO	122960	0.2222	[19] *

*: par lissage des données de la référence

Tableau 1 *:* Coefficients des potentiels exponentiel répulsifs utilisés.

Enfin, lorsque les données n'étaient pas disponibles pour les interactions entre deux espèces neutres différentes, nous avons utilisé la règle de Smith [28] pour estimer le potentiel. Smith a en effet proposé

$$\rho_{ij} = \frac{\rho_{ii} + \rho_{jj}}{2}$$

et

$$\left(\frac{A_{ij}}{\rho_{ij}}\right)^{2\rho_{ij}} = \left(\frac{A_{ii}}{\rho_{ii}}\right)^{\rho_{ii}} \left(\frac{A_{jj}}{\rho_{jj}}\right)^{\rho_{jj}}$$

- Interactions entre particules chargées

La principale force interaction étant celle de Coulomb, on utilise le potentiel de Coulomb avec écran ou "Schielded Coulomb Potential" [29]. En utilisant le système d'unité international, il convient d'écrire

$$\varphi(r) = \pm\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\exp\left(-\frac{r}{\lambda_d}\right)$$

où λ_d est la longueur de Debye réduite définie par

$$\lambda_d = \left(\frac{\varepsilon_0 kTV}{n_e e^2}\right)^{1/2}$$

Pour ce potentiel, Masson et al. [29], ont tabulé les intégrales de collision $\Omega^{(L,S)*}$ en fonction de la grandeur adimensionnelle $T^* = kT\lambda_d\left(4\pi\varepsilon_0/e^2\right)$ en différenciant les interactions attractives entre deux particules de charges opposées et répulsives entre deux particules de charges identiques. Ces données ont également été complétées par Devoto [18] pour les ordres supérieurs.

Il vient alors pour $\overline{Q}^{(L,S)}$

$$\overline{Q}^{(L,S)} = \pi\lambda_d^2\,\Omega^{(L,S)*}$$

Quelques années auparavant Devoto [22] avait également proposé une formulation explicite des intégrales $\overline{Q}^{(L,S)}$ en fonction de la température et de la concentration en électrons mais sans différencier les potentiels répulsifs et attractifs. Bien que nous ayons choisi d'utiliser les données tabulées plus récentes, nous avons vérifié que les formulations explicites de Devoto largement utilisées dans la littérature [8, 16, 25, 27] donnent des résultats très voisins et présentent l'avantage d'être plus simples d'utilisation.

- Interactions entre un ion et un neutre

Pour ce type d'interaction, nous avons utilisé le potentiel de polarisation de la particule neutre par l'ion (potentiel attractif). Ce potentiel traduit la force d'interaction liée au déplacement des charges au sein de la particule neutre due à la présence de la particule chargée. Il s'exprime suivant

$$\varphi(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\alpha}{2r^4} = -\frac{V_0}{r^4}$$

où α désigne la polarisabilité de la particule neutre.

Pour ce potentiel, Kihara et al. [30] ont déduit une expression explicite de l'intégrale de collision. Finalement, il vient

$$\overline{Q}^{(L,S)} = \frac{4\pi(L+1)}{(S+1)!\left[2L+1-(-1)^L\right]}\left(\frac{4V_0}{kT}\right)^{1/2}\Gamma(S+2-1/2)\;A^{(L)}(4)$$

Dans cette expression, la fonction Γ [31] est définie par

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1}e^{-t}dt$$

et possède les propriétés suivantes

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi} \qquad \text{et} \qquad \Gamma(x+1) = x\,\Gamma(x)$$

On voit également que la fonction Γ interpole la fonction factorielle et dans le cas de x entier, on a

$$\Gamma(x) = (x-1)!$$

La constante $A^{(L)}(4)$ a été également donnée par Kihara [30] pour des interactions attractives ou répulsives et en réalisant différentes hypothèses quant à l'évolution du potentiel quand r tend vers 0. Nous avons retenu $A^{(1)}(4) = 0.5527$ et $A^{(2)}(4) = 0.3852$, valeurs conseillées par Kihara lui même comme étant les plus réalistes pour le calcul des intégrales de collision. Pour ce potentiel, il vient alors pour les coefficients adimensionnels définis précédemment

$$A^* = (5/4)(0.3852/0.5527) = 0.8712$$

$$B^* = 5/4$$

$$C^* = 5/6$$

...

Les valeurs de ces coefficients ne sont donc pas fonction de la température pour le potentiel de polarisabilité. Les valeurs des polarisabilités des espèces neutres ont également été prises dans la littérature et le Tableau 2 les retranscrit

Atome ou molécule	polarisabilité (Å^3)	Référence
Ar	1.645	[25, 23]
He	0.205	[32]
H_2	0.767	[25, 26, 27, 3]
H	0.67	[25, 26, 27]
N_2	1.76	[26]
N	1.13	[26]
O_2	1.569	[23]
O	0.734	[23]
NO	1.70	[32]

Tableau 2 *:* Polarisabilité des espèces neutres.

Dans le cas de L impair et pour les interactions de type X-X+ entre une espèce neutre et son ion positif associé, il est nécessaire de tenir compte des phénomènes inélastiques (transfert de charge résonnant) dont l'effet devient prédominant [8, 18]. Devoto [22], a proposé une formulation permettant de prendre en compte le transfert de charge résonnant

$$\overline{Q}_{in}^{(L,S)} = A^2 - ABx + \left(\frac{Bx}{2}\right)^2 + \frac{B\zeta}{2}(Bx - 2A)$$

$$+\frac{B^2}{4}\left(\frac{\pi^2}{6} - \sum_{n=1}^{S+1}\frac{1}{n^2} + \zeta^2\right) + \frac{B}{2}\left[B(x+\zeta) - 2A\right]\ln\frac{T}{M} + \left(\frac{B}{2}\ln\frac{T}{M}\right)^2$$

avec

$$x = \ln(4R)$$

et

$$\zeta = \sum_{n=1}^{S+1}\frac{1}{n} - \bar{\gamma}$$

où $\bar{\gamma}$=0.5772 est la constante d'Euler. Devoto ayant utilisé le système CGS pour formuler l'équation précédente, la masse molaire doit être prise en g.mol^{-1} et la constante R en erg.mol^{-1}.K^{-1}. Dans le cas de l'Argon, Devoto avait utilisé $A = 25.61$ et $B = 1.196$ dans sa première étude [22] puis $A = 31.80$ et $B = 1.725$ dans sa seconde [18]. Nous avons préféré utiliser une moyenne pondérée des données plus récentes proposées par Aubreton [11] et Mexmain [23] en fonction du poids statistique de chaque état. Dans le cas des interactions N-N+ et O-O+, nous avons procédé de manière identique en utilisant les données de Capitelli et Devoto [24] pour l'azote et de Mexmain

[23] pour l'oxygène. Dans ce cas, nous avons utilisé la formulation suivante pour déduire les coefficients A et B moyens

$$\overline{Q}^{(1,1)} = \sum_n \overline{Q}_n^{(1,1)} p_n \Big/ \sum_n p_n$$

où p_n représente le poids statistique de l'état k. Nous avons vérifié que la concordance était parfaite pour $\overline{Q}^{(1,1)}$ quelle que soit la température et que l'approximation était suffisante pour les autres $\overline{Q}^{(1,S)}$.

Le Tableau 3 présente les valeurs de A et B utilisées pour chaque interaction.

Interaction	A	B	Référence
Ar/Ar^+	21.72	0.936	[11, 23]*
He/He^+	20.46	0.947	[25]
H/H^+	28.69	1.300	[3 ,11]
H_2/H_2^+	22.59	1.132	[3]
N/N^+	15.68	0.667	[24]*
N_2/N_2^+	20.58	0.895	[24]
O/O^+	14.47	0.620	[23]*
O_2/O_2^+	24.35	1.126	[23]

*: à partir des intégrales de collision et du poids statistique de chaque état.

Tableau 3 *:* Coefficients pour l'influence du transfert de charge résonnant.

L'influence du transfert de charge a été négligée pour $NO\text{-}NO^+$ comme elle aurait pu l'être pour $N_2\text{-}N_2^+$ ou $O_2\text{-}O_2^+$ dans la mesure où ces espèces ne sont présentes qu'en faible quantité au sein des plasmas.

Enfin, dans le but de tenir compte à la fois des interactions élastiques (polarisation) et inélastiques (transfert de charge résonnant), nous avons utilisé la formulation de Murphy [33, 34] qui propose

$$\overline{Q}_{XX^+}^{1S} = \sqrt{\overline{Q}_{XX^+\,él}^{1S\ \ 2} + \overline{Q}_{XX^+\,in}^{1S\ \ 2}}$$

Précisons une nouvelle fois que l'influence du transfert de charge n'a été prise en compte que pour L=1 (ou autrement dit pour les intégrales de type diffusion) et uniquement dans le cas de l'interaction entre une espèce et son ion positif associé. La prise en compte du transfert de charge entraîne une diminution des valeurs des coefficients $A^* = \overline{Q}^{(2,2)} / \overline{Q}^{(1,1)}$ pour les interactions concernées. Cet effet implique que la formulation de Wilke [35] pour le calcul de la viscosité des mélanges ne peut plus être utilisée à haute température dans la mesure où elle suppose notamment une valeur moyenne des coefficients A^* pour toutes les interactions.

- Interactions électron/neutre

Dans le cas des interactions entre électrons et espèces neutres, nous avons soit utilisé directement les données des intégrales de collision disponibles dans la littérature [3, 18, 22, 23, 24, 11, 36], soit

réalisé l'intégration numérique des données d'Itikawa [37, 38] concernant les sections efficaces de transfert de quantité de mouvement $Q^{(1)}$ lorsque nous n'avions pas d'autres données. Il vient alors

$$\overline{Q}^{(1,S)} = \frac{2}{(S+1)!}\int_0^\infty \exp(-g^2)g^{2S+3}Q^{(1)}(g)dg$$

Dans ce cas, ces données ne couvrant pas un domaine d'énergie suffisamment large, il est nécessaire de les extrapoler comme le propose Murphy [33, 34] ou Pateyron [25]. L'intégrale de collision $\overline{Q}^{(1,1)}$ étant très peu sensible à l'extrapolation, seule celle-ci a été calculée tandis que les autres ont été estimées par utilisation des coefficients A^*, B^*, C^*... déduits du potentiel de polarisation. Cette approche nous a semblé préférable à l'extrapolation des données d'Itikawa pour toutes les intégrales de collision dans la mesure où leurs valeurs deviennent de plus en plus sensibles à la façon d'extrapoler quand S augmente. Néanmoins, si nous avons accordé peu d'importance à ces intégrales, c'est parce que nous avons pu vérifier qu'elles ne jouaient qu'un rôle très faible quant à la détermination des coefficients de transport. En effet, ces intégrales n'interviennent pas dans le calcul de la viscosité du plasma, de la conductivité thermique de translation des lourds et de la contribution des degrés de liberté internes. En fait, dans le cas de la conductivité thermique, seule la contribution des électrons est influencée et ce uniquement pour de basses températures auxquelles les autres contributions sont largement supérieures. En ce qui concerne la conductivité électrique (susceptible d'être influencée à basse température), la comparaison de nos valeurs avec celles fournies par Boulos, Fauchais et Pfender [39] indique que l'approximation que nous réalisons est tout à fait acceptable. Lors de l'utilisation des données de la littérature, celles-ci n'étant généralement fournies que pour l'intégrale $\overline{Q}^{(1,1)}$, une hypothèse similaire a été réalisée pour déterminer les intégrales d'ordre supérieur.

1.3.4. Résultats numériques

La Figure 14 présente, selon différentes sources, l'évolution de la viscosité du plasma d'argon en fonction de la température à une pression de 1 bar. Comme on pouvait s'y attendre au vu des intégrales $Q^{(2,2)}$ calculées pour l'interaction Ar/Ar par différents auteurs (Figure 13), nos résultats sont en bon accords avec ceux de Boulos & al. [39] tant que l'espèce Ar est majoritaire au sein du mélange. Néanmoins, à haute température, quand le milieu devient fortement ionisé, nos résultats s'éloignent peu à peu de ceux de Boulos & al mais restent en parfait accord avec ceux de Devoto [18]. Les résultats obtenus récemment par Murphy [34] (que nous n'avons pas fait apparaître car non disponibles sous forme tabulée), sont également en meilleur accord avec les données de Devoto, ce qui semble donc renforcer la validité de nos données.

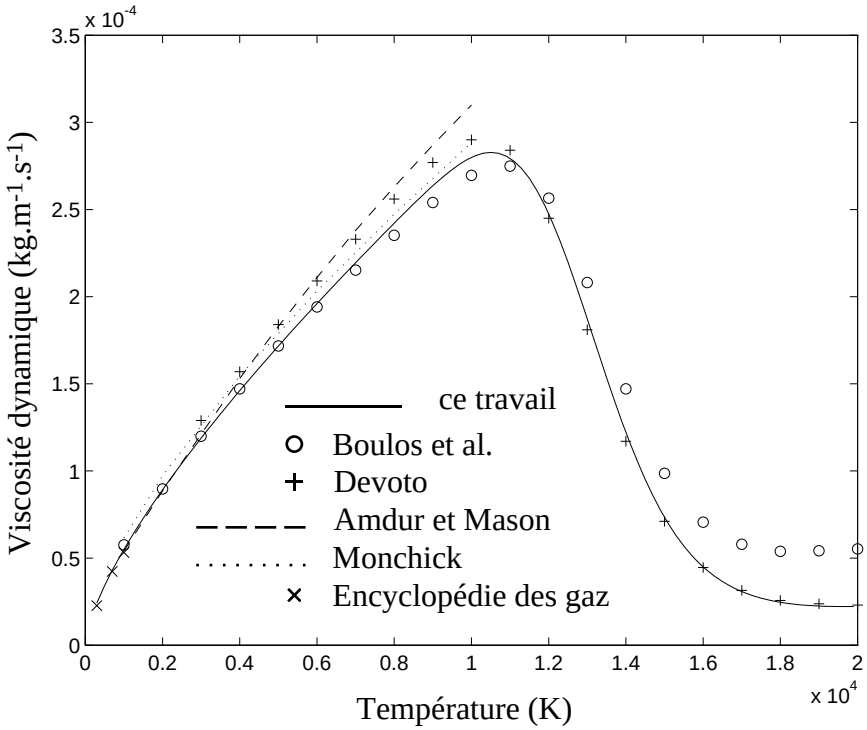


Figure 14 : *Evolution de la viscosité dynamique du plasma d'argon en fonction de la température d'après différents auteurs.*

La Figure 15 présente l'évolution de la conductivité thermique du plasma d'argon en fonction de la température à une pression de 1 bar selon différents auteurs. L'accord avec les données de Boulos & al [39] et de Devoto [18] est bon jusqu'à 15000 K. Au delà, comme pour la viscosité, une différence plus significative existe avec les données de Boulos et al.

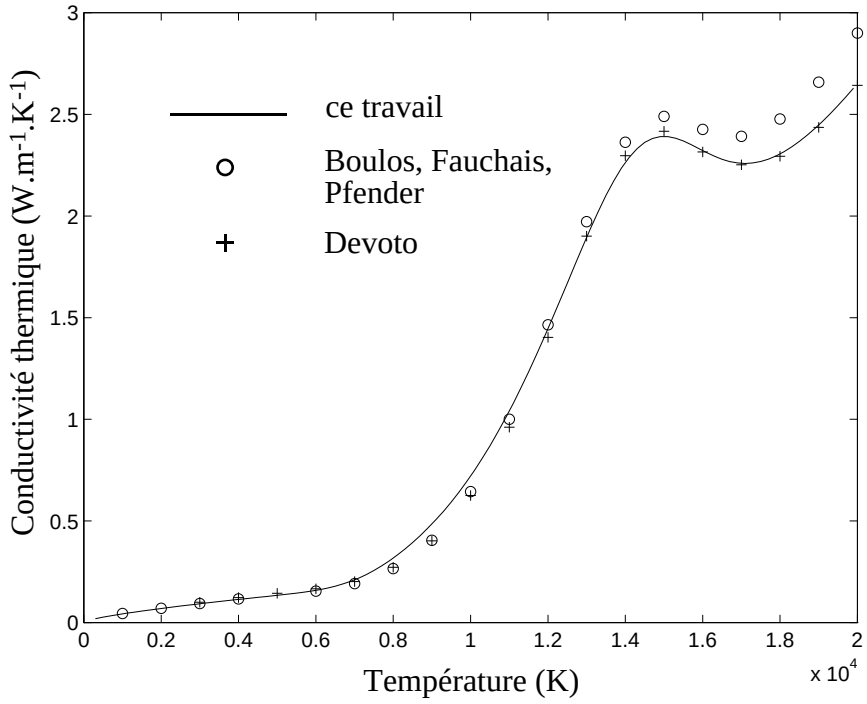


Figure 15 : *Evolution de la conductivité thermique de l'argon en fonction de la température à une pression de 1 bar.*

La Figure 16 présente l'évolution de la viscosité dynamique du plasma d'azote en fonction de la température suivant différents auteurs. Sur toute la gamme de température, nos résultats sont en bon accord avec ceux de Capitelli [24]. Comme pour l'argon, il sont également en accord avec ceux de Boulos & al, hormis à très haute température. On remarque un changement dans la pente de la viscosité à environ 6000 K. Il correspond à la dissociation de l'azote et à des interactions N/N différentes des interactions N_2/N_2.

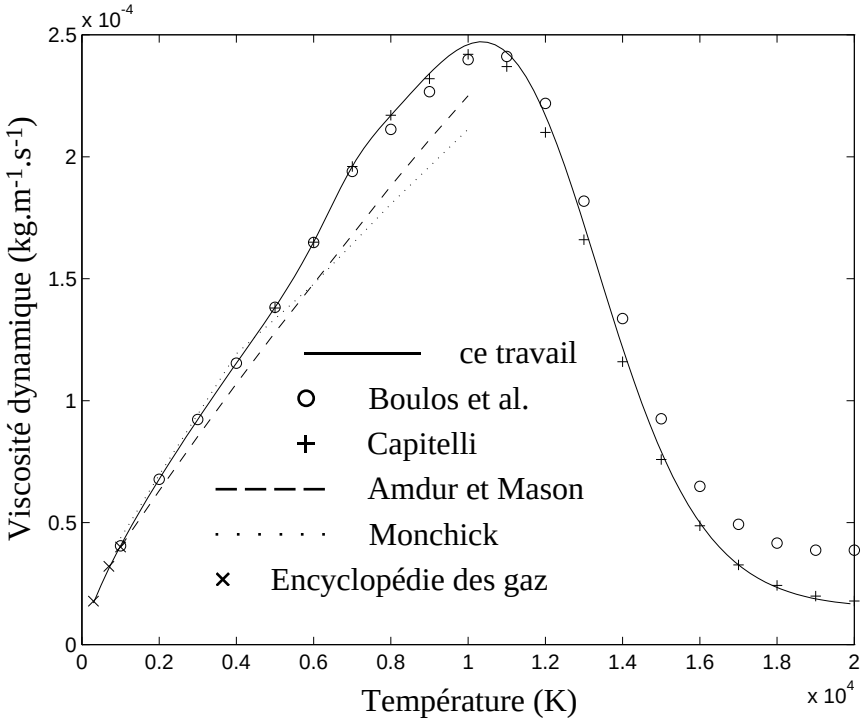


Figure 16 : *Evolution de viscosité dynamique du plasma d'azote en fonction de la température suivant différents auteurs à une pression de 1 bar.*

La Figure 17 présente l'évolution de la conductivité thermique du plasma d'azote en fonction de la température suivant différents auteurs. Quelle que soit la température, la comparaison de nos résultats avec ceux de Capitelli [24] ou Boulos [39] peut être considérée, là encore comme satisfaisante. On note également la présence d'un pic de conductivité thermique au moment de la dissociation de N_2 (augmentation de λ_R).

La Figure 18 présente l'évolution de la viscosité dynamique pour des mélanges argon/hydrogène dont nous avons présenté les propriétés thermodynamiques précédemment. On note que bien que l'hydrogène pur ait une viscosité très inférieure à celle de l'argon, l'influence du taux d'hydrogène sur la viscosité du plasma est quasiment nulle pour des proportions couramment utilisées en projection thermique. Pour des températures inférieures à 8000 K, une bonne approximation de la viscosité dynamique de l'argon est obtenue par

$$\mu_{Ar} = 3.42\ .10^{-5}\left(\frac{T}{500}\right)^{0.7}$$

Dans le cas de l'argon, l'utilisation du potentiel exponentiel répulsif pour l'interaction Ar/Ar conduit à une évolution en $T^{0,7}$ plutôt qu'en $T^{0,5}$ pour le modèle des "sphères rigides".

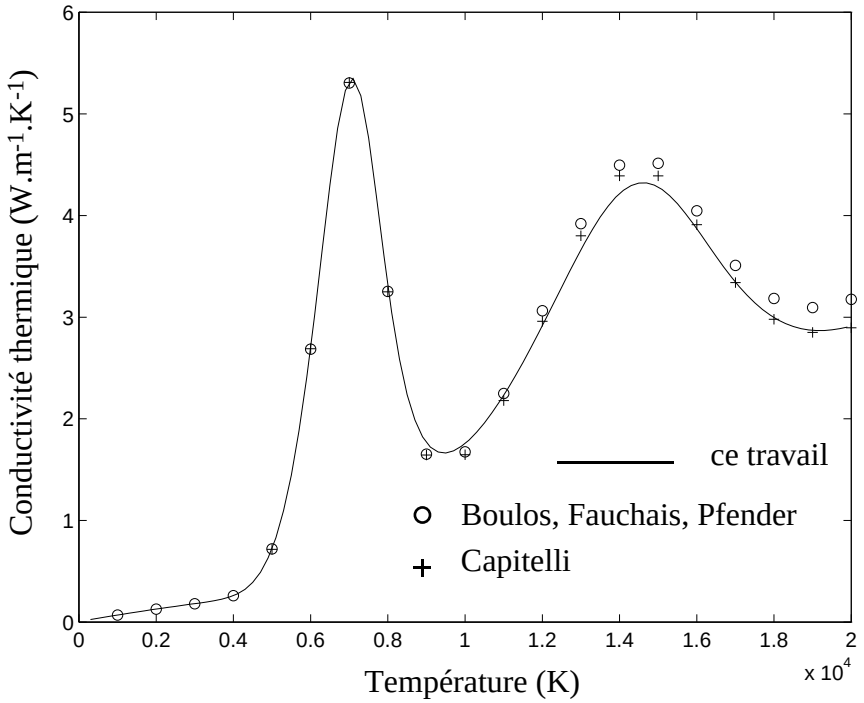


Figure 17 : *Evolution de la conductivité thermique du plasma d'azote en fonction de la température à une pression de 1 bar.*

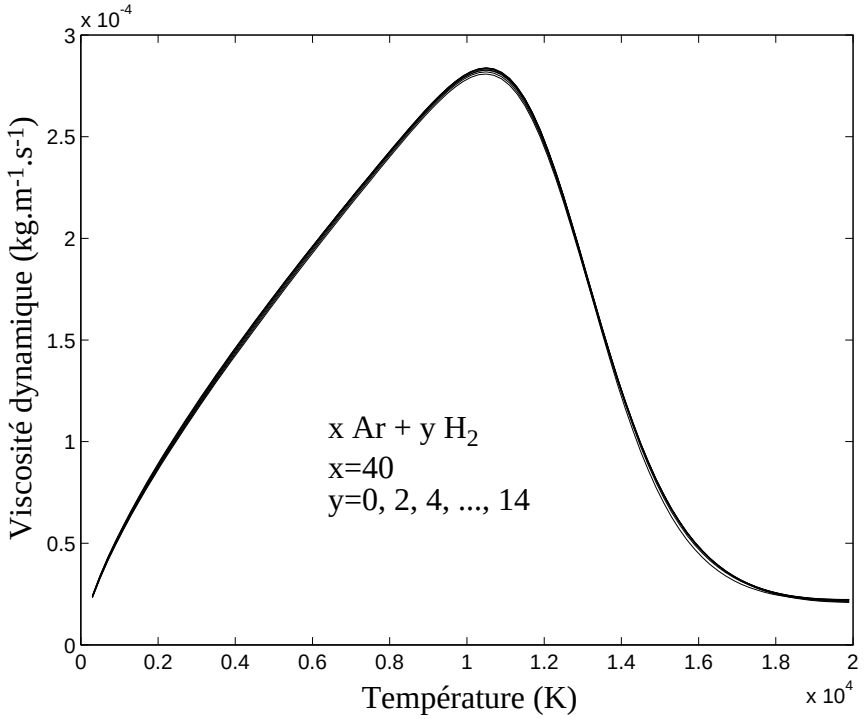


Figure 18 : *Evolution de la viscosité dynamique des mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à une pression 1 bar.*

La Figure 19 présente l'évolution de la conductivité thermique des mélanges argon/hydrogène en fonction de la température. Si nous avons vu que la viscosité était très peu influencée par le taux d'hydrogène présent au sein du mélange, il n'en va pas de même pour la conductivité thermique. En effet, plus la proportion d'hydrogène est importante, plus la conductivité thermique du mélange augmente. Deux raisons sont évoquées : d'une part l'hydrogène est beaucoup plus léger que l'argon

et d'autre part, la dissociation de H_2 provoque un pic de conductivité thermique semblable à celui observé sur la chaleur spécifique. En résumé, l'effet de l'hydrogène dans un jet de plasma est double : d'une part l'enthalpie des mélanges argon/hydrogène augmente avec la proportion d'hydrogène (Figure 5), et d'autre part la conductivité thermique est très significativement influencée. Les jets de plasma obtenus seront donc plus énergétiques et les échanges thermiques avec les particules seront favorisés par la présence d'hydrogène.

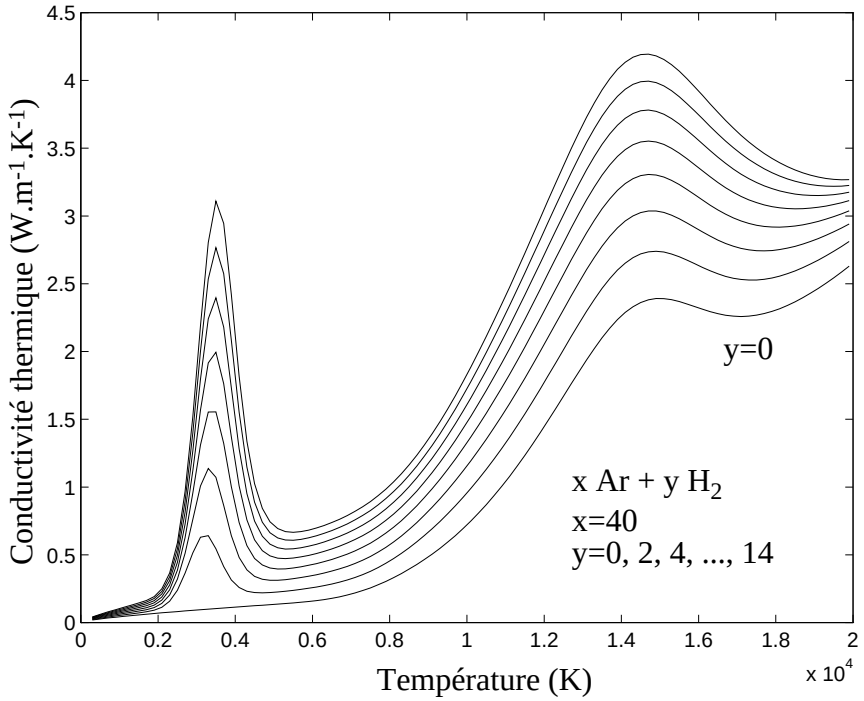


Figure 19 ***:*** *Evolution de la conductivité thermique des mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à une pression de 1 bar.*

La Figure 20 présente les différentes contributions à la conductivité thermique totale du mélange argon/hydrogène 40/14 en fonction de la température. Nous rappelons que la conductivité thermique est calculée en réalisant la somme de quatre contributions dont nous détaillons les importances respectives. On remarque que la contribution des degrés de liberté internes est significative à basse température uniquement. Elle est liée à la présence de l'espèce H_2 sans laquelle elle serait nulle. En dehors de la gamme de température de dissociation de H_2, c'est la contribution des particules lourdes qui est majoritaire à basse température. Dans le cas de l'argon pur, la contribution des lourds resterait majoritaire quelle que soit la température en dessous de 8000K. On remarque également que la contribution des réactions de dissociation et d'ionisation se traduit par deux pics d'amplitudes très élevées. La contribution des électrons, négligeable en dessous de 6000 K, augmente ensuite régulièrement avec la température. Elle est du même ordre que la contribution des lourds à 12000K et devient majoritaire à partir de 17000K.

La Figure 21 présente l'évolution de la conductivité électrique des mélanges argon/hydrogène en fonction de la température. On voit que le milieu n'est pas conducteur en dessous de 6000 K et qu'à haute température, la valeur asymptotique obtenue ne dépend pas du taux d'hydrogène. En fait ceci provient du fait qu'à haute température, ce sont les interactions entre particules chargées qui

déterminent la valeur de la conductivité électrique. Le potentiel utilisé pour les interactions entre particules chargées étant le même quel que soit l'élément atomique considéré, la conductivité électrique à haute température devient de moins en moins dépendante de la nature du mélange. Cette remarque est également valable pour les plasmas d'azote et d'oxygène mais ne l'est plus pour les plasmas d'hélium dans cette gamme de température car l'ionisation de l'hélium intervient à plus haute température que celle des autres éléments.

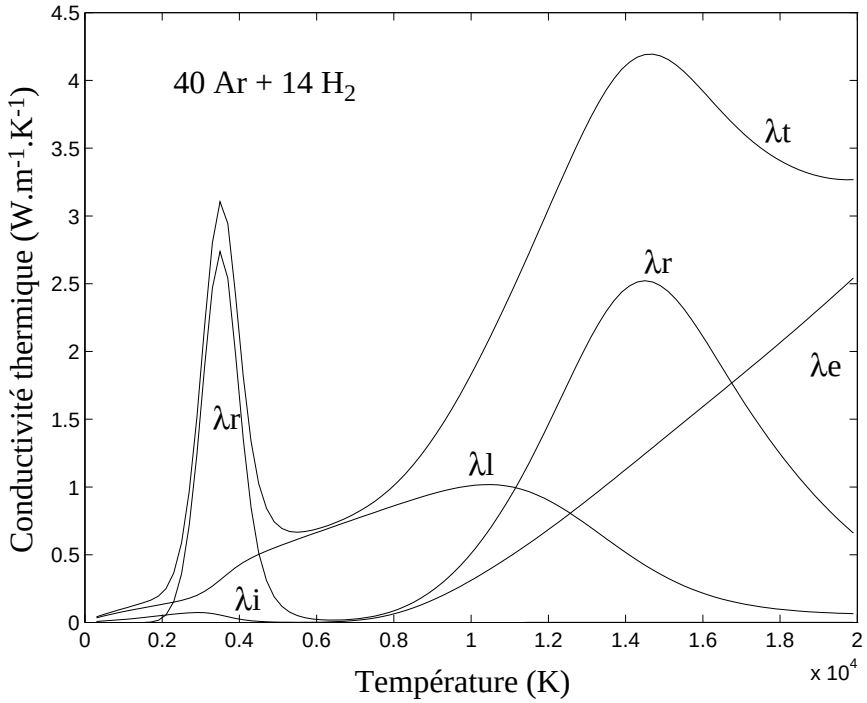


Figure 20 : *Contribution des différents termes sur la conductivité thermique du mélange argon/hydrogène 40/14 en fonction de la température.*

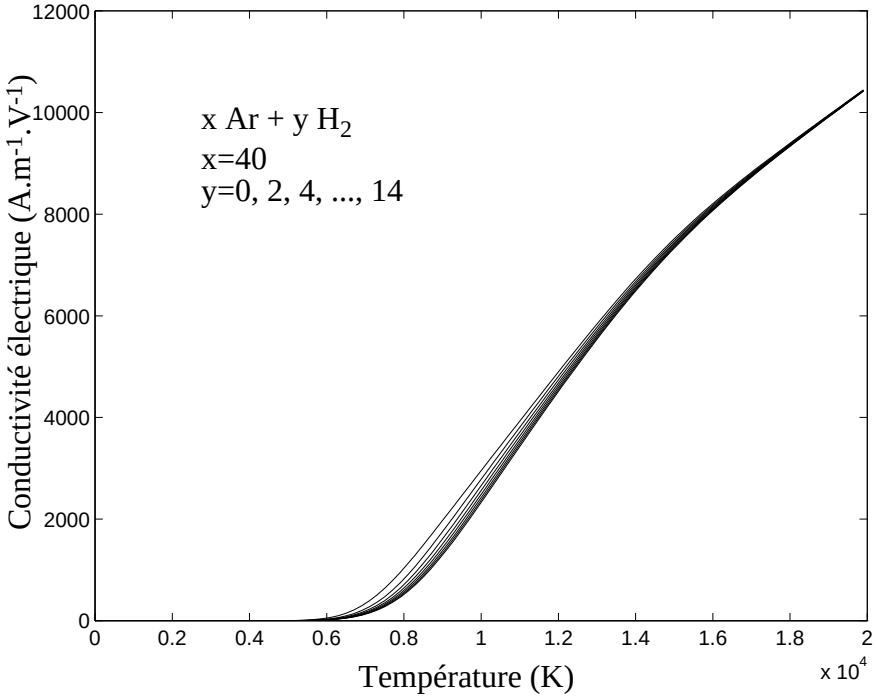


Figure 21 : *Evolution de la conductivité électrique des mélanges argon/hydrogène en fonction de la température à une pression de 1 bar.*

1 W.R. Smith, R.W. Missen, “Chemical Reaction Equilibrium Analysis: Theory and Algorithms”, John Wiley & Sons (1982)

2 L.V. Gurvich, I.V. Veyts, C.B. Alcock, “Thermodynamic Properties of Individual Substances”, Fourth Edition, Vol **1**, Hemisphere Publishing Corporation (1989).

3 J. Aubreton, “Etude des propriétés thermodynamiques et de transport dans des plasmas thermiques à l’équilibre et hors d’équilibre thermodynamiques: Applications aux plasmas de mélange Ar-H2 et Ar-O2”, Thèse de Doctorat Université de Limoges (1985)

4 F.J. Zeleznik, S. Gordon, “Calculation of Complex Chemical Equilibria”, *Industrial and Engineering Chemistry*, **60** (6) 27 (1968).

5 J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, R.B. Bird, “Molecular Theory of Gases and Liquids” (4th edition), John Wiley & Sons (1967)

6 R.C. Reid, J.M. Prausnitz, B.E. Poling, “The Properties of Gases and Liquids” (4th edition), McGraw-Hill (1987)

7 R.B. Bird - W.E. Stewart - E.N. Lightfoot, “Transport Phenomena”, John Wiley & Sons (1970)

8 M.Capitelli, “Transport Properties of Partially Ionized Gases”, *Journal de Physique*, Colloque C3, supplément au n°8, Tome 38 (1977), pC3-227.

9 M. Capitelli, R. Celiberto, C. Gorse, D. Giordano, “Transport Properties of High Temperature air components: A Review”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **16** (1) 267S (1996).

10 C. Bonnefoi, “Contribution à l’étude des méthodes de résolution de l’équation de Boltzmann dans un plasma a deux températures: exemple du mélange Argon-Hydrogène”, Thèse de Doctorat Université de Limoges (1983)

11 J. Aubreton, P. Fauchais, “Influence des potentiels d’intéraction sur les propriétés de transport des plasmas thermiques: exemple d’application le plasma argon-hydrogène à la pression atmosphérique”, *Revue de Physique Appliquée*, **18** 51 (1983).

12 J.O. Hirschfelder, “Heat Transfert in Chemically Reacting Mixtures I”, *The Journal of Chemical Physics*, **26** (2) 274 (1957).

13 J.O. Hirschfelder, “Heat Conductivity in Polyatomic or Electronically Excited Gases. II”, *The Journal of Chemical Physics*, **26** (2) 282 (1957).

14 **.** C.F.Curtiss, J.O. Hirschfelder, “Transport Properties of Multicomponent Gas Mixtures”, *The Journal of Chemical Physics*, **17** (6) 550 (1949).

15 J.N. Butler, R.S. Brokaw, “Thermal Conductivity of Gas Mixtures in Chemical Equilibrium”, *The Journal of Chemical Physics*, **26** (6) 1636 (1957).

16 A. Gleizes, M. Razafinimanana, S. Vacquie, “Transport Coefficients in arc plasma of SF_6-N_2 mixtures”, *J. Appl. Phys.* **54** (7) 3777 (1983).

17 B. Chervy, A. Gleizes, M. Razafinimanana, “Thermodynamic and Transport Coefficients in SF6-Cu mixtures at temperatures of 300-30000K and pressures of 0.1-1 MPa”, *J. Appl. Phys*., **27** 1193 (1994).

18 R.S. Devoto, “Transport Coefficients of Ionized Argon”, *The Physics of Fluids*, **16** (5) 616 (1973).

19 R.A. Svehla, “Estimated viscosities and thermal conductivities of gases at high temperatures”, Technical Report R-132, NASA (1961).

20 L. Monchick, “Collision Integral for Exponential Repulsive Potential”, *The Phycics of Fluids*, **2** (6) 695 (1959).

21 I. Amdur, E.A. Mason, “Properties of Gases at Very High Temperatures”, *The Physics of Fluids*, **1** (5) 370 (1958).

22 R.S. Devoto, “Transport Coefficients of Partially Ionized Argon”, *The Physics of Fluids*, **10** (2) 354 (1967).

23 J.M. Mexmain, “Coefficient de transport dans un plasma à deux températures”, Thèse de Doctorat Université de Limoges (1983).

24 M. Capitelli, R.S. Devoto, “Transport Coefficients of High-Temperature Nitrogen”, *The Physics of Fluids*, **16** (11) 1835 (1973).

25 B. Pateyron, M.F. Elchinger, G. Delluc, P. Fauchais, “Thermodynamic and transport properties of Ar-H2 and Ar-He Plasma Gases Used for Spraying at Atmospheric Pressure. I: Properties of the Mixtures”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **12** (4) 421 (1992).

26 M.F. Elchinger, B. Pateyron, G. Delluc, P. Fauchais, “Calculs des propriétés thermodynamiques et de transport des plasmas Ar-N2 et Ar-NH3 à la pression atmosphérique”, *European Congres on Thermal Plasma Process and Material Behavior at High Temperature*, Colloque de Physique N°5, supplément au n°18, C5-3 (1990).

27 B. Pateyron, G. Delluc, M.F. Elchinger, P. Fauchais, “Thermodynamic and Transport Properties of H-S Gases including Sulphur Didydride: H_2S”, Proceedings of the Fourth International Thermal Plasma Processes Conference, pp 611-617, Athens, Ed. P. Fauchais, Begell House Inc (1997).

28 F.T. Smith, “Atomic Distorsion and the Combining Rule for Repulsive Potentials”, *Physical Revue A*, **5** (4) 1708 (1972).

29 E.A. Mason, R.J. Munn, F.J. Smith, “Transport Coefficients of Ionised Gases”, *The Physics of Fluids*, **10** (8) 1827 (1967).

30 T. Kihara, M.H. Taylor, J.O. Hirschfelder, “Transport Properties for Gases Assuming Inverse Power Intermolecular Potentials”, *The Physics of Fluids*, **3** (5) 715 (1960).

31 “Matlab Reference Guide”, The MathWorks,Inc (1992).

32 Handbook of Chemistry and Physics, 70th Edition, CRC PRESS, (1989-1990).

33 A.B. Murphy, “Transport Coefficients of Air, Argon-Air, Nitrogen-Air and Oxygen-Air Plasmas”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **15** (2) 279 (1995).

34 A.B. Murphy, C.J. Arundell, “Transport Coefficients of Argon, Nitrogen, Oxygen, Argon-Nitrogen and Argon-Oxygen Plasmas”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **14** (4) 451 (1994).

35 C.R. Wilke, “A Viscosity Equation for Gas Mixtures”, *Journal of Chemical Physics*, **18** (4) 517-519 (1950).

36 R.S. Devoto, “Electron Transport Properties in High-Temperature Air”, *The Physics of Fluids*, **19** (1) 22 (1976).

37 Y. Itikawa, “Momentum-Transfer Cross sections for Electron Collisions with Atoms and Molecules*”, Atomic data and nuclear data tables*, **14** (1) 1 (1974).

38 Y. Itikawa, “Momentum-Transfer Cross Sections for Electron Collisions with Atoms and Molecules” (Revision and Supplement), *Atomic data and nuclear data tables*, **21** (1) 69 (1978).

39 M.A. Boulos, P. Fauchais, E. Pfender, “Thermal Plasmas - Fundamentals and Applications” Volume 1, Plenum Press, New York (1994).

Chapitre 2

Jets libres de plasma

2. Jets libres de plasma

Les études numériques de jets de plasma générés par des torches à courant continu sont relativement répandues dans la littérature. Scott & al [1], Murphy & al [2] ou Delalondre & al [3, 4] ont mis l'accent sur l'étude de l'arc électrique et du couplage magnéto-hydrodynamique en résolvant une équation traduisant la conservation du courant électrique. Un terme source est ajouté à l'équation d'énergie (effet Joule) et les forces de Lorentz sont prises en compte dans les équations de quantité de mouvement. Eichert [5, 6] ont proposé de représenter l'effet de l'arc par un apport calorifique global. Plus souvent, les modèles proposés ne concernent que l'étude des jets externes. La majorité des études sont réalisées en supposant que les modèles de turbulence traditionnels restent valides dans le cas des jets de plasma. D'autre part, l'influence de la nature du gaz ambiant est soit négligée, soit prise en compte en considérant le cas d'un milieu à deux composants. Cependant, Ramshaw & Chang ou Fincke & al qui ont observé des phénomènes de “démélange” dus à des coefficients de diffusion différents pour chaque espèce, ont considéré le tout comme un milieu multi-composant [7, 8, 9]. Enfin Pfender & al. [10] ont pu observé que l'entraînement du gaz ambiant dans le jet se fait principalement par entraînement du bulles de gaz froid et ont proposé d'utiliser le modèle de turbulence à deux fluides [11, 12]. Au regard de ces analyses, nous avons choisi dans un premier temps de tester un modèle relativement simple et de vérifier sa validité en comparant les résultats numériques obtenus à des mesures expérimentales publiées dans la littérature. Le modèle que nous avons choisi d'implanter dans PHOENICS est très semblable à celui proposé par Diliwari et al. [13, 14, 15, 16, 17]. Dans ce modèle, le couplage avec les équations de la magnéto-hydrodynamique n'est pas réalisé et seul le jet externe est considéré si bien que l'on définit les conditions en sortie de torche de manière à satisfaire le débit des gaz plasma et l'apport énergétique réel (calculé en fonction de la puissance électrique dissipée et de la puissance évacuée par le circuit de refroidissement). Si Diliwari et al. ont utilisé un modèle elliptique (voir annexe modèles numériques), Lee & Pfender [18], Pateyron [19] ou Chambon [20] qui utilisent le modèle de Vardelle, ont utilisé un modèle très semblable en supposant que le jet externe pouvait être décrit en première approximation par un modèle parabolique. Sachant que l'utilisation d'un modèle parabolique mène à un gain de temps de calcul non négligeable, nous avons donc vérifié la validité de cette hypothèse avant de l'utiliser plus largement. La prise en compte de la nature du gaz ambiant se fait en considérant un système à deux composants, par le biais d'une équation de conservation d’espèce qui permet de prendre en compte le mélange entre le jet de plasma et le gaz environnant [13-20]. Les propriétés du gaz plasma et du gaz environnant sont calculées séparément en supposant

l'équilibre thermodynamique et chimique pour chacun d'entre eux, puis les réactions chimiques entre les deux mélanges sont négligées.

2.1. Mise en équation

En négligeant l'effet de gravité et en supposant l'écoulement stationnaire axisymétrique (hypothèses utilisées dans les références précitées), un modèle 2D est donc suffisant. Diliwari & al. [13-16] ont présenté le système d'équations de type elliptique régissant l'écoulement. Comme nous le montrerons par la suite, l'hypothèse conduisant à un système parabolique est acceptable dans le cas de l'étude de jets libres. C'est la raison pour laquelle, seules les équations de type parabolique sont présentées ici. Ces équations sont identiques à celles utilisées par Pateyron [19], ou Chambon [20] qui utilisent le modèle de Vardelle. Elles ont été également rappelées lors de notre étude d'un jet de plasma d'argon se déchargeant dans un environnement d'air [21]. L'effet de la turbulence est pris en compte suivant un modèle à deux équations. Pour rendre le système d'équations parabolique, les termes de diffusion axiaux sont négligés dans chaque équation de conservation ainsi que le gradient axial de pression (voir annexe modèles numériques). Si (z) et (r) sont les coordonnées axiales et radiales, il convient d'écrire:

- Equation de continuité

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho w)=0$$

- Equation de quantité de mouvement radiale

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\rho v^2\right)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho wv)-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu_{eff}\frac{\partial v}{\partial r}\right)=-\frac{\partial p}{\partial r}$$

- Equation de quantité de mouvement axiale

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho vw)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\rho w^2\right)-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu_{eff}\frac{\partial w}{\partial r}\right)=0$$

- Equation de conservation du gaz plasma

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho vy_1)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho wy_1)-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\Gamma_y\frac{\partial y_1}{\partial r}\right)=0$$

- Equation de conservation de l'enthalpie

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho vh)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho wh)-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\Gamma_h\frac{\partial h}{\partial r}\right)=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(\Gamma_y-\Gamma_h\right)\left(h_1-h_2\right)\frac{\partial y_1}{\partial r}\right]$$

- Energie cinétique de turbulence

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho vk)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho wk)-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\Gamma_k\frac{\partial k}{\partial r}\right)=\rho(P-\varepsilon)$$

- Taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v\varepsilon)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho w\varepsilon)-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\Gamma_\varepsilon\frac{\partial \varepsilon}{\partial r}\right)=\rho\frac{\varepsilon}{k}\left(C_1P-C_2\varepsilon+C_3\frac{P^2}{\varepsilon}\right)$$

Le terme $-\partial p/\partial r$ est maintenu dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement suivant (r). Bien que ce terme soit négligé dans les autres études, il est nécessaire de le maintenir avec PHOENICS car sans lui l'équation de correction de pression qui permet de vérifier l'équation de continuité ne serait plus résolue.

Les coefficients d'échange de chaque grandeur s'expriment en fonction de la viscosité et des autres coefficients de transport suivant

$$\mu_{eff}=\mu+\mu_t$$

$$\Gamma_y=\rho D_{eff}=\rho D+\mu_t/\mathrm{Sc}_t$$

$$\Gamma_h=k_{eff}/Cp=k/Cp+\mu_t/\mathrm{Pr}_t$$

$$\Gamma_k=\mu+\mu_t/\sigma_k$$

$$\Gamma_\varepsilon=\mu+\mu_t/\sigma_\varepsilon$$

avec

$$\mu_t=\rho C_\mu k^2/\varepsilon$$

L'équation de conservation de l'enthalpie a été dérivée en combinant les termes de conduction thermique et d'interdiffusion entre le mélange plasma et le mélange environnant. De manière vectorielle, ces termes s'écrivent

$$\vec{\mathrm{q}}=-k_{eff}\vec{\nabla}T-\rho D_{eff}\left(h_1\vec{\nabla}y_1+h_2\vec{\nabla}y_2\right)$$

Avec

$$h=y_1h_1+y_2h_2$$

il vient

$$\vec{\nabla}h=Cp\vec{\nabla}T+h_1\vec{\nabla}y_1+h_2\vec{\nabla}y_2$$

où

$$Cp=y_1Cp_1+y_2Cp_2$$

En utilisant de plus $\vec{\nabla}y_2=-\vec{\nabla}y_1$, on arrive finalement pour la composante radiale de $\vec{\mathrm{q}}$ à

$$q_r=-\Gamma_h\frac{\partial h}{\partial r}-\left(\Gamma_y-\Gamma_h\right)(h_1-h_2)\frac{\partial y_1}{\partial r}$$

Comme on utilise généralement $Sc_t=Pr_t$ dans les modèles de turbulence et en supposant en première approximation $\rho D\approx k/Cp$, il vient

$$\Gamma_y-\Gamma_h\approx 0$$

Le membre de droite de l'équation de conservation de l'enthalpie (terme source) peut donc être négligé en première approximation.

Cette hypothèse de calcul du coefficient de diffusion correspond à l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire (le nombre de Lewis étant le rapport entre les nombres de Prandtl et Schmidt). Néanmoins, le nombre de Lewis est généralement défini en utilisant la conductivité thermique figée et la chaleur spécifique figée [22]. Cependant, avec la relation $k/Cp \approx k_f/Cp_f$ [22], on retrouve la définition courante du nombre de Lewis.

Le terme de production d'énergie cinétique de turbulence s'exprime ici simplement par

$$P = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}\left(\frac{\partial w}{\partial r}\right)^2$$

Le Tableau 1 indique les valeurs des constantes utilisées pour le modèle *k-ε* standard et le modèle *k-ε* modifié de Chen & Kim [23, 24] connu pour être bien plus adéquat pour les calculs de jets ronds.

	C_μ	C_1	C_2	C_3	σ_k	σ_ε
Modèle standard	0.09	1.44	1.92	0	1.0	1.3
Modèle de Chen & Kim	0.09	1.15	1.90	0.25	0.75	1.15

Tableau 1 *: Constantes suivant les modèles k-ε standard et k-ε de Chen & Kim*

Comme on peut le voir, suivant le modèle de Chen & Kim, le terme de dissipation de ε est très semblable à celui utilisé dans le modèle standard (les valeurs de C_2 sont peu différentes pour les deux modèles). En revanche, le terme de production de ε est décomposé en deux contributions. La première est identique à celle utilisée dans le modèle standard à ceci près qu'un coefficient C_1 inférieur est utilisé. D'après les auteurs [23], la seconde contribution (proportionnelle à C_3) représente le taux de transfert d'énergie de grande échelle de turbulence à petite échelle contrôlé par l'échelle de temps du taux de production ainsi que celle du taux de dissipation. Son effet est d'augmenter ε lorsque celui-ci est très inférieur à son taux de production ($P >> \varepsilon$) et de le diminuer lorsqu'il est supérieur ($P << \varepsilon$). Dans une configuration d'équilibre ($P \approx \varepsilon$), le terme de production de ε est alors proportionnel à $C_1 + C_3$, valeur peu différente de celle du modèle standard (*1.40* au lieu de *1.44*). Les modifications apportées à l'équation de ε sont particulièrement intéressantes dans le cas des écoulements avec zone de recirculation ou dans le cas des écoulements avec séparation puis réattachement, ainsi que pour tous les autres écoulements où l'hypothèse d'équilibre $P \approx \varepsilon$ n'est pas respectée pour la turbulence. Le modèle de Chen & Kim présente également l'avantage d'être bien mieux adapté au calcul de jets ronds, ce qui permet de s'affranchir des modifications suggérées par Launder [25] au vu des travaux de Rodi.

Les nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents doivent également être choisis. Dans le cas des jets ronds, Schiestel [26] propose $Pr_t = Sc_t = 0.7$ mais de nombreuses études des jets de plasma étant

réalisées avec le modèle standard, les valeurs utilisées dans ce cas sont plutôt $Pr_t = Sc_t = 0.9$ de manière (nous semble-t-il) à limiter la tendance du modèle à surestimer l'expansion du jet si les modifications de Launder ne sont pas considérées.

2.2. Conditions aux limites

Dans notre cas, nous avons estimé les conditions en sortie de torche en fonction du débit massique de gaz plasma, de la puissance électrique dissipée, et du rendement thermique mesuré de la torche [21, 27, 28]. Avec ces données, si un profil plat est utilisé en sortie de torche, sous l'hypothèse que la pression en sortie de tuyère soit égale à la pression ambiante, la vitesse du gaz et son enthalpie en sortie de torche peuvent être déterminées par résolution numérique d'un système à deux équations et deux inconnues.

Le débit massique s'exprime par

$$Qm = \rho_s A_s w_s$$

et la puissance effective de la torche par

$$P_{eff} = UI\eta = Qm\left(h_s + w_s^2/2 - h_e\right)$$

A pression fixée, ρ_s est une fonction de h_s et on obtient un système à deux équations et deux inconnues w_s et h_s.

L'utilisation de profils plats étant peu représentative de la réalité, nous déterminons plus généralement les conditions en sortie de torche en imposant une forme des profils radiaux d'enthalpie et de vitesse [27, 28, 29]. Il vient alors

$$Qm = 2\pi \int_0^R \rho(r)\, w(r)\, r\, dr$$

et

$$P_{eff} = 2\pi \int_0^R \rho(r)\, w(r)\, \left(h(r) + w(r)^2/2 - h_e\right) r\, dr$$

Les conditions à la paroi sont

$$w(R) = 0 \qquad et \qquad h(R) = h_p$$

La forme des profils étant imposée, on aboutit de nouveau à un système de deux équations à deux inconnues à résoudre numériquement. De par la similitude entre les équations de transport de l'enthalpie et de la quantité de mouvement axiale, nous supposons généralement une forme similaire pour les profils de vitesse et d'enthalpie.

$$w(r)/w_{cl} = \left(h(r) - h_p\right)/\left(h_{cl} - h_p\right) = \left(1 - (r/R)^n\right)$$

Équation 1 *: Expression de la forme des profils de vitesse et d'enthalpie.*

Les deux inconnues sont alors w_{cl} et h_{cl}, les valeurs de la vitesse et de l'enthalpie à l'axe.

Les valeurs de (*n*) que nous avons utilisées [21, 28] sont de 2 et 3 respectivement dans l'Équation 1. Ces valeurs sont à rapprocher des valeurs situées entre 2 et 4 utilisées par Diliwari [13-17] et de la valeur 2 souvent utilisée à l'Université de Limoges [20, 30, 31, 32] pour la vitesse. Certains auteurs suggèrent néanmoins des profils plus plats comme Zhuang & al [33] qui ont utilisé n=4,4 pour la vitesse et la température. Notons encore que l'utilisation d'exposants identiques pour les profils de vitesse et d'enthalpie conduit à l'obtention de profils de température beaucoup plus plats que pour les deux autres grandeurs. Ceci est dû au fait que, dans la gamme de température que nous obtenons en sortie de torche, le milieu gazeux est partiellement ionisé si bien la valeur de la chaleur spécifique croît avec la température (voir chapitre 1). Par conséquent, au voisinage de l'axe où la température est maximale, à une variation d'enthalpie donnée correspond une variation de température faible. Ce résultat reste en accord avec les coefficients souvent utilisés à l'Université de Limoges par Dussoubs et al [30-32] qui conservent *n=2* pour la vitesse mais qui préfèrent prendre *m=4.5* pour la température ou encore avec ceux utilisés par Nylen et al [34].

La spécification des profils de vitesse et d'enthalpie en sortie de torche est nécessaire mais pas suffisante. En effet, l'énergie cinétique de turbulence ainsi que son taux de dissipation doivent aussi être fixés. Dans le cas de profils plats en sortie, ceci est généralement réalisé avec

$$k_s = it \;\; w_s^2$$

et

$$\varepsilon_s = C_\mu^{3/4} \;\; k_s^{3/2} / lm$$

où *it* l'intensité de turbulence varie entre 0.001 et 0.005 [2, 24, 35, 36].

Avec $C_\mu^{3/4} = 0.1643$ et $lm = 0.07R$ (la constante de 0.07 étant généralement utilisée pour les jets ronds), il vient

$$\varepsilon_s = 4.7 \;\; k_s^{3/2} / D$$

où *D* est le diamètre de sortie.

Dans le cas de profils de vitesse quelconques en sortie, Amano [35] a par exemple utilisé des profils d'énergie cinétique de turbulence et de son taux de dissipation de la forme

$$k(r) = C_\mu^{-1/2} lm^2 \left(\frac{\partial w}{\partial r} \right)^2$$

et

$$\varepsilon(r) = C_\mu^{3/4} \;\; k(r)^{3/2} / lm$$

Cette façon de faire requiert la connaissance du profil de la longueur de mélange (lm) que l'on ne connaît généralement que pour des écoulements turbulents établis. Par conséquent elle ne semble applicable que lorsque l'écoulement en sortie est complètement turbulent.

Dans notre cas, nous avons préféré utiliser des profils d'énergie cinétique de turbulence tels que ceux proposés par Fincke [8] ou Chang [7, 9]

$$k(r) = it \;\; w_{cl}^2 \left(\frac{\partial w}{\partial r}\right) / \left(\frac{\partial w}{\partial r}\right)_R$$

et

$$\varepsilon(r) = C_\mu^{3/4} \;\; k(r)^{3/2} / \min\left(\kappa(R-r),\;\; 0.07R\right)$$

Nous avons choisi d'utiliser $it = 0.003$ dans nos calculs ce qui correspond à une valeur moyenne. $\kappa = 0.41$ est la constante de Von-Karman.

Il est à noter que la formulation utilisée par Amano [35] aussi bien que celle que nous avons choisie conduisent à une énergie cinétique de turbulence nulle à l'axe du jet où $\partial w / \partial r = 0$ et maximale au voisinage de la paroi où $k(R) = it \;\; w_{cl}^2$ suivant notre formulation. En conclusion, l'utilisation de profils d'énergie cinétique de turbulence et de son taux de dissipation tels que ceux prescrits par Amano ou par Fincke, n'aboutit finalement pas à des différences très significatives sur les champs de vitesse et de température calculés. Dans la mesure où l'énergie cinétique de turbulence est supposée nulle à l'axe, la viscosité turbulente y est nulle aussi, si bien que l'écoulement y est “laminaire”. Toutefois, à la paroi où $k(R) = it \;\; w_{cl}^2$, la viscosité turbulente est supérieure à la viscosité laminaire. En toute logique, le modèle de turbulence utilisé au voisinage de l'axe devrait donc être un modèle à bas Reynolds. Néanmoins, nous avons vérifié que ce n'était pas nécessaire. Ceci sera mis en évidence au prochain chapitre où nous verrons que l'utilisation du modèle à bas Reynolds de Lam-Bremhorst ne modifie en rien les prédictions obtenues au voisinage de la sortie de la torche.

2.3. Etude des paramètres sensibles

Dans ce paragraphe, nous nous proposons d'effectuer une étude de la sensibilité des résultats numériques vis à vis des points suivants

- Nature du gaz environnant
- Modèle de turbulence
- Forme des profils en sortie de torche
- Intensité de turbulence en sortie de torche
- Intensité de courant électrique
- Débits des gaz plasmagènes
- Diamètre interne de l'anode

Certains éléments de réponse ont été fournis dans [21] où nous avons, dans le cas d'un jet de plasma d'argon sous air, validé l'hypothèse du calcul parabolique, vérifié les influences de la forme des profils de vitesse et d'enthalpie (profils plus où moins plats), du modèle de turbulence utilisé ainsi que de la nature du gaz environnant. Après analyse, les paramètres cruciaux sont la nature du gaz environnant et le modèle de turbulence utilisé, la forme des profils (avec des valeurs de n allant de 2 à 4) n'intervenant qu'à un degré moindre. Nous allons prendre l'exemple d'une torche F4 de diamètre interne 7 mm pour laquelle Chambon [20] a fourni les courbes caractéristiques pour différents modes opératoires. Le cas d'un jet de plasma argon/hydrogène (45/15) obtenu sous une intensité de 600 A servira de référence. Pour ces conditions, la puissance utile de la torche (déduction faite des pertes par refroidissement) est de 27 kW.

- Propriétés des gaz et lois de mélange :

La Figure 1 présente l'évolution de l'enthalpie de l'argon, de l'air et du mélange argon/hydrogène (75/25) en fonction de la température à une pression de 1 bar. A une même température, l'enthalpie du plasma d'argon est bien inférieure à celle du mélange argon/hydrogène elle-même inférieure à celle de l'air surtout au delà de 6000K.

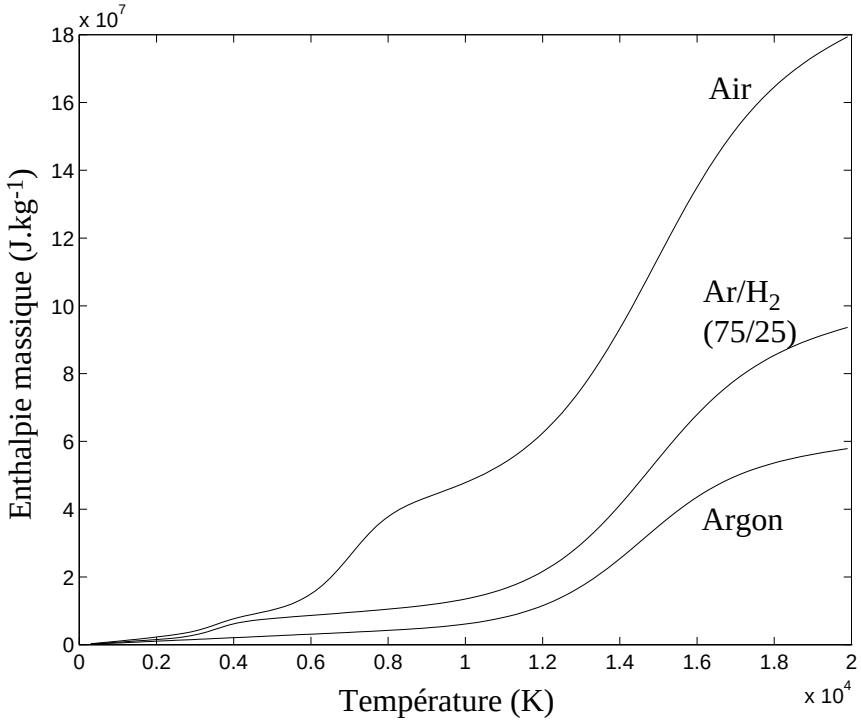


Figure 1 *: Evolution de l'enthalpie de l'argon, de l'air et du mélange argon/hydrogène (3/1) en fonction de la température à la pression de 1 bar.*

La Figure 2 présente l'évolution de la viscosité des trois mélanges précédents. Comme nous l'avons vu au chapitre 1, la viscosité du mélange argon/hydrogène est très similaire à celle de l'argon alors que la viscosité du plasma d'air est quel que peu inférieure en deçà de 12 kK.

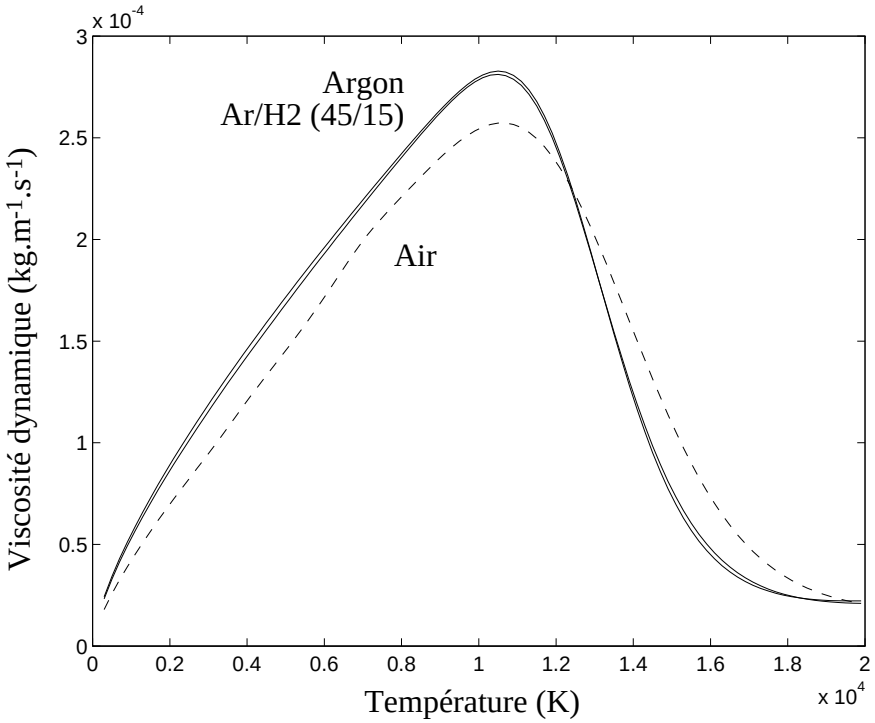


Figure 2 *: Evolution de la viscosité dynamique de l'argon, du mélange argon/hydrogène 45/15 et de l'air en fonction de la température à la pression de 1 bar.*

La Figure 3 présente l'évolution de la conductivité thermique des gaz précédents en fonction de la température. Contrairement à la viscosité, la conductivité thermique des différents mélanges est très différente.

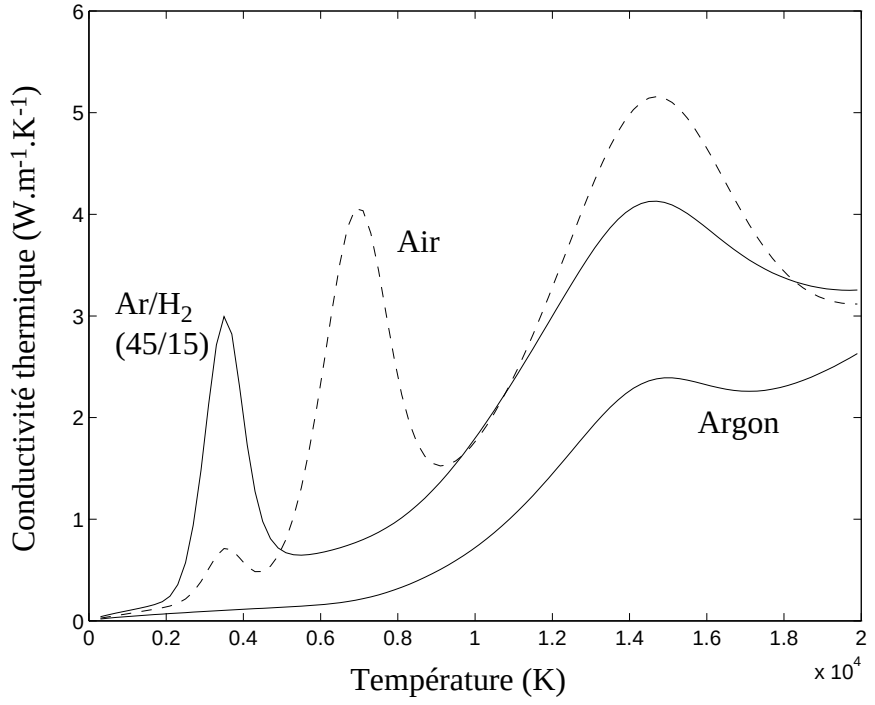


Figure 3 *: Conductivité thermique de l'argon, du mélange argon/hydrogène 45/15 et de l'air en fonction de la température à la pression de 1 bar.*

Les coefficients de transport du mélange plasmagène et du gaz environnant étant calculés séparément, l'utilisation de lois de mélange est rendue nécessaire. Nous avons utilisé des lois simples de type

$$\mu_{mél} = X_1\mu_1 + X_2\mu_2$$

et

$$\lambda_{mél} = X_1\lambda_1 + X_2\lambda_2$$

où X désigne la fraction molaire froide de chacun des deux mélanges (fraction molaire calculée à basse température). La viscosité dynamique des différents mélanges étant très proche, l'utilisation d'une telle loi est suffisante pour celle-ci. Concernant la conductivité thermique, l'approximation est assurément plus discutable. Toutefois, nous avons vérifié que les résultats n'étaient quasiment pas influencés dans la mesure où les coefficients d'échange turbulents deviennent rapidement largement supérieurs aux coefficients d'échange laminaires. En fait, pour les jets libres de plasma, la zone du cœur potentiel est la seule qui peut être considérée comme laminaire. Or dans cette zone, il n'y a pas de mélange si bien que la conductivité y est calculée correctement si la loi précédente est considérée.

- Influence du schéma numérique :

En supposant un profil avec (n=3) dans l'Équation 1, on détermine finalement une vitesse à l'axe de 2250 m/s et une température à l'axe de 13100K. Afin de vérifier dans un premier temps la validité de l'hypothèse " système parabolique", nous présentons sur la Figure 4 les profils axiaux de température calculés pour un environnement d'air par utilisation de trois schémas différents. En plus des résultats obtenus avec ce modèle, les résultats obtenus par utilisation du schéma "hybride" et du schéma "SMART" sont aussi présentés (voir annexe). Pour ces deux schémas, la résolution d'un système d'équations elliptique équivalent à celui proposé par Diliwari [13-17] est effectuée. Le modèle de Chen & Kim est utilisé et les nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents sont pris égaux à 0,7. Comme on peut s'en rendre compte, la différence entre les résultats obtenus par utilisation des différents schémas n'est pas significative si bien que nous utiliserons le modèle parabolique pour la suite de notre étude des jets libres de plasma.

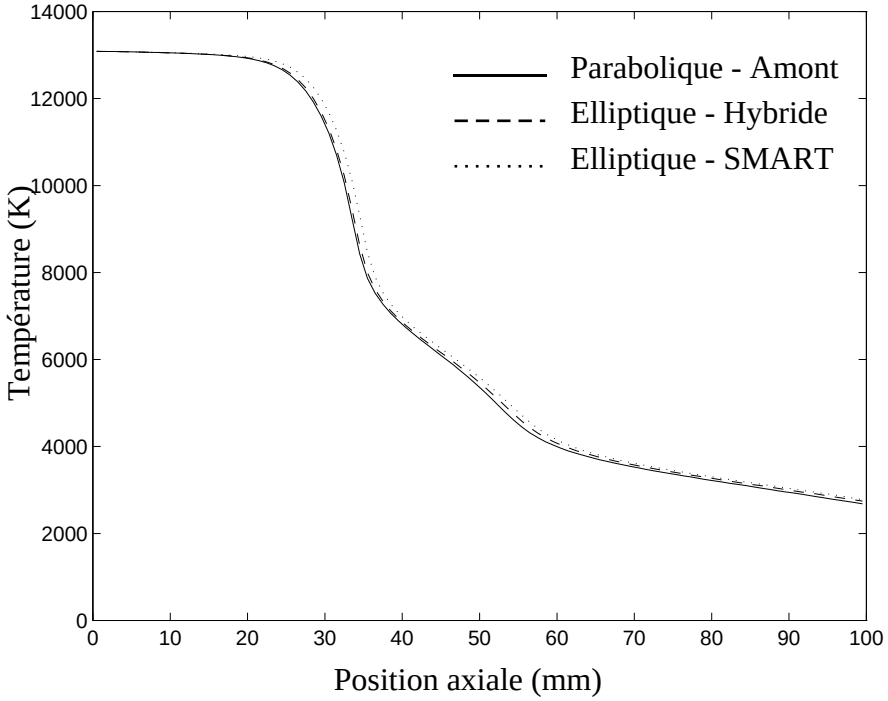


Figure 4 *: Profils axiaux de température pour un jet argon/hydrogène (45/15) se déchargeant sous air (modèle k-ε de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7)*

- Influence de la nature du gaz environnant :

La Figure 5 présente les profils axiaux de température du jet pour trois environnements différents (argon pur, argon/hydrogène 75/25 et air) en utilisant toujours le modèle de Chen & Kim avec Prt=Sct=0,7. On remarque que la différence entre les différents profils est importante. Dans le cas de l'environnement d'argon, la température calculée est encore de l'ordre de 6000K à 100 mm de la sortie de la torche alors qu'elle est inférieure à 3000K dans le cas de l'environnement d'air. La corrélation avec l'évolution de l'enthalpie des différents gaz est évidente. On voit qu'à enthalpie donnée, la température du plasma d'argon est supérieure à celle du mélange Ar//H2, elle-même supérieure à celle de l'air. Ainsi, la nature du gaz environnant joue un rôle déterminant sur le refroidissement du jet de plasma. Si ce milieu contient des molécules diatomiques, une partie de l'énergie du jet sera alors utilisée pour dissocier ces molécules. Au contraire, dans le cas d'une ambiance d'argon pur, les réactions de recombinaisons permettent de maintenir un niveau de température plus élevé.

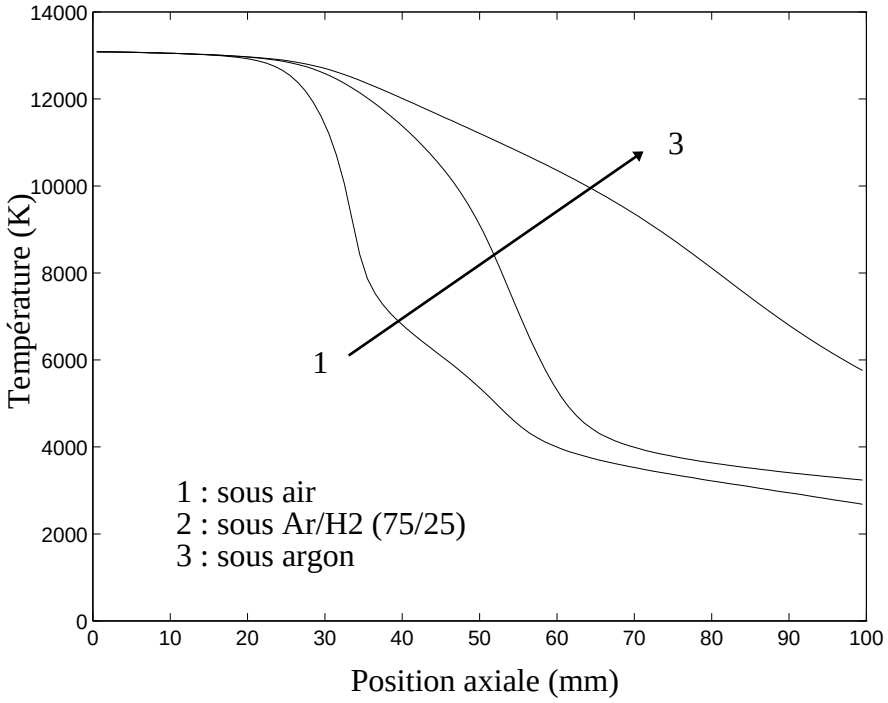


Figure 5 *: Influence de la nature du gaz environnant sur le refroidissement d'un jet de plasma Ar/H2 (75/25) sous 600A*

La Figure 6 présente les profils axiaux de vitesse calculés dans les mêmes conditions pour les trois gaz environnants. On peut observer que bien que la différence soit moins nette que pour la température, la nature du gaz ambiant joue tout de même un rôle non négligeable sur le ralentissement du jet.

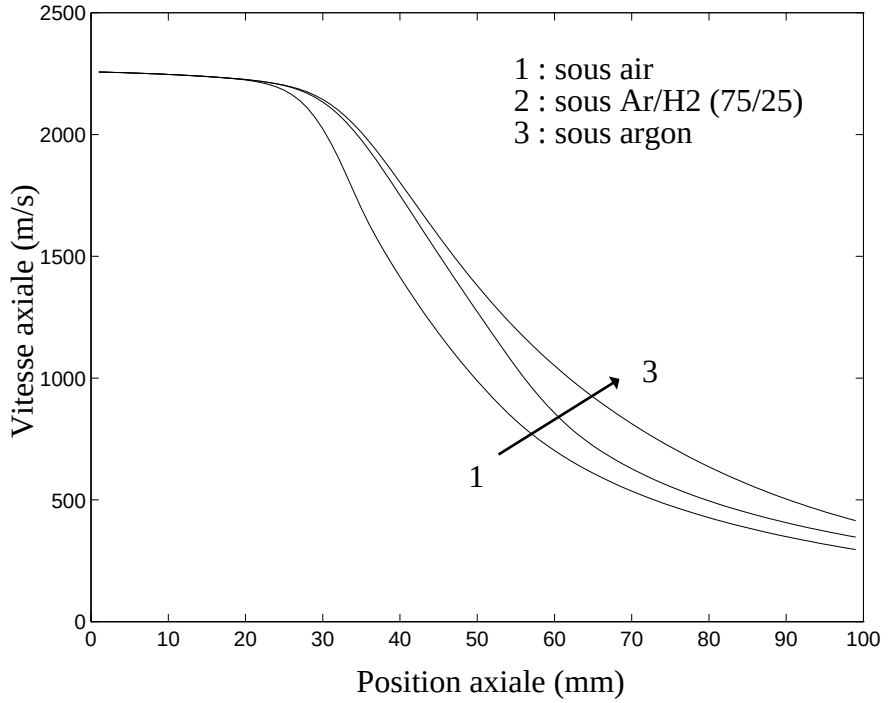


Figure 6 *: Profils axiaux de vitesse pour un jet argon/hydrogène (45/15) se déchargeant sous trois environnements différents.*

- Influence du modèle de turbulence :

La Figure 7 présente l'influence du modèle de turbulence et des nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents sur le profil axial de température du jet dans le cas d'un environnement d'air. On observe que l'utilisation du modèle *k-ε* standard provoque une diminution plus rapide de la température suivant l'axe, ceci étant attribué à une expansion radiale plus importante pour ce modèle. La différence relative entre les résultats obtenus avec les deux modèles de turbulence est conservée quand la distance axiale augmente et ce quels que soient les nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents. Concernant l'influence de ces deux grandeurs, on note que plus leur valeur est faible, plus le refroidissement est rapide. Ceci est à rapprocher du fait que le passage de 0.7 à 0.9 provoque une diminution dans les mêmes proportions des termes de diffusion dans les équations de conservation de la fraction massique de gaz plasma et d'enthalpie. Par ailleurs, les variations observées sur la vitesse calculée selon le modèle de turbulence utilisé sont similaires à celles observées sur le champ de température. Toutefois, l'influence des valeurs des nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents est moindre, ce qui s'explique par le fait que ces nombres n'interviennent pas directement dans les équations de conservation de la quantité de mouvement.

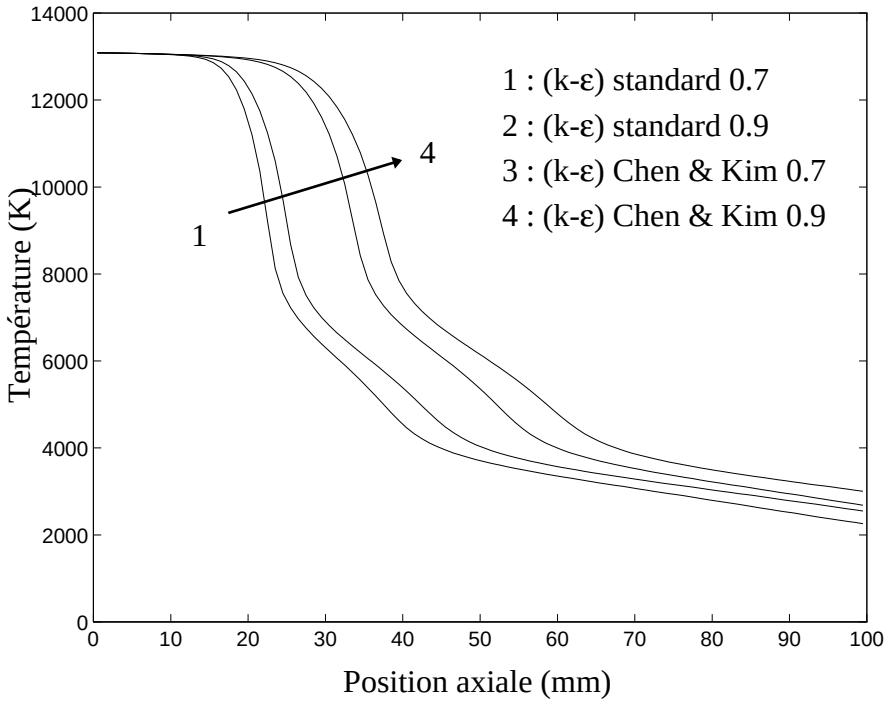


Figure 7 *: Influence du modèle de turbulence et des nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents sur les profils axiaux de température calculé.*

- Influence de la forme des profils en sortie de torche :

La Figure 8 présente l'influence de la forme du profil de vitesse et d'enthalpie en sortie de torche. Les résultats correspondent d'une part à l'utilisation d'un profil purement parabolique (n=2 dans l'Équation 1) et d'autre part d'un profil plus plat (n=4). Le débit massique de gaz et la puissance utile étant conservés, l'utilisation d'un profil plus plat s'accompagne d'une baisse de température à l'axe et inversement. On observe que le cœur potentiel thermique est d'autant plus long que le profil en sortie est plat mais que la forme du profil en sortie perd de son influence lorsque la distance axiale augmente. Ces observations sont identiques pour le profil axial de vitesse.

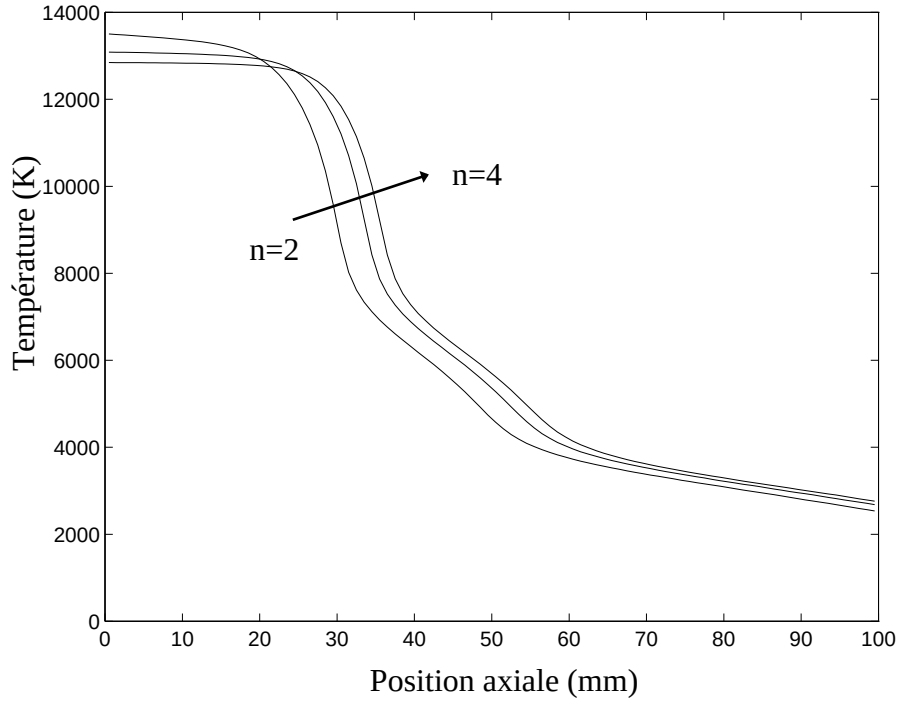


Figure 8 *: Influence de la forme des profils de vitesse et d'enthalpie en sortie de torche sur le profil axial de température dans le jet (modèle de Chen & Kim, Prt=Sct=0.7, sous air).*

- Influence de l'intensité de turbulence en sortie de torche :

La Figure 9 présente l'influence de la valeur de l'intensité de turbulence en sortie de torche. Trois résultats sont présentés, correspondant à des intensités de turbulence de 0.002, 0.003 et 0.004. La valeur de 0.003 est celle utilisée en règle générale dans nos calculs. L'augmentation de l'intensité de turbulence initiale conduit à l'obtention d'un cœur potentiel plus court. Toutefois, les écarts sont faibles et deviennent insignifiants lorsqu'on s'éloigne suivant l'axe.

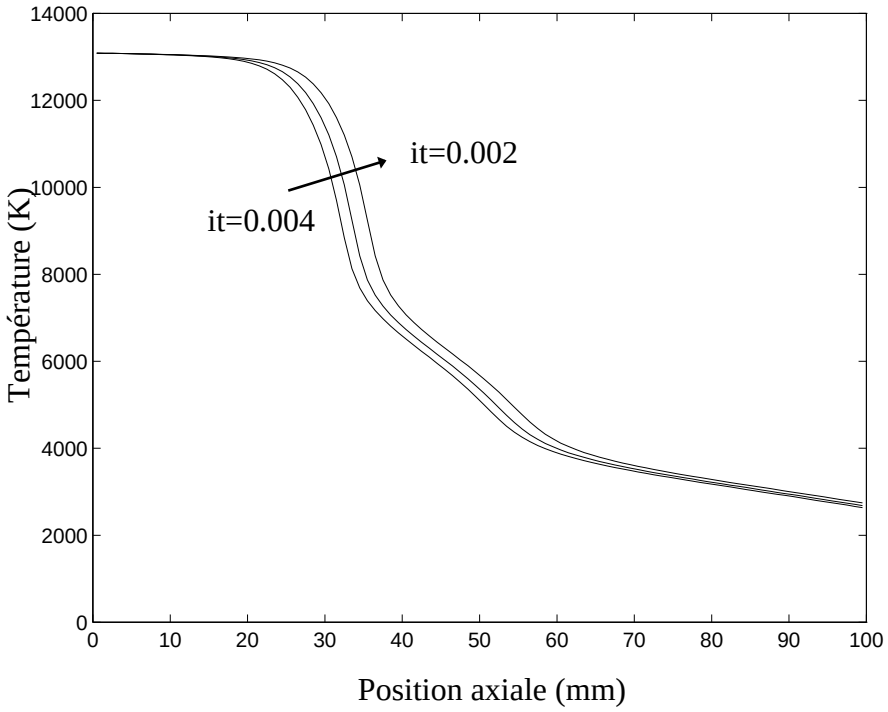


Figure 9 *: Influence de l'intensité de turbulence en sortie de torche sur le profil axial de température (modèle de Chen & Kim, Prt=Sct=0.7, environnement d'air).*

- Influence des paramètres de projection :

La Figure 10 présente l'influence de l'intensité du courant et du débit des gaz plasmagènes sur les profils axiaux de température calculés. La même référence que précédemment est conservée : Ar/H2 45/15 - 600A sous environnement d'air. L'influence d'une intensité de courant inférieure (400A) pour laquelle la puissance utile passe de 27 kW à 18 kW est étudiée dans un premier temps. On observe ainsi que l'utilisation d'une intensité de courant inférieure tout en gardant les autres paramètres constants provoque une diminution importante de la température du jet (courbes 1 et 2). Dans un deuxième temps, la diminution des débits de gaz en gardant des proportions similaires (30/10 au lieu de 45/15) et la même intensité (600A) mène à une diminution de la puissance utile de la torche qui passe de 27 kW à 21 kW. On constate que l'utilisation de débits inférieurs conduit dans ce cas à une température plus importante (courbes 2 et 3). Ceci s'explique par le fait que la puissance utile de la torche n'a pas diminué dans les mêmes proportions que le débit des gaz. En effet, si les débits de gaz ont diminué de 33%, la puissance utile n'a diminué que de 22%, ce qui conduit logiquement à une enthalpie spécifique supérieure et par la même à une température supérieure.

La Figure 11 présente l'influence des paramètres de projection sur le profil axial de vitesse calculé pour des conditions identiques à la Figure 10. Le passage à une intensité plus faible et l'utilisation de débits plus faibles provoquent une diminution de la vitesse, quelle que soit la position axiale dans le jet. On note ainsi que l'utilisation de débits plus faibles, tout paramètres égaux par ailleurs,

semble conduire à une augmentation de la température du jet tout en provoquant une diminution de la vitesse. On peut donc dès à présent supposer que pour des particules injectées dans le cœur du jet, les échanges thermiques sont ainsi favorisés par rapport aux échanges dynamiques (ce qui peut être recherché dans certains cas).

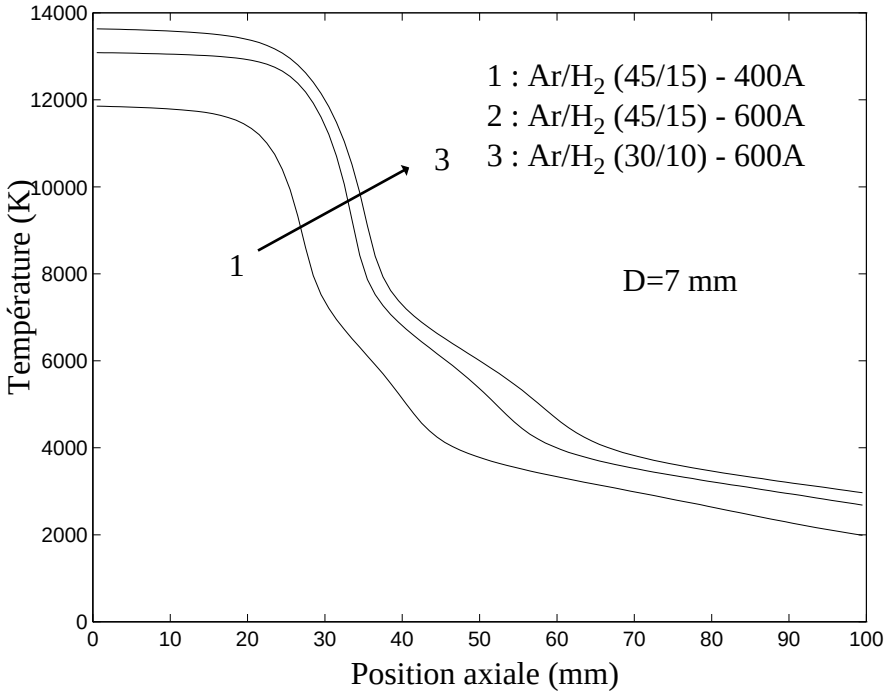


Figure 10 *: Influence de l'intensité du courant et du débit de gaz plasmagène sur le profil axial de température calculé (modèle de Chen & Kim, Prt=Sct=0.7, environnement d'air).*

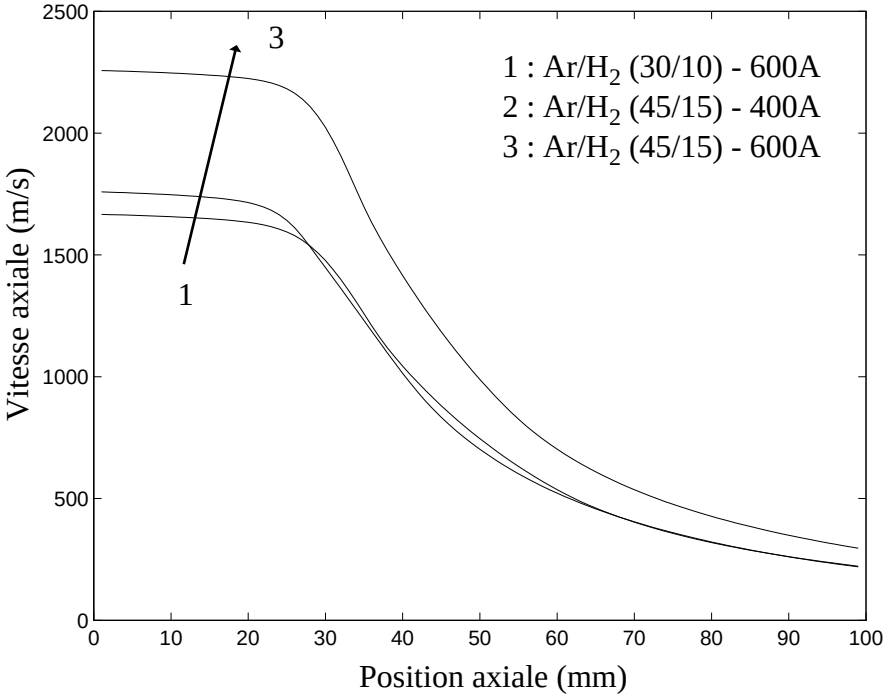


Figure 11 *: Influence de l'intensité du courant et du débit de gaz plasmagène sur le profils axial de vitesse calculé (modèle de Chen & Kim, Prt=Sct=0.7, environnement d'air).*

- Influence du diamètre de l'anode :

La Figure 12 présente l'influence du diamètre de torche (diamètre interne de l'anode) sur le profil axial de température. D'après Chambon [20], pour des débits respectifs d'argon et d'hydrogène de 30 et 10 Nl/min, en passant d'une torche de diamètre 7 mm à une torche de diamètre 6 mm, la puissance utile passe de 21 kW à 20 kW.

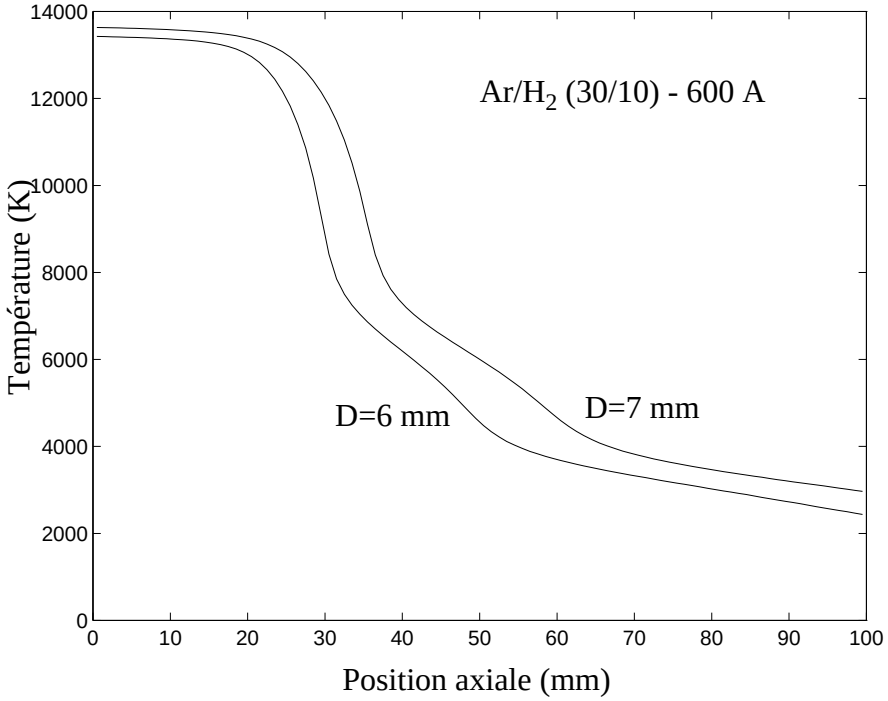


Figure 12 *: Evolution du profil axial de température calculé en fonction du diamètre de la torche (modèle de Chen & Kim, Prt=Sct=0.7, environnement d'air).*

L'utilisation d'une torche de diamètre 6 mm provoque un raccourcissement du cœur potentiel thermique et une baisse sensible de la température.

La Figure 13 présente l'influence du diamètre de la torche sur le profil axial de vitesse pour des conditions identiques à la Figure 12. On constate que la vitesse des gaz en sortie augmente avec la diminution du diamètre de torche dans des proportions similaires au rapport des sections. Cependant, le cœur potentiel étant plus court pour la torche de 6 mm, l'écart initial sur les vitesses diminue pour devenir rapidement inexistant.

Nous avons représenté sur la Figure 14, les évolutions de la fraction massique du mélange plasma argon/hydrogène sur l'axe pour les deux diamètres. Dans le cas d'une buse de 6 mm, le cœur potentiel étant plus court, l'entraînement d'air est plus précoce et provoque une diminution de la température (Figure 12). D'autre part, comme pour les cœurs potentiels thermiques et dynamiques, la fraction d'air entraîné semble être une fonction de *d/D*, où *d* est la distance axiale par rapport à la sortie de la torche et *D* est le diamètre de la torche. Ainsi, même si l'énergie thermique locale était similaire pour les deux diamètres, la température correspondante serait inférieure pour la torche de diamètre 6 mm du fait que la fraction d'air est supérieure pour cette torche.

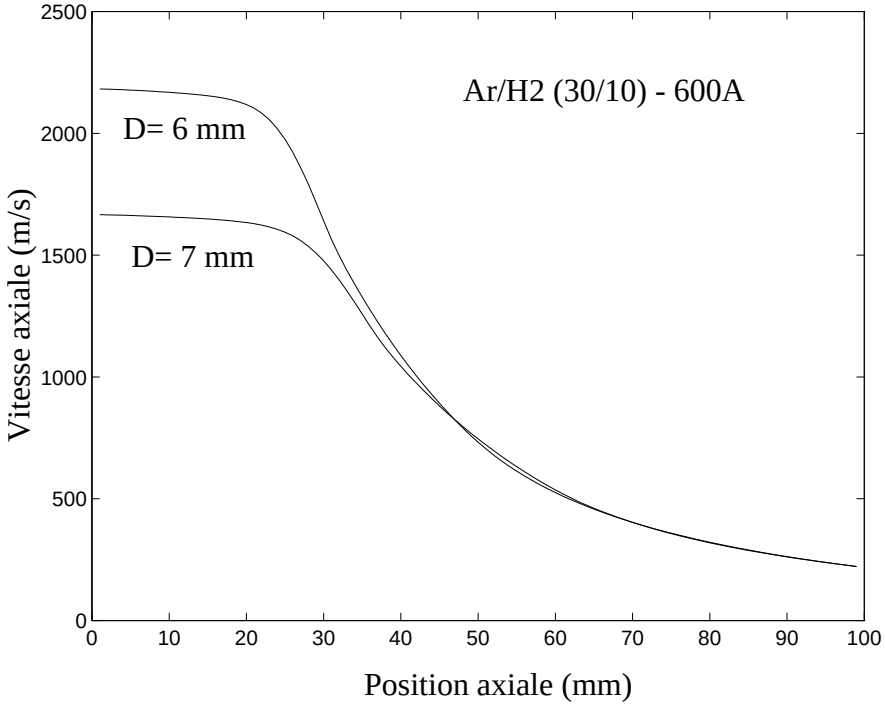


Figure 13 *:Evolution du profil axial de vitesse calculé en fonction du diamètre de la torche (modèle de Chen & Kim, Prt=Sct=0.7, environnement d'air).*

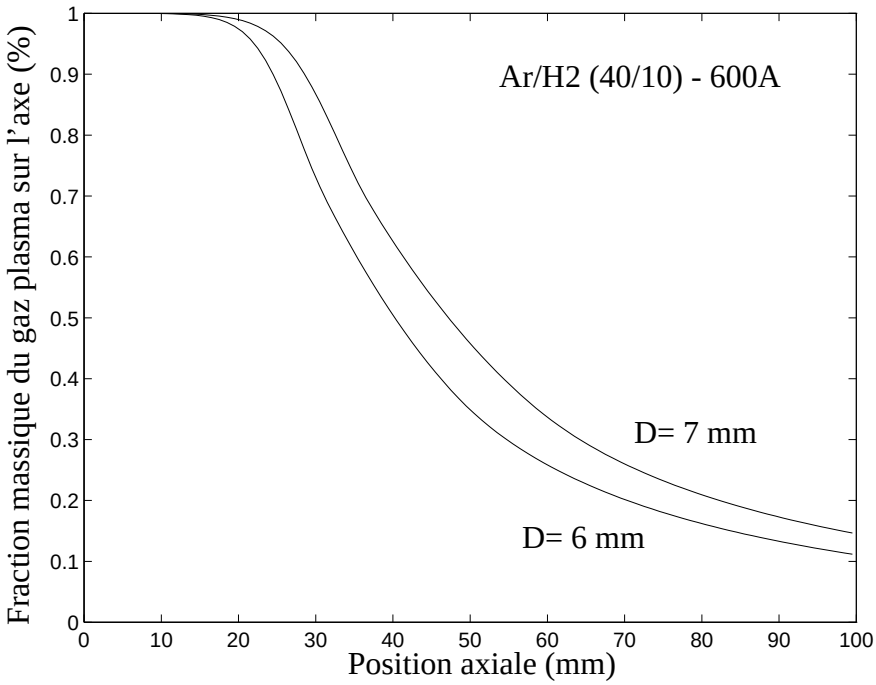


Figure 14 *:Evolution de la fraction massique du mélange argon/hydrogène suivant l'axe en fonction du diamètre de la torche (modèle de Chen & Kim, Prt=Sct=0.7, environnement d'air).*

Conclusion

Dans cette partie, nous avons mis en évidence l'influence particulière de la nature du gaz environnant sur le refroidissement d'un jet de plasma. Dans des conditions fixées de génération du

plasma, nous avons pu observer également que le modèle de turbulence et les valeurs des nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents constituent les paramètres les plus sensibles au niveau de la simulation (l'influence de la forme des profils et de l'intensité de turbulence étant moindre). Un autre point intéressant concerne également l'influence du diamètre interne de l'anode. Compte tenu des résultats obtenus, l'utilisation d'une anode de diamètre 7 mm semble être préférable à celle de diamètre 6 mm. En effet, si l'on excepte la zone du cœur du jet, la vitesse du jet de plasma semble être du même ordre pour les deux torches. Par contre, la température est significativement plus élevée pour l'anode de 7 mm. Toutefois, comme la Société Sulzer-Metco préconise l'utilisation de la torche possédant une anode de diamètre interne 6 mm, on peut penser que certains éléments ne sont vraisemblablement pas pris en compte au niveau de la simulation (par exemple des problèmes de stabilité de l'arc). Néanmoins, comme nous travaillons au laboratoire avec des torches de diamètre 6 mm uniquement, il nous est impossible de vérifier expérimentalement la validité de nos remarques quant à l'influence du diamètre de la torche. En revanche, la plupart des études réalisées à l'Université de Limoges étant faites avec des torches de 7 ou 8 mm, on peut penser qu'un intérêt y est trouvé.

2.4. Comparaison avec les mesures expérimentales

Comme Planche et Coudert [37, 38, 39] ont récemment réalisé des mesures de la vitesse du jet de plasma dans des conditions proches de celles considérées au paragraphe précédent, nous pouvons comparer nos résultats à leurs données expérimentales. Planche [39] a proposé une formulation semi-empirique exprimant la vitesse maximale en sortie de torche en fonction du débit des gaz, de l'intensité du courant et du diamètre de la torche. Suivant cette formulation, on a

$$V_{\max} = 0.0259 \frac{G^{0.21} I^{0.44}}{D^{1.96}}$$

pour un mélange argon/hydrogène (75/25) comme dans notre cas.

G est le débit massique de gaz en kg/s, *I* est l'intensité de courant en A et *D* le diamètre interne de l'anode en m.

En appliquant cette relation à une torche de diamètre 7 mm avec des débits de 45 Nl/min d'argon et de 15 Nl/min d'hydrogène et une intensité de 600A, on obtient une vitesse de 1810 m/s. Cette valeur est tout à fait comparable à celle obtenue suivant les relations de Chambon [20] ou Fauchais et al. [40]. La vitesse que nous calculons à l'axe étant de l'ordre de 2250 m/s, notre modèle semble donc surestimer quelque peu la vitesse à première vue. Néanmoins, si l'on regarde plus précisément les conditions dans lesquelles les mesures ont été réalisées, une torche différente de la torche F4 utilisée par Chambon a été utilisée. La torche utilisée lors des mesures de vitesse, de par une évolution différente de la tension et du rendement en fonction de l'intensité, fournit une puissance utile plus

faible pour une même intensité. Si l'on considère maintenant les résultats de Coudert [37] obtenus pour des débits identiques, pour des intensités de courant de 299A, 520A et 627A, les puissances utiles de la torche utilisée sont de 12.5 kW, 16.9 kW et 19.7 kW et aboutissent à des vitesses mesurées sur l'axe d'environ 1050 m/s, 1600 m/s et 1700m/s respectivement. On voit ainsi que la torche utilisée par Chambon, qui fournit une puissance utile de 27 kW à 600A, possède des caractéristiques différentes. A partir de ces remarques, en utilisant les puissances utiles indiquées ci-dessus, le modèle nous donne des vitesses de 1340 m/s, 1680 m/s et 1870 m/s, soit des surestimations de 27%, 5% et 10% relativement aux mesures. Pour les paramètres de Planche dans [38], pour une puissance utile de 22.4 kW, la vitesse mesurée était de 2166 m/s dans des conditions équivalentes. Pour cette puissance utile, nous obtenons une vitesse de 2030 m/s, soit une sous-estimation de 6 à 7% cette fois. Au vu des incertitudes existant aussi bien au niveau du modèle que des mesures, la comparaison de ces résultats est donc tout à fait satisfaisante.

Conclusions

Après avoir réalisé l'analyse d'un cas test, nous avons mis en évidence que l'un des éléments clés de la simulation des jets de plasma est le modèle de turbulence utilisé. Bien que le modèle k-ε standard non modifié soit connu pour être particulièrement inadapté à l'étude de jets ronds [25], il n'est pas évident de supposer que le modèle de turbulence de Chen & Kim (connu pour être plus performant pour ce cas) reste valide dans le cas de jets de plasma. En particulier, Pfender a montré que le processus d'entraînement du gaz ambiant dans les jets de plasma se fait plus par entraînement de bulles de gaz froid que par diffusion [10]. Il n'est donc pas évident qu'un modèle de turbulence testé pour des écoulements plus traditionnels permette de décrire, à une échelle globale, le cas d'un jet de plasma. A partir de ces remarques, il nous a semblé nécessaire de vérifier la validité de l'un ou l'autre des modèles de turbulence en comparant les résultats numériques obtenus à des mesures expérimentales. Dans ce but, nous avons donc considéré des études réalisées par différents auteurs. Pfender [10] a réalisé des mesures expérimentales de vitesse dans le cas d'un plasma d’argon par anémométrie laser sur de petites particules légères susceptibles de suivre le jet. Toujours dans le cas d'un plasma d'argon, Diliwari & Szekely [17] ont comparé leurs résultats numériques à des mesures de température et de concentrations réalisées par Brossa & Pfender par sonde enthalpique. Murphy [2] a également réalisé des mesures de température dans le cas d'un jet de plasma d'argon en utilisant une autre méthode (laser-scattering) alors que Fincke [8] a réalisé des mesures par sonde enthalpique dans le cas d'un mélange argon/hélium. Concernant les mélanges argon/hydrogène, les jets de plasma étant plus énergétiques, les sondes enthalpiques ne peuvent être utilisées. Pour ces

mélanges Chambon [20] ou Fauchais & al [41] rapportent les mesures de Roumilhac qui a utilisé une méthode de spectroscopie d'émission pour réaliser des mesures de température.

L'interprétation des comparaisons entre simulations et expérimentations ne nous a pas permis de tirer une conclusion définitive et globale. Concernant les jets de plasma d'argon, nous avons observé [27, 21] que l'utilisation du modèle $k-\varepsilon$ standard non modifié conduit à des vitesses et des températures plus importantes que celles mesurées par les auteurs précités. Concernant les mélanges argon/hélium, les résultats obtenus avec le modèle k-ε standard non modifié avec Prt=Sct=0.9 s'identifient quasi parfaitement avec les mesures de température et de concentrations réalisées par Fincke [8] alors que les vitesses calculées sont plus importantes que celles mesurées.

En revanche, pour les jets de plasmas composés de mélanges argon/hydrogène, l'utilisation de modèles appropriés aux jets ronds semble nécessaire et même parfois insuffisante, indiquant une sous-estimation de la température. En effet, les mesures de Roumilhac & al [42] pour un jet de plasma Ar/H2 (45/15) se déchargeant dans de l'air indiquent des températures supérieures à celles calculées quel que soit le modèle de turbulence utilisé.

A partir de ces commentaires, il semble souhaitable de choisir un modèle sur d'autres critères que la seule comparaison du modèle avec les mesures de vitesse et de température. Le laboratoire ayant acquis le système DPV2000 (mesure de vitesses, de températures et de tailles de particules en vol), nous avons alors pensé utiliser les mesures acquises avec ce système et vérifier dans quelle mesure les champs de vitesse et de température déterminés pour chacun des modèles de turbulence permettaient de conduire à des vitesses et des températures de particules en accord avec les mesures. Toutefois, nous nous sommes rapidement rendu compte que les incertitudes relatives aux interactions jet/particules (expression du coefficient de traînée des particules et du coefficient d'échange thermique jet/particule) étaient telles que là encore de mauvaises interprétations pouvaient être réalisées. A titre d'exemple, une sous-estimation de la vitesse du jet couplée à une surestimation du coefficient de traînée peut permettre d'aboutir à des vitesses de particules correctes. Finalement, le seul paramètre semblant pouvoir fournir des indications suffisantes concernait le flux thermique transmis à un substrat froid dans le cas d'un jet de plasma impactant. Ce travail est abordé dans le troisième chapitre.

1 D.A. Scott, P. Kovitya, “Temperatures in the plume of a dc plasma torch”, *J. Appl. Phys*., **66** (11), 5232 (1989).

2 A.B. Murphy, P. Kovitya, “Mathematical model and laser-scattering temperature measurements of direct-current plasma torch discharging into air”, *J. Appl. Phys.*, **73** (10), 4759-4769 (1993).

3 A. Bouvier, C. Delalondre, O. Simonin, J.F. Brilhac, “Numerical Modelling of the Internal Behaviour of a Vortex Stabilized Plasma Torch”, *EDF - Direction des Etudes et Recherches*, Internal Note N°95NM00013, (1994).

4 C. Delalondre, S. Zahrai, O. Simonin, “Turbulence Modelling in Electric Arc”, *EDF - Direction des Etudes et Recherches*, Internal Note N°95NR00038, (1994).

5 P. Eichert, “Etude de l'écoulement gazeux, au sein et à l'extérieur d'une torche à plasma d'arc soufflé, à l'aide du code PHOENICS”, Thèse - Université de Franche-Comté, N°25 (1996).

6 P. Eichert, M. Imbert, C. Coddet, “Numerical Study of an ArH2 gas mixture flowing inside and outside a dc plasma torch”, *Journal of Thermal Spray Technology*, **7** (4) 505-512 (1998).

7 J.D. Ramshaw, C.H. Chang, “Computational Fluid Dynamics Modeling of Multicomponent Thermal Plasma”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **12** (3) 299-325 (1992).

8 J.R. Fincke, C.H. Chang, S.W. Swank, D.C. Haggard, “Entrainment and demixing in subsonic thermal plasma jets: comparison of measurements and predictions”, *Int. J. Heat and Mass Transfer*, **37** (11) 1673-1682 (1994).

9 C.H. Chang, J.D. Ramshaw, “Modeling of Nonequilibrium Effects in a High-Velocity Nitrogen-Hydrogen Plasma Jet”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **16** (1) 5S-17S (1996).

10 E. Pfender, J. Fincke, R. Spores, “Entrainment of Cold Gaz into Thermal Plasmas Jets”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **11** (4) 529-543 (1991).

11 P.C. Huang, J. Heberlein, E. Pfender, “New Modeling Approach for calculating Particle Trajectories in a Turbulent Plasma Spray Jet”, in *Proceedings of International Thermal Spray Conference*, pp 1159-1163, Ed. A. Ohmori, Kobe (1995).

12 P.C. Huang, J. Heberlein, E. Pfender, “Particle Behavior in a two-fluid turbulent plasma jet”, *Surface & Coatings Technology*, **73**, 142-151 (1995).

13 A.H. Diliwari, J. Szekely, “Some Perspectives on the Modeling of Plasma Jets”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **7** (3), 317-337 (1987).

14 A.H. Diliwari, J. Szekely, “Fluid flow and heat transfer in plasma reactors - I. Calculation of velocities, temperature profiles and mixing”, *Int. J. Heat and Mass Transfer*, **30** (11), 2357-2372 (1987).

15 A.H. Diliwari, J. Szekely, J.F. Coudert, P. Fauchais, " Fluid flow and heat transfer in plasma reactors - II. A critical comparison of experimentally and theoretically predicted temperature profiles in plasma jets in the abscence and presence of side-stream injection", *Int. J. Heat and Mass Transfer*, **32** (1), 35-46 (1989).

16 A.H. Diliwari, J. Szekely, J. Batdorf, R. Detering, C.B. Shaw, "The temperature Profiles in an Argon Plasma Issuing into an Argon Atmosphere: a Comparison of Measurements and Predictions, " *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **10** (2), 331-337 (1990).

17 A.H. Diliwari, J. Szekely, R. Westhoff, "A Comparison of Experimental Measurements and Theoretical Predictions Regarding the behavior of a Turbulent Plasma Jet Discharging into Air", *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **10** (4), 501-513 (1990).

18 Y.C. Lee, E. Pfender, "Particle Dynamic and Particle Heat and Mass Transfer in Thermal Plasma Jet Reactors and Multiple Injection", *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **7** (1), 1-27 (1987).

19 B. Pateyron, "Contribution à la réalisation et à la modélisation de réacteurs plasmas soufflés ou transférés appliqués à la métallurgie extractive et à la production de poudres ultrafines métalliques ou céramiques", Thèse - Université de Limoges, N°21-1987 (1987).

20 G. Chambon, "Contribution à l'étude des flux thermiques en projection plasma et refroidissement cryogénique", Thèse - Université de Limoges, N°49-96 (1996).

21 R. Bolot, C. Coddet, M. Imbert, "Mathematical Modeling of a Free Plasma Jet Discharging into air and Comparison with Probe Measurements", in *Thermal Spray : A United Forum for Scientific and Technological Advances*, (Proceedings of the United Thermal Spray Conference, Indianapolis, 1997), Vol. 1, pp. 549-555, Ed. C.C. Berndt, Pub. ASM Int., Materials Park, OH-USA (1997).

22 J.N. Butler, R.S. Brokaw, "Thermal Conductivity of Gas Mixtures in Chemical Equilibrium", *The Journal of Chemical Physics*, **26** (6) 1636 (1957).

23 Y.S. Chen, S.W. Kim, "Computation of Turbulent Flows Using an Extented k-ε Turbulence Closure Model", NASA CR-179204 (1987).

24 D. Lee, C.L. Yeh, "Computation of reacting flame stabilizer flows using a zonal grid method", *Numerical Heat Transfer*, **24**, 273-285 (1993).

25 B.E. Launder, D.B. Spalding, "The numerical Computation of Turbulent Flows", *Computer Methods in Applied mechanics and engineering*, **3**, 269-289 (1974).

26 R. Schiestel, "Modélisation et simulation des écoulements turbulents", Ch. 10, p. 218 et Ch. 12, p. 241, Hermès, Paris (1993).

27 R. Bolot, C. Coddet, M. Imbert, "The use of the Phoenics Code for Plasma Jet modeling", *The Phoenics Journal of Computational Fluid Dynamic*, **10** (3), 87-104 (1997).

28 R. Bolot, V. Monin, M. Imbert, C. Coddet, “Mathematical Modeling of a Plasma Jet Impinging on a Flat Structure”, in *Thermal Spray : Meeting the Challenges of the 21th Century*, (Proceedings of the International Thermal Spray Conference, Nice, 1998), Vol. 1, pp. 439-444, Ed. C. Coddet, Pub. ASM Int., Materials Park, OH-USA (1998).

29 P. Nylén, R. Bolot, A. Hansbo, C. Coddet, “Modelling and Measurements of Particle In-flight Characteristics of Atmospheric Plasma Sprayed Yttria Stabilised Zirconia”, in *Proceedinds of the Heat and Mass Transfer under Plasma Conditions Conference*, 19-23 Avril 1999, Antalya, Turkey.

30 M. Leylavergne, A. Vardelle, B. Dussoubs, N. Goubot, “Comparison of Plasma-Sprayed Coatings Produced in Argon or Nitrogen Atmosphere”, in *Thermal Spray : A United Forum for Scientific and Technological Advances*, (Proceedings of the United Thermal Spray Conference, Indianapolis, 1997), p 459, Ed. C.C. Berndt, Pub. ASM Int,Materials Park, OH-USA (1997).

31 B. Dussoubs, P. Fauchais, A. Vardelle, M. Vardelle, “Computational Analysis of a Three-Dimentional Plasma Spray Jet”, in *Thermal Spray : A United Forum for Scientific and Technological Advances*, (Proceedings of the United Thermal Spray Conference, Indianapolis, 1997), p 557, Ed. C.C. Berndt, ASM Int, Materials Park, OH-USA (1997).

32 B. Dussoubs, A. Vardelle, P. Fauchais, “Modeling of a Plasma Spray System”, in Proceedings of the 4th International Thermal Plasma Processes Conference, p 861-868, Ed. P. Fauchais, Begell House Inc, Athens (1996).

33 W.H. Zhuang, D. Gray, K. Etemadi, D.M. Benenson, “Study of Deposition Offset in Plasma Spray of Zirconia”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **16** (1), 127S-139S (1996).

34 P. Nylén, J. Wigren, M.O. Hansson, A.C. Leger, “An Experimental and Analytical Study of the Air Plasma Spraying of Tribaloy 800”, in *Proceedings of the United Thermal Spray Conference*, 15-18 Mars 1999, Dusseldorf, Germany.

35 R.S. Amano, H. Brandt, “Numerical Study of Turbulent Axisymmetric Jets Impinging on a Flat Plate and Flowing Into an Axisymmetric Cavity”, *Jounal of Fluids Engineering*, **106**, 410-416 (1984).

36 M. Nallasamy, “Turbulence Models and their Applications to the Prediction of Internal Flows: A Review”, *Computers & Fluids*, **15** (2) 151-194 (1987).

37 J.F. Coudert, M.P. Planche, P. Fauchais, “Velocity Measurements of dc Plasma Jets based on Arc Root Fluctuations”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **15** (1), 47-70 (1995).

38 M.P. Planche, O. Betoule, J.F. Coudert, A. Grimaud, M. Vardelle, P. Fauchais, “Performance Characteristics of a Low Velocity Plasma Spray Torch”, in *Thermal Spray : Research, Design and Applications*, (Proceedings of the National Thermal Spray Conference, Anaheim, 1993), pp. 81-87, Ed. C.C. Berndt & T.F. Bernecki, Pub. ASM Int., Materials Park, OH-USA (1993).

39 M.P. Planche, J.F. Coudert, P. Fauchais, “Velocity Measurements for Arc Jets Produced by a DC Plasma Spray Torch”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **18** (2), 263-283 (1998).

40 P. Fauchais, M. Vardelle, A. Vardelle, L. Bianchi, A.C. Léger, “Parameters Controlling the Generation and Properties of Plasma Sprayed Zirconia Coatings”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **16** (1), 99S-125S (1996).

41 P. Fauchais, J.F. Coudert, M. Vardelle, A. Vardelle, A. Denoirjean, “Diagnostics of Thermal Spraying Plasma Jets”, *Journal of Thermal Spray Technology*, **1** (2) 117-128 (1992).

42 P. Roumilhac, J.F. Coudert, J.M. Leger, A. Grimaud, P. Fauchais, M. Ducos, “Characterization of a D.C. Spraying Plasma Torch using Optical and Thermal Diagnostics”, in *Proceedings of 1st Plasma Technik Symposium*, Vol. 1 (1988).

Chapitre 3

Jets de plasma impactants
Echanges thermiques jets/substrats

3. Jets de plasma impactants - Echanges thermiques jets/substrats

La plupart des études théoriques de jets de plasma ont été consacrées aux jets libres et seuls quelques travaux prennent en compte la présence d'un obstacle en aval [1, 2]. A notre connaissance, la première étude numérique qui ait tenté d'aborder les problèmes de transferts thermiques entre un jet de plasma et un substrat est celle de Boulos et Simard [2]. Toutefois, nous avons montré que l'utilisation de fonctions de paroi pour décrire les échanges est peu appropriée [3]. A contrario, ce problème critique a fait l'objet d'un certain nombre de travaux expérimentaux ces dernières années. Ainsi, deux thèses de l'université de Limoges y ont notamment été consacrées [4, 5]. Les techniques de mesures mises en place à Limoges utilisent ainsi deux calorimètres coaxiaux, le flux transmis est alors mesuré en fonction de l'élévation de température du liquide de refroidissement et de son débit. Avec cette technique, la surface du calorimètre est constamment maintenue à une température très faible (toujours inférieure à 100°C) et on obtient le flux thermique qui serait transmis à un substrat froid. Dans son étude, Monerie-Moulin [6] a utilisé deux calorimètres de diamètres 6.35 mm pour le calorimètre interne et 76 mm pour le calorimètre externe. Les résultats obtenus sur des mélanges argon/hydrogène lui ont permis d'établir une relation semi-empirique permettant d'estimer le flux thermique au point d'impact.

$$\phi_0 = 0.228 + 5.57\ 10^{-10} Fr^{0.052} Ar^{-1.64} d^{-2.55} p^{1.33} D^{-0.34}$$

où

ϕ_0 est la valeur du flux à l'axe (MW/m^2)

Fr est le débit total de gaz plasma (Nl/min),

Ar est la fraction d'argon (Nl/Nl)

d est la distance axiale du calorimètre (m)

p est la puissance électrique dissipée (W)

D est le diamètre de la torche (m)

Chambon [5] a rappelé le domaine de validité de cette formule. Elle s'applique pour des flux allant de 0.8 à 16 MW/m2, un débit total de gaz plasma compris entre 45 et 70 Nl/min, un pourcentage d'argon supérieur à 66%, une distance de projection de 40 à 120 mm, une puissance électrique de 9 à 42 kW et un diamètre de torche de 6 à 8 mm.

Concernant le profil radial du flux transmis, Monerie-Moulin [6] a en première approximation supposé un flux thermique de type gaussien

$$\phi(r) = \phi_0 \exp\left[-\left(\frac{r}{Rg}\right)^2\right]$$

où *r* est l'écartement radial par rapport au point d'impact (axe) et *Rg* est le rayon de la gaussienne.

Il rappelle que ce choix a été rendu nécessaire par le fait que seules les valeurs des puissances reçues par les deux calorimètres devaient permettre d'estimer un profil. Ainsi, avec les puissances P_1 et P_2 reçues par les calorimètres central et périphérique de surfaces respectives S_1 et S_2, il obtient un

système de deux équations à deux inconnues ϕ_0 et Rg. Il note également que le diamètre du calorimètre interne étant toujours faible devant Rg, la valeur P_1/S_1 est bien représentative de ϕ_0 tandis que P_2 permet donc principalement de déduire la valeur de Rg. Enfin, à partir de ces mesures, il indique que, pour des distances supérieures à 80 mm, la valeur de Rg varie très peu et reste de l'ordre de 20 mm (environ 19 à 80 mm et 20.5 à 110 mm).

Lors de son étude, Chambon [5] a utilisé un montage proche de celui de Monerie-Moulinavec un calorimètre interne de diamètre semblable (6 mm au lieu de 6.35) mais un calorimètre externe de diamètre largement supérieur (300 mm au lieu de 76) dans le but de capter la totalité du flux transmis à une surface plane. Il note ainsi qu'en conservant l'hypothèse d'un flux gaussien, avec

$$\int_a^b r\ \exp\left(-r^2\right)\ dr = -\tfrac{1}{2}\left[\exp\left(-r^2\right)\right]_a^b$$

Il vient

$$P_1 = \phi_0\left(\pi Rg^2\right)\left[1 - \exp\left(-\left(R_1 / Rg\right)^2\right)\right]$$

$$P_2 = \phi_0\left(\pi Rg^2\right)\left[\exp\left(-\left(R_1 / Rg\right)^2\right)\right]$$

$$Pt = P_1 + P_2 = \phi_0\left(\pi Rg^2\right)$$

où R_1 est le rayon du calorimètre central.

Avec ces résultats, il déduit directement ϕ_0 et Rg en fonction de P_1 et P_2 par

$$\phi_0 = \left(P_1 + P_2\right)/\left(\pi Rg^2\right)$$

$$Rg = R_1 / \sqrt{\ln\left(1 + P_1/P_2\right)}$$

En utilisant cette méthode pour des jets de plasma argon/hydrogène sous argon ou sous air, il arrive finalement à des résultats en bon accord avec l'expression de ϕ_0 donnée par Monerie-Moulin entre 80 et 100 mm mais obtient par contre des flux inférieurs pour des distances supérieures et des valeurs de Rg pouvant devenir largement supérieures pour des distances torche/paroi importantes (de l'ordre de 50 mm au lieu d'un peu plus de 20 mm à 140 mm). Les travaux de Monerie-Moulin et Chambon sont donc d'un grand intérêt pour l'estimation des flux échangés entre un jet de plasma et un substrat. Etant donnée la bonne corrélation de leurs résultats pour des distances de l'ordre de 80 à 100mm, ceux-ci peuvent permettre de vérifier la validité d'un modèle numérique représentant le cas d'un jet impactant. De plus, la sensibilité de la valeur du flux à l'axe par rapport à d (évolution en $d^{-2.55}$ pour la formulation de Monerie-Moulin) semble telle que si un modèle prédit une diminution trop rapide de la température ou de la vitesse suivant l'axe, la valeur du flux prédit en sera significativement affectée. La prochaine partie sera donc consacrée à l'étude numérique des jets de plasma impactant.

3.1. Les modèles

Contrairement au calcul des jets libres, il est impossible de traiter le cas des jets impactants à l'aide d'un système d'équations de type parabolique. En effet, dans ce cas, on passe d'un écoulement fortement privilégié dans l'une des directions (jet libre) à un écoulement privilégié dans l'autre

direction (écoulement tangentiel à une paroi). Nous présentons donc dans un premier temps les équations régissant l'écoulement d'un jet de plasma impactant.

3.1.1. Equations générales

Les équations de conservation de chaque grandeur ϕ en régime stationnaire peuvent être mises sous la forme

$$\vec{\nabla}.\left(\rho\vec{\mathbf{V}}\phi - \Gamma_\phi\vec{\nabla}\phi\right) = S_\phi$$

En coordonnées cylindriques, la divergence d'un vecteur $\vec{\mathbf{F}}$ quelconque s'exprime suivant

$$\vec{\nabla}.\vec{\mathbf{F}} = \frac{\partial Fz}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial Fr}{\partial r}$$

si $F_\theta = 0$ (modèle 2D).

où *Fz* et *Fr* désignent les composantes axiales et radiales de $\vec{\mathbf{F}}$.

Dans le cas présent comme dans le cas des jets libres, nous résolvons l'équation de continuité, les équations de conservation des quantités de mouvement axiale et radiale, l'équation de conservation du gaz plasma (relativement au gaz ambiant), l'équation de conservation de l'énergie ainsi que les équations de conservation de l'énergie cinétique de turbulence et de son taux de dissipation.

ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
1	*0*	*0*
w	$\mu_e = \mu + \mu_t$	$-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu_e\frac{\partial w}{\partial z}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu_e\frac{\partial v}{\partial z}\right)$
v	$\mu_e = \mu + \mu_t$	$-\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu_e\frac{\partial w}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu_e\frac{\partial v}{\partial r}\right) - 2\mu_e\frac{v}{r^2}$
y	$\frac{\mu}{\mathrm{Sc}} + \frac{\mu_t}{\mathrm{Sc}_t}$	*0*
h	$\frac{\mu}{\mathrm{Pr}} + \frac{\mu_t}{\mathrm{Pr}_t}$	$v\frac{\partial p}{\partial r} + w\frac{\partial p}{\partial z} + \mu_e\phi_V$
k	$\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}$	$\rho(P - \varepsilon)$
ε	$\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}$	$\rho\frac{\varepsilon}{k}\left(C_1P - C_2\varepsilon + C_3\frac{P^2}{\varepsilon}\right)$

Tableau 1 : *Coefficients d'échanges et termes sources des grandeurs résolues*

Pour chacune de ces grandeurs, le coefficient d'échange Γ_ϕ et le terme source S_ϕ associés sont donnés dans le Tableau 1.

La fonction de dissipation ϕ_V et le taux de production *P* de l'énergie de turbulence s'expriment maintenant suivant

$$\rho P = \mu_t\phi_V = \mu_t\left[\left(\frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial v}{\partial r}\right)^2 + 2\left(\frac{v}{r}\right)^2\right]$$

3.1.2. Modèles de turbulence

Comme nous l'avons précisé en introduction, il existe peu de travaux de modélisation se rapportant à l'étude des jets de plasma impactants et aux échanges thermiques jet/substrat. Les causes de ce manque sont plus sûrement liées à la complexité du sujet qu'à un manque d'intérêt. En effet, le calcul des échanges thermiques pour de tels écoulements présente d'importantes difficultés si bien qu'une attention toute particulière doit être portée quant à la validité des modèles utilisés. Nous avons présenté dans une première étude [3] les prédictions des flux thermiques calculés en utilisant des fonctions de paroi traditionnelles (lois logarithmiques). L'analyse des résultats montre que cette approche est très approximative. En effet, on peut penser qu'il faille utiliser un raffinement important du maillage près de la surface pour décrire des phénomènes d'échange qui se produisent dans la couche limite. Or sans effectuer aucun raffinement, il est apparu clairement que la limite de validité des fonctions de paroi était déjà dépassée. A cet égard, l'observation des figures présentées dans cette première étude est explicite dans la mesure où la transition loi log /loi laminaire se produit au voisinage du point d'impact (voir annexe pour la définition de ces différentes lois). Sachant que ce problème s'accentue lorsqu'on resserre le maillage, le problème est alors insolvable par l'utilisation de fonctions de paroi. Dans le but de pouvoir traiter ce genre de problèmes, de nombreux chercheurs ont développé des modèles de turbulence se voulant valides à la fois dans les zones turbulentes, de transition et laminaires. Dans la plupart des cas, il s'agit de modèles basés sur le modèle k-ε standard mais faisant intervenir : soit des modifications locales des constantes du modèle de turbulence, soit des termes additionnels aux équations de transport de k et ε, soit les deux à la fois.

Patel & al [7] ont réalisé une revue des extensions à bas Reynolds au modèle k-ε et ont testé chacun d'entre eux dans le cas d'un écoulement simple sur une plaque plane. D'après leurs conclusions, les modèles de Launder & Sharma (utilisé par exemple par Delalondre & al [8, 9]), de Chien [10] et de Lam & Bremhorst [11] semblent être les plus performants. Dans la version 3.1 de PHOENICS (version actuelle que nous utilisons), seul le modèle de Lam & Bremhorst a été implémenté. Par conséquent, l'utilisation de ce modèle ne nécessite aucune programmation de la part de l'utilisateur, au contraire des autres pour lesquels une programmation personnelle est requise. Dans notre cas, le modèle plus récent de Davidson [12] a par exemple été codé. Après avoir testé les modèles de Lam & Bremhorst et de Davidson, nous avons constaté que leur utilisation menait à une surestimation pouvant être très large des échanges thermiques dans le cas des jets impactants. En fait, si les modèles à bas Reynolds ont permis de pouvoir traiter certains types d'écoulements de manière plus adéquate, il reste des situations qu'il est toujours difficile d'appréhender. Les écoulements impactants ou ceux présentant des zones de décollement constituent les points faibles des modèles à bas Reynolds [13] et il est typiquement possible d'obtenir des surestimations pouvant aller jusqu'à 400% concernant la prédiction des échanges thermiques. Cette remarque va dans le même sens que celle de Leschziner (EDF) [14] qui mentionne un “taux excessif sévère de transfert thermique” pour de tels écoulements.

Néanmoins, il reste tout de même deux solutions pour traiter ces écoulements. La première consiste à utiliser un modèle à bas Reynolds et à ajouter un terme source à l'équation de ε. Ce terme est

destiné à réduire l'échelle de longueur du modèle si celle- ci dépasse sa valeur d'équilibre près de la paroi en dehors de la sous-couche visqueuse. Cette méthode est celle proposée par Yap [15] qui a consacré sa thèse à l'étude des écoulements avec zone de recirculation et des écoulements impactants. Yap propose ainsi d'ajouter le terme

$$S_\varepsilon = \max\left(0.83\left(\frac{l}{L} - 1\right)\left(\frac{l}{L}\right)^2 \frac{\varepsilon^2}{k};\ 0 \right)$$

à l'équation de ε.

où $l = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}$ et $L = \kappa n$ (n étant la distance locale par rapport à la paroi la plus proche)

Avec $C_\mu = 0.09$ et $\kappa = 0.41$, on a alors $\frac{C_\mu^{3/4}}{\kappa} = 0.4$ et $\frac{l}{L} = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon\ 2.5n}$.

Ainsi, l'échelle de longueur du modèle l est maintenue proche de sa valeur d'équilibre à la paroi L.

Leschziner (EDF) [14] rapporte que l'utilisation du terme correctif de YAP permet de supprimer le problème de surestimation des échanges thermiques. D'une manière générale, Laurence (EDF) [16] insiste sur le fait que dans toutes les situations complexes, et en particulier dans le cas des écoulements impactants, la correction de Yap est incluse systématiquement dans leurs codes.

La deuxième solution consiste à utiliser un modèle à deux couches. Avec un tel modèle, l'écoulement est calculé suivant la forme “normale” du modèle de turbulence loin de la paroi et avec un modèle à une équation près de la paroi, la zone de transition étant établie pour une certaine valeur du nombre de Reynolds local relatif à la paroi. Ainsi, avec le modèle à deux couches, on utilise l'évolution connue de l'échelle de longueur près d'une paroi pour y fixer ε. Dans notre première étude [3], nous avons utilisé une extension à deux couches au modèle k-ε standard et nous avons ainsi obtenu une très nette amélioration de la prédiction des échanges thermiques relativement à celle obtenue par l'utilisation de fonctions de paroi.

3.1.3. Modèle à bas Reynolds de Lam & Bremhorst

Le modèle de Lam-Bremhorst est une extension à bas Reynolds au modèle k-ε standard. Il présente l'avantage de n'utiliser aucun terme additionnel sur les équations de k et de ε. Il utilise ainsi uniquement des modifications locales des valeurs de C_μ, C_1 et C_2. Dans la littérature, ces modifications locales sont généralement notées f_μ, f_1 et f_2.

Suivant ce modèle, les fonctions utilisées sont

$$f_\mu = \left(1 - \exp\left(-0.0165 R_k\right)\right)^2 \left(1 + \frac{20.5}{R_t}\right)$$

$$f_1 = 1 + \left(\frac{0.05}{f_\mu}\right)^3$$

$$f_2 = 1 - \exp\left(-R_t^2\right)$$

où $R_k = \frac{k^{1/2} n}{\nu_l}$ et $R_t = \frac{k^2}{\nu_l \varepsilon}$

ν_l étant la viscosité cinématique laminaire et n désignant la distance à la paroi.

Les conditions aux limites à appliquer sur k et ε sont alors

$$k = 0 \text{ et } \frac{\partial \varepsilon}{\partial n} = 0 \text{ à la paroi}$$

Pour les raisons expliquées précédemment, il est préférable d'ajouter également le terme source de Yap à l'équation de ε dans le but de maintenir l'échelle de longueur du modèle à sa valeur d'équilibre proche de la paroi. Néanmoins, nous avons vérifié que les fonctions f_1 et f_2 deviennent alors superflues. En effet, au voisinage de la paroi, le terme de Yap devient prépondérant dans l'équation de ε si bien que f_1 et f_2 n'influencent plus ni l'évolution de ε ni celle de l. Ainsi, si la correction de Yap est utilisée, l'utilisation de $f_1 = 1$ et $f_2 = 1$ au lieu des expressions précédentes n'a alors plus aucune influence et seule f_μ garde un sens en modifiant la valeur de la viscosité turbulente.

3.1.4. Modèle à deux couches

Le modèle de turbulence à deux couches que nous utilisons (et qui est disponible dans la version 3.1 de PHOENICS si le modèle k–ε standard est utilisé) est celui de Rodi [17]. D'après ce modèle, ε le taux de dissipation de k est fixé dans la couche limite suivant

$$\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\kappa n} F_\varepsilon = \frac{k^{3/2}}{2.5\ n} F_\varepsilon$$

où

$$F_\varepsilon = 1 + \frac{5.3}{R_k}$$

La transition entre les deux zones (modèle à 1 ou 2 équations) s'effectue pour $R_k = 350$ ce qui conduit à F_ε proche de l'unité. La viscosité turbulente est calculée suivant

$$\mu_t = \rho C_\mu^{1/4} k^{1/2} l\ \ F_\mu$$

avec

$$\begin{cases} l = \kappa n & \text{si} \quad R_k < 350 \\ l = C_\mu^{3/4} \dfrac{k^{3/2}}{\varepsilon} & \text{si} \quad R_k > 350 \end{cases}$$

et

$$F_\mu = 1 - \exp(-0.0198\ \ R_k)$$

3.1.5. Exemple de la linéarisation des termes sources pour k et ε.

La méthode d'inclusion des termes sources et de prise en compte des conditions aux limites est décrite en annexe. Toutefois, il est utile de présenter un exemple concret. En effet, la linéarisation des termes sources sur les grandeurs de turbulence est déterminante quant à la convergence d'un calcul. Les termes sources sont inclus par le biais d'un coefficient et d'une valeur. Nous allons donc illustrer le principe en décrivant quels pourront être les valeurs et coefficients utilisés pour l'exemple du modèle à deux couches.

Concernant l'énergie cinétique de turbulence k, le terme source s'écrit

$$S(k) = \rho(P - \varepsilon)$$

Ce terme devant être mis sous la forme

$$S(k) = \rho \; Co \; (Val - k),$$

en utilisant

$$Co = C_\mu \frac{k}{\nu_t} F_\mu F_\varepsilon \quad \text{et} \quad Val = P \frac{\nu_t}{k} \frac{1}{C_\mu F_\mu F_\varepsilon}$$

et en précisant que le type du terme est “PHASEM” (terme source par unité de masse qui correspondra à un coefficient multiplicateur égal à ρ), on ajoute le bon terme.

Pour ε le taux de dissipation de *k*, les valeurs de *Val* et *Co* sont immédiates. On a

$$S(\varepsilon) = \rho \frac{\varepsilon}{k} \left(C_1 P - C_2 \varepsilon \right)$$

et donc

$$Co = C_\mu C_2 \frac{k}{\nu_t} \quad \text{et} \quad Val = \frac{C_1}{C_2} P \quad \text{si } R_k > 350$$

et

$$Co = 10^{10} \quad \text{et} \quad Val = \frac{k^{3/2}}{2.5 \; n} F_2 \quad \text{si } R_k < 350$$

Cet exemple illustre parfaitement la simplicité de la méthode quant à l'inclusion de termes source. On aurait pu ne pas utiliser de linéarisation et prendre par exemple pour *k* :

$$Co = 10^{-10} \quad \text{et} \quad Val = \rho (P - \varepsilon) / Co$$

Néanmoins si le terme source est le même dans les deux cas, son influence sur la convergence est très différente. Dans le second cas en effet, tout le terme source reste dans le membre de droite de l'équation discrétisée alors que dans le premier cas (qui est bien sûr meilleur), une partie proportionnelle à la variable passe dans le membre de gauche de l'équation discrétisée (voir annexe).

3.1.6. Lois de mélanges pour les coefficients de transport

Nous avons vu au chapitre précédent que l'approximation liée à l'utilisation de lois de mélange pour déterminer les coefficients de transport n'a que peu d'influence dans le cas des jets libres. Toutefois, dans le cas des jets impactants, comme nous verrons qu'il est nécessaire d'effectuer un raffinement du maillage dans la couche limite à la surface d'impact si l'on veut espérer obtenir une prédiction réaliste des échanges thermiques, l'approximation liée à l'estimation de la conductivité thermique est remise en cause (dans la mesure où les coefficients d'échange laminaires redeviennent supérieurs aux coefficients d'échange turbulents dans la sous-couche laminaire). Néanmoins, dans la mesure où la fraction du gaz plasma devient inférieure à 20% pour des distances supérieures à 80 mm entre la sortie du jet et la surface d'impact, on pourrait supposer que, de par ce taux de dilution important, les propriétés de transport au voisinage de la surface deviennent peu différentes de celles du gaz environnant. La Figure 1 présente les évolutions du nombre de Prandtl de l'air, du mélange Argon/hydrogène (45/15) et du mélange constitué de 20% d'Ar/H_2(45/15) pour 80% d'air en fonction de la température. Nous remarquons premièrement l'évolution irrégulière du nombre de Prandtl de l'air qui reste toutefois supérieur à 0.5 quelle que soit la température inférieure à 14000 K. Nous notons deuxièmement les très faibles valeurs du nombre de Prandtl du mélange argon/hydrogène spécialement au voisinage de la température de dissociation de l'hydrogène. Nous

constatons enfin que l'utilisation d'une expression approximative du nombre de Prandtl du mélange air/Ar/H2 n'en donne pas une bonne estimation au voisinage de la température de dissociation de l'hydrogène. Finalement, même si l'hydrogène est en proportion faible au sein du mélange avec l'argon et l'air, son influence demeure significative. Toutefois, à basse température, l'expression approximative du nombre de Prandtl en donne une valeur correcte. Comme le maillage sera réalisé de telle sorte que suffisamment de cellules se trouvent à l'intérieur de la couche limite dans la zone de température inférieure à 2000K, nous pourrons tout de même conserver une estimation réaliste des échanges thermiques en conservant les mêmes méthodes de calcul des coefficients de transport que lors de l'étude des jets libres.

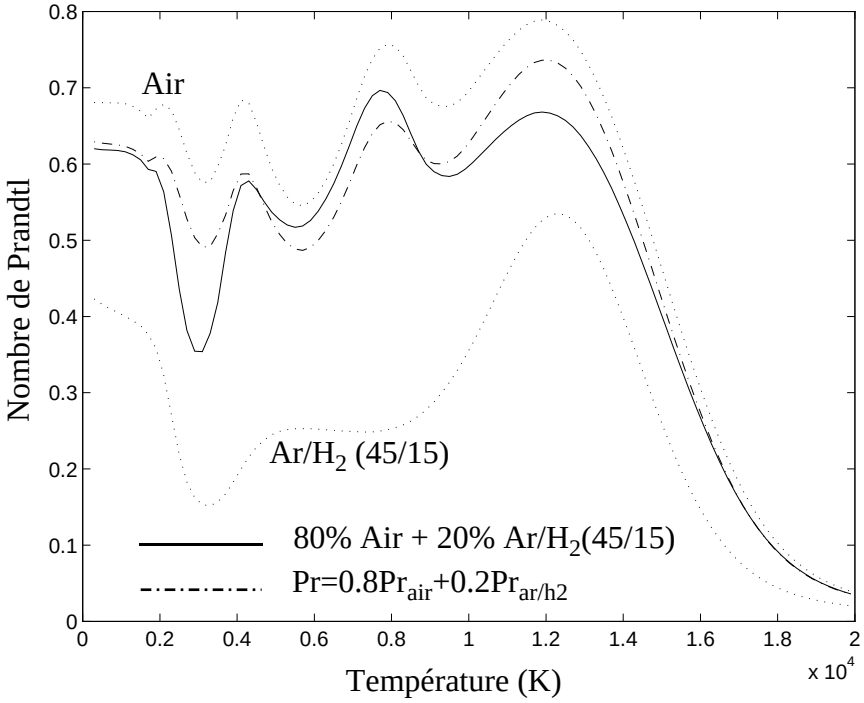


Figure 1 *: Evolution du nombre de Prandtl de l'air, du mélange Ar/H2 (45/15) et du mélange constitué de 80% d'air et 20% d'Ar/H2 (45/15).*

3.2. Résultats numériques

A partir des résultats obtenus avec des extensions à bas Reynolds au modèle *k-ε* standard, nous montrons dans un premier temps l'importance du traitement de la couche limite pour la prédiction des échanges thermiques dans la zone d'impact du jet. Dans un second temps, nous proposons d'utiliser une extension à 2 couches au modèle *k-ε* de Chen & Kim de manière à comparer les prédictions des flux thermiques en fonction de la forme initiale du modèle *k-ε*.

3.2.1. Résultats obtenus avec les extensions au modèle *k-ε* standard

Nous présentons ici les résultats obtenus suivant deux extensions au modèle *k-ε* standard :

- Extension de Lam-Bremhorst + terme source de Yap
- Extension à deux couches

Nous reprenons les paramètres opératoires pour lesquels Chambon [5] a réalisé des mesures du flux transmis. Si l'on reprend le cas de référence du Chapitre 2 (torche de 7 mm de diamètre, Ar/H2-45/15, 600A sous air), nous pouvons comparer les prédictions des flux thermiques avec les mesures. Chambon ayant fourni des résultats pour une distance torche/calorimètre de 80 mm, nous considérerons dans un premier temps ce cas test. En supposant que le calorimètre est parfaitement refroidi, sa surface est alors maintenue à une température de 300 K.

La Figure 2 présente le champ de température calculé en utilisant l'extension à bas Reynolds de Lam & Bremhorst au modèle *k-ε* standard et en ajoutant le terme correctif proposé par Yap. Le champ de températureobtenu est identique si le modèle à deux couches est utilisé, ce qui indique que l'utilisation du modèle à bas Reynolds de Lam-Bremhorst n'influence pas le cœur du jet même si l'énergie cinétique de turbulence y est nulle à l'axe. Le resserrement des isothermes dans la zone du cœur du jet dénote la présence de forts gradients thermiques dans cette région.

La Figure 3 présente le raffinement du maillage au voisinage de la surface du calorimètre. Pour obtenir une bonne prédiction des échanges thermiques, il est nécessaire d'avoir un raffinement très important dans la couche limite près de la surface. Dans le cas présent, pas moins de 20 cellules sont distribuées dans une zone de 3 mm près du solide. Sur ces 20 cellules, 11 sont situées dans les 500 µm les plus proches de la surface. Dans tous les cas, 20 cellules sont toujours incluses dans une zone allantde 2 à 4 mm (suivant la distance de la torche par rapport au point d'impact du jet).

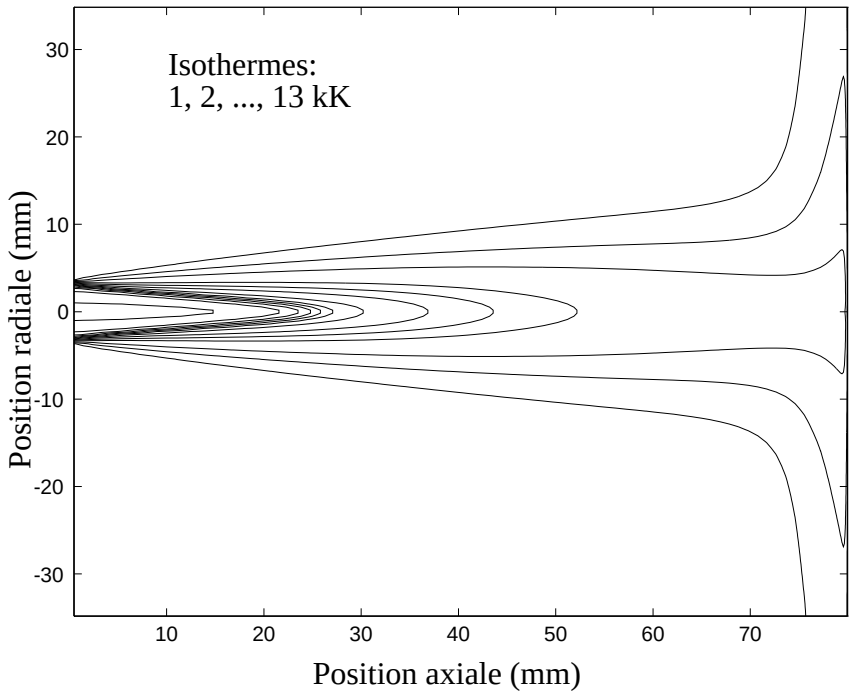


Figure 2 : *Champ de température calculé avec l'extension de Lam & Bremhorst au modèle k–ε standard et le terme source de Yap pour Prt=Sct=0.9.*

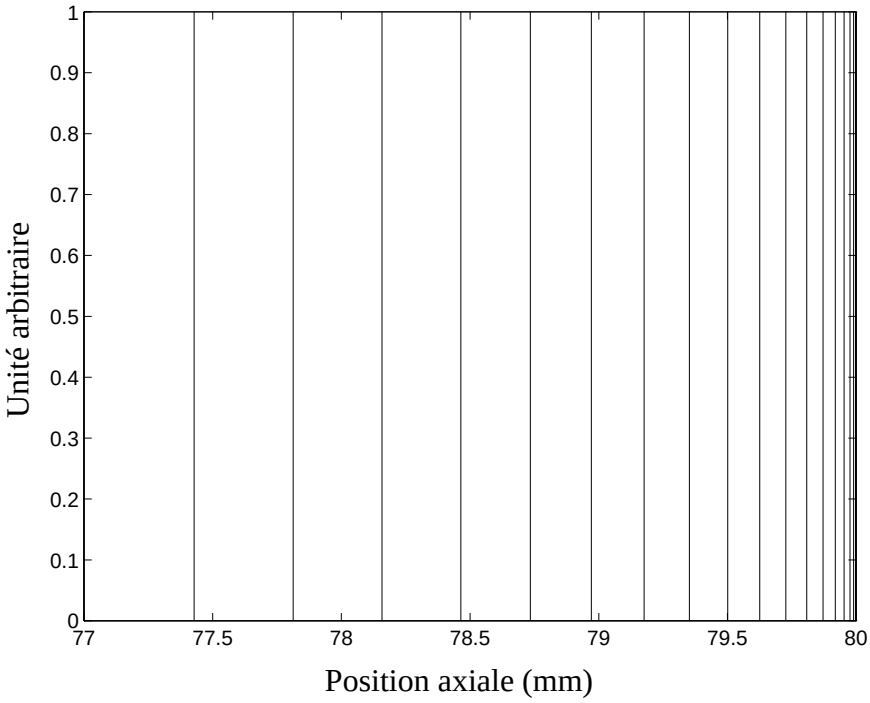


Figure 3 : *Raffinement du maillage au voisinage de la surface.*

La Figure 4 présente les profils de température calculés dans la couche limite pour différentes positions radiales. Le gradient thermique est encore plus important près de la surface qu'aux frontières du jet près de la sortie de la torche. En effet, la température passe de 3000 K à 300 K dans la couche limite d'épaisseur environ 300 μm, ce qui correspond donc à un gradient de l'ordre de 10 kK/mm. On remarque également que si la température est effectivement maximale à l'axe (r=0) en dehors de la couche limite, ceci n'est plus vrai lorsque l'on s'approche de la surface. Nous expliquons ce phénomène (qui s'observe également si une extension à 2 couches est utilisée), par le fait qu'au point d'impact, les deux composantes de la vitesse sont nulles, si bien que les termes de convection le sont également.

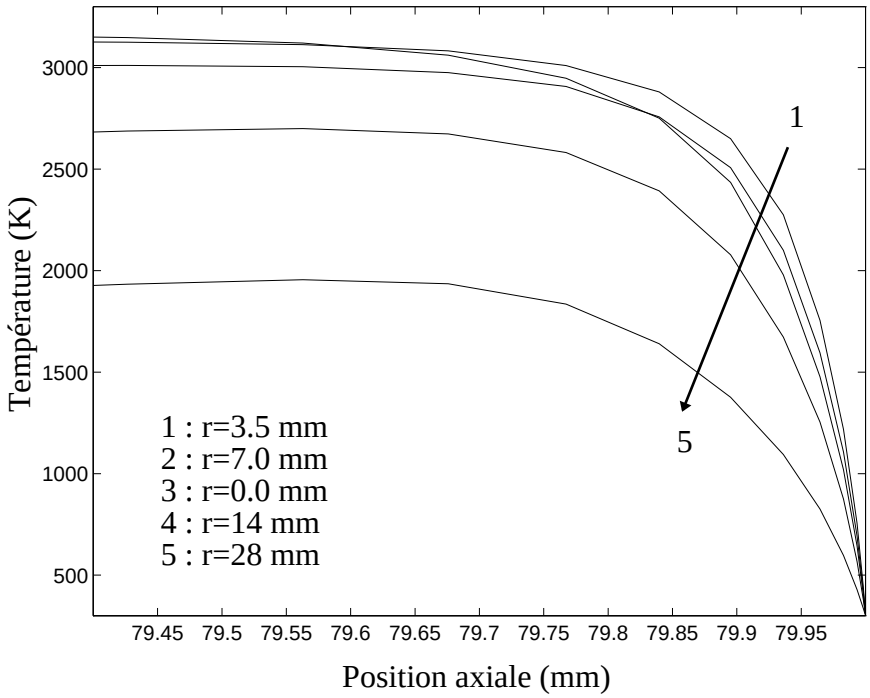


Figure 4 : *Profils axiaux de température au voisinage du solide pour différentes positions radiales (Lam-Bremhorst + Yap avec Prt=Sct=0.9).*

La Figure 5 présente le profil radial du flux thermique calculé en utilisant l'extension à bas Reynolds de Lam & Bremhorst au modèle k-ε standard et l'extension à deux couches à ce même modèle. On remarque que les échanges thermiques prédits par ces deux modèles sont très proches l'un de l'autre et que le flux thermique au voisinage de l'axe est de l'ordre de 3 $MW.m^{-2}$. Cette valeur est à comparer à la valeur de 5,34 $MW.m^{-2}$ estimée par utilisation de la formulation empirique de Monerie-Moulin [6] avec ces paramètres. Ainsi, il semble que l'utilisation de ces deux modèles mène à une sous-estimation du flux thermique de l'ordre de 40% dans ce cas (les mesures de Chambon indiquant un flux encore supérieur à celui calculé suivant la formulation de Monerie-Moulin). Du fait de l'obtention de résultats similaires avec les deux modèles, nous suggérons que la sous-estimation du flux n'est pas due à un mauvais traitement de la couche limite, mais à la tendance du modèle k-ε standard à surestimer l'expansion du jet et à anticiper la décroissance axiale de la vitesse et de la température. Nous observons également que le flux thermique prédit n'est pas maximal à l'axe. En effet, de par l'absence des termes de convection, le mécanisme d'échange est purement “conductif” au niveau du point d'impact. Il ne s'agit absolument pas d'un problème numérique dans la mesure où, dans le cas d'un modèle qui ne maintient pas l'échelle de longueur du modèle à sa valeur d'équilibre, le flux maximal se situe bien au point d'impact. Par contre, dès que le terme de Yap ou un modèle à deux couches est utilisé, le phénomène de décalage du point de flux maximal est observé.

Nous venons de vérifier que ces deux modèles fournissent des résultats quasi-similaires concernant la prédiction des échanges thermiques. Néanmoins, il est nécessaire de préciser que d'autres modèles mènent à des résultats différents.

La Figure 6 présente une comparaison du profil axial de l'échelle de longueur suivant si le terme de Yap est utilisé ou non avec le modèle de Lam-Bremhorst. L'utilisation du modèle de Lam-Bremhorst sans le terme correctif de Yap ne permet pas de maintenir l'échelle de longueur au voisinage de sa valeur d'équilibre (proportionnalité de l'échelle de longueur à la distance à la paroi), ce qui entraîne une surestimation pouvant être très large des échanges thermiques pour ce modèle.

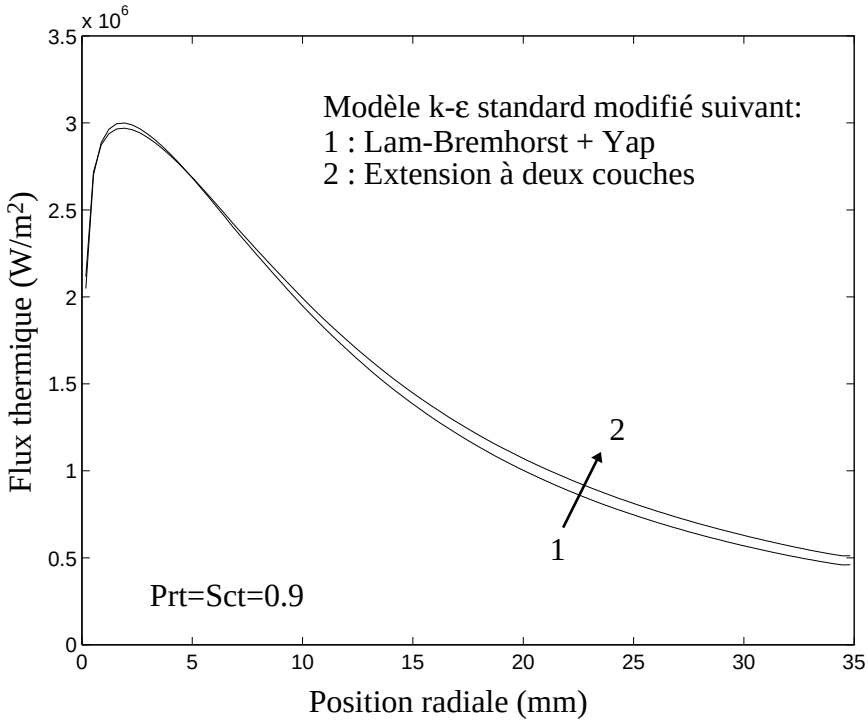


Figure 5 : *Flux thermiques calculés par utilisation de l'extension à bas Reynolds de Lam & Bremhorst au modèle k-ε standard (+Yap) et par utilisation de l'extension à deux couches à ce même modèle (Prt=Sct=0.9 ; d=80mm).*

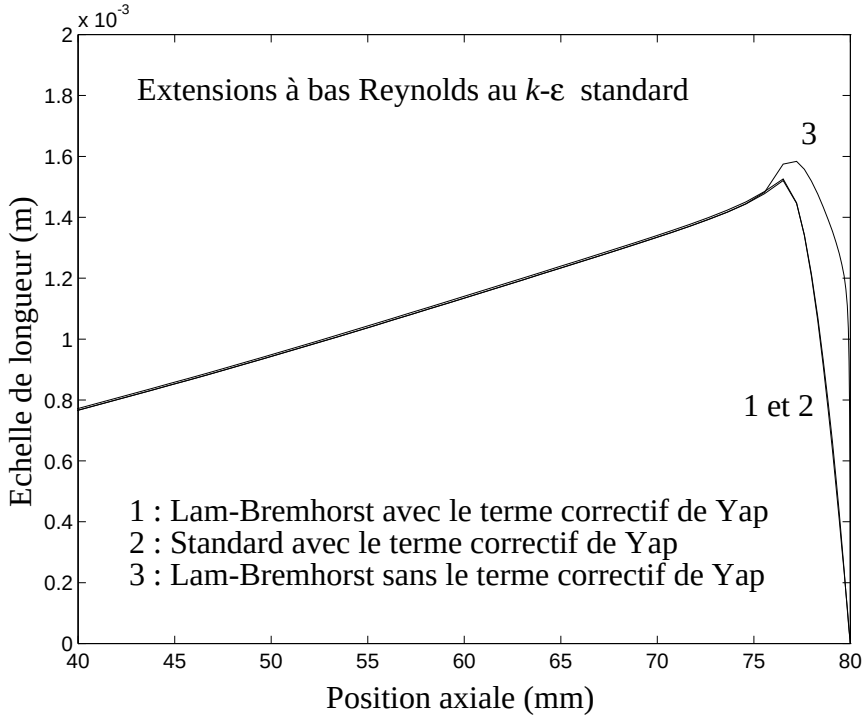


Figure 6 : *Profils axiaux de l'échelle de longueur calculés avec et sans le terme correctif de Yap.*

Cette surestimation de l'échelle de longueur au voisinage de la paroi provient de la sous-estimation de ε liée à l'absence du terme de Yap. Celle-ci a pour effet de provoquer une surestimation non seulement de l'échelle de longueur mais aussi et surtout de la viscosité turbulente dans la sous couche visqueuse. La Figure 7 présente le profil axial calculé avec ou sans le terme correctif de

Yap, de la viscosité cinématique turbulente ainsi que celui de la viscosité cinématique laminaire. Deux remarques peuvent être dégagées de ces évolutions. Premièrement, du fait de l'utilisation d'une énergie cinétique de turbulence nulle à l'axe du jet en sortie de torche, la viscosité laminaire domine la viscosité turbulente dans la zone du cœur du jet. Par contre, dès que la turbulence rejoint l'axe du jet, son effet devient rapidement prédominant au niveau de la viscosité totale. Deuxièmement, une évolution très différente de la viscosité cinématique turbulente est observée à la paroi suivant l'utilisation ou non du terme correctif de Yap. Ainsi, si le terme correctif de Yap n'est pas utilisé, la viscosité turbulente est largement supérieure au voisinage de la surface.

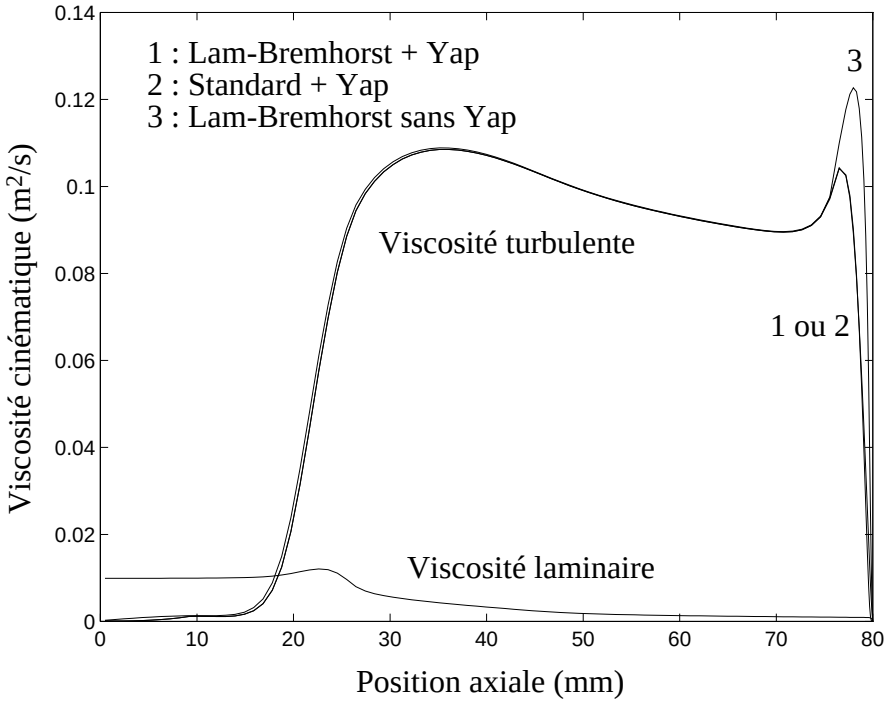


Figure 7 : *Profils axiaux de la viscosité cinématique calculés avec ou sans utilisation du terme correctif de Yap.*

La Figure 8 présente un zoom de la Figure 7 dans la couche limite près du solide. On observe cette fois nettement la différence entre les courbes 1 et 2 qui correspondent à l'utilisation du terme correctif de Yap couplé tour à tour au modèle standard et au modèle de Lam-Bremhorst. Comme nous l'avons déjà dit, dans le cas du modèle de Lam & Bremhorst, les fonctions f_1 et f_2 n'ont plus d'influence dès que le terme correctif de Yap est utilisé, la différence entre les courbes 1 et 2 s'explique donc entièrement par l'effet de la fonction f_μ qui provoque une diminution de la viscosité turbulente. Pour le modèle de Lam-Bremhorst, si le terme de Yap est inclus, la viscosité laminaire prédomine la viscosité turbulente sur une zone de 200 µm près de la surface. Si la fonction f_μ n'est pas utilisée (modèle standard + Yap), la zone sur laquelle la viscosité laminaire excède la viscosité turbulente est alors réduite à 5 µm seulement. Là aussi, une surestimation des échanges thermiques est obtenue, indiquant que le terme de Yap n'est pas suffisant pour obtenir des échanges thermiques corrects mais qu'il doit être couplé à l'utilisation d'un modèle à bas Reynolds faisant usage d'une fonction f_μ.

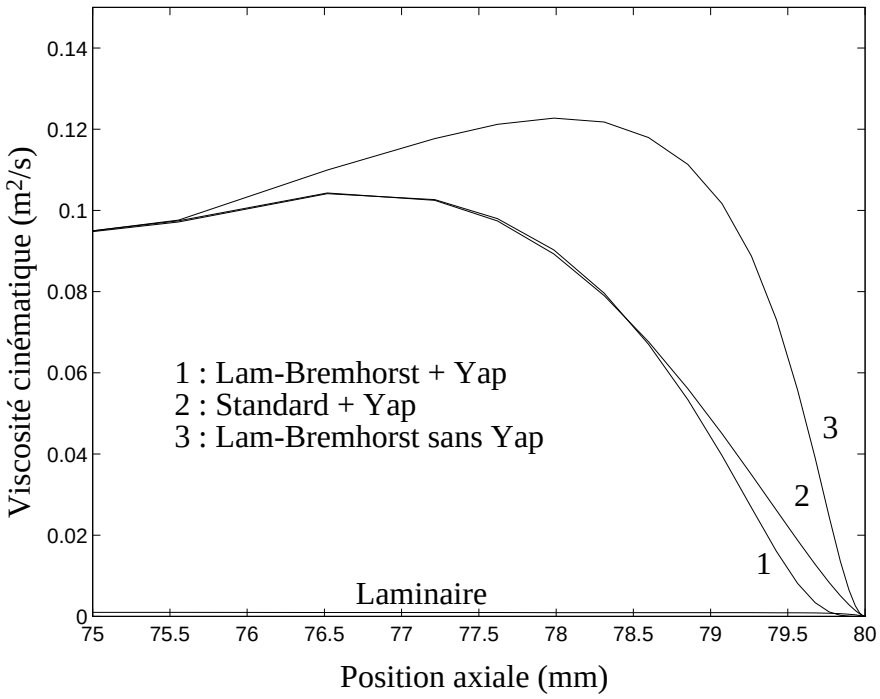


Figure 8 : *Zoom de l'évolution de la viscosité cinématique dans la sous-couche visqueuse suivant le modèle de turbulence considéré.*

Bien qu'aucun résultat obtenu avec le modèle standard sans le terme de Yap ne soit présenté ici, nous pouvons affirmer qu'un tel modèle est inapte à décrire la sous-couche visqueuse dans la mesure où il cumule les défauts des deux cas que nous venons d'illustrer. En effet, il mène d'abord à une surestimation de l'échelle de longueur au voisinage de la paroi et surestime ensuite la viscosité turbulente en omettant la fonction f_μ. En réalité, il provoque une surestimation très large des échanges thermiques si le raffinement du maillage est conservé et une sous-estimation importante si le maillage est construit de manière à rester dans la gamme de validité des fonctions de paroi. Il est également clair qu'entre ces deux cas, tous les cas intermédiaires peuvent être envisagés. Néanmoins, les prédictions obtenues restent toujours sensibles à tout changement du raffinement du maillage, ce qui n'est pas admissible.

Conclusion

Nous venons de constater l'importance du soin à apporter au choix d'un modèle de turbulence si l'on souhaite s'intéresser aux échanges thermiques dans le cas d'un jet de plasma impactant sur une surface. Finalement, le modèle utilisé doit permettre deux choses : premièrement maintenir un profil réaliste de l'échelle de longueur dans la couche limite, et deuxièmement utiliser une fonction f_μ permettant de diminuer l'influence de la viscosité turbulente au voisinage de la paroi. A l'heure actuelle, seules deux méthodes semblent être correctes : premièrement, l'utilisation d'un modèle à 2 couches et deuxièmement l'utilisation d'un modèle de turbulence à bas Reynolds couplée à l'emploi du terme correctif de Yap. Concernant les résultats numériques, nous avons pu observer que le

couplage de ces deux méthodes au modèle *k-ε* standard mène néanmoins à une sous-estimation des échanges thermiques que nous attribuons à la tendance du modèle à surestimer l'expansion du jet. A partir de ces considérations, il reste encore à tester l'utilisation d'une extension au modèle de Chen & Kim de manière à vérifier si ce modèle (qui ne surestime pas l'expansion du jet) permet d'obtenir de meilleures prédictions des échanges thermiques.

3.2.2. Modèle *k-ε* de Chen & Kim

Pour ce modèle, le terme source supplémentaire (proportionnel à C_3) ajouté à l'équation de ε a tendance à agir dans le même sens que le terme de Yap ajouté au modèle standard. Néanmoins, en testant l'utilisation de l'extension de Lam & Bremhorst au modèle de Chen & Kim, nous avons vérifié que ce modèle conduit toujours à une surestimation de l'échelle de longueur au voisinage de la surface. Par conséquent, ce terme additionnel n'est pas susceptible de remplacer le terme correctif de Yap. Nous avons donc choisi d'implémenter une extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim du même type que celle proposée pour le *k-ε* standard puisque d'une part les valeurs de C_1 et C_2 n'interviennent pas dans la sous-couche visqueuse (ε étant fixé) et d'autre part les 2 modèles utilisent la même valeur de C_μ. Pour traiter les termes sources sur les grandeurs de turbulence, la méthode de linéarisation indiquée lors de la présentation de l'extension à 2 couches au modèle *k-ε* standard a été conservée. Toutefois, concernant le critère de transition (passage d'un modèle à deux équations à un modèle à une équation dans la couche limite), nous avons apporté une modification que nous appliquons maintenant également au modèle *k-ε* standard. Nous avons considéré que le critère $R_k < 350$ est nécessaire mais pas suffisant pour entraîner le passage au modèle à une équation. La raison de cette modification est la suivante : nous avons vérifié qu'aussi bien pour le modèle standard que pour le modèle de Chen et Kim, le critère $R_k < 350$ utilisé seul est susceptible de provoquer une discontinuité au niveau de l'échelle de longueur et de ε lorsque la distance torche/substrat est diminuée en deçà d'une certaine limite. Si tel est le cas, le critère $R_k < 350$ est satisfait à une distance de la paroi telle que κn dépasse plus ou moins largement l'échelle de longueur du jet. Sachant que le principe des modèles à deux couches est de remplacer l'échelle de longueur du jet par κn dans le but d'en **diminuer** la valeur, il y a là une incompatibilité. Dans le but de supprimer cette incompatibilité (et de pouvoir considérer des cas où la distance torche/substrat est faible), nous nous assurons que le remplacement de l'échelle de longueur par κn provoque bien une diminution de celle-ci. En conséquence de quoi le critère

$$(\kappa n)_{iz} < \left(C_\mu^{3/4} \frac{k^{1.5}}{\varepsilon} \right)_{iz-1}$$

est utilisé comme critère supplémentaire à $R_k < 350$.

(iz désignant le numéro de la cellule suivant la direction de l'axe du jet).

Concernant le terme additionnel proportionnel à C_3, il a quant à lui été inclus sans aucune linéarisation et n'a plus d'influence dès que le modèle à une équation est utilisé. Nous avons bien sur vérifié que, dans le cas du modèle standard, notre programmation permettait d'obtenir des résultats strictement équivalents à ceux obtenus lors de l'utilisation de l'extension à 2 couches implémentée

dans PHOENICS™. La Figure 9 présente le champ de températures obtenu par utilisation de l'extension à deux couches au modèle de Chen & Kim. Bien qu'un nombre de Prandtl turbulent de 0.7 ait été utilisé ici, on note tout de même un allongement de chacune des isothermes relativement à celles obtenues avec le modèle standard avec Prt=Sct=0.9 (Figure 2).

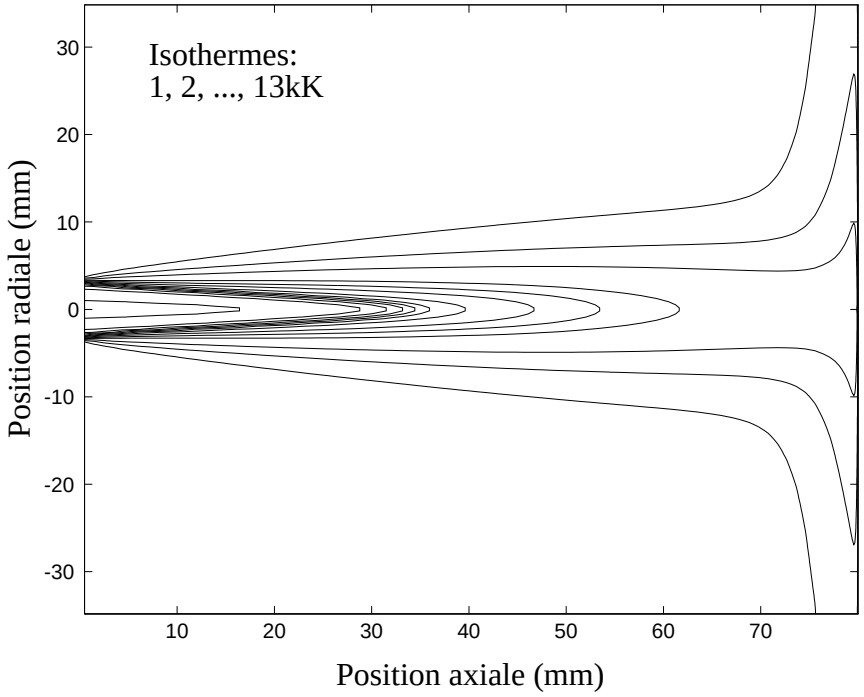


Figure 9 : *Champ de température calculé par utilisation de l'extension à 2 couches au modèle k-ε de Chen & Kim (Prt=Sct=0.7).*

La Figure 10 présente les profils radiaux de température pour différentes positions axiales. On note que les profils ne sont pas gaussiens même dans la zone développée. En effet, si les profils radiaux d'enthalpie calculés peuvent effectivement être approximés par des profils gaussiens, les profils de températures sont eux affectés par les variations de la chaleur spécifique. On observe ainsi à nouveau l'effet du “pompage” de l'énergie par l'air ambiant. On remarque également que le profil de température situé à 3.5 mm de l'obstacle est affecté par sa présence dans la mesure où il présente une décroissance radiale beaucoup plus faible que les autres.

La Figure 11 présente les lignes de courant dans le jet de plasma calculées avec le modèle de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7. L'obstacle ne dévie les lignes de courant du jet libre que sur une zone restreinte. Si les lignes de courant partant du gaz environnant ne parviennent pas jusqu'à l'obstacle, on remarque que celles provenant du cœur du jet viennent comme s'écraser sur le solide. La direction privilégiée initiale du jet est complètement inversée de par la présence de l'obstacle : on passe d'un jet à un écoulement sur une plaque plane.

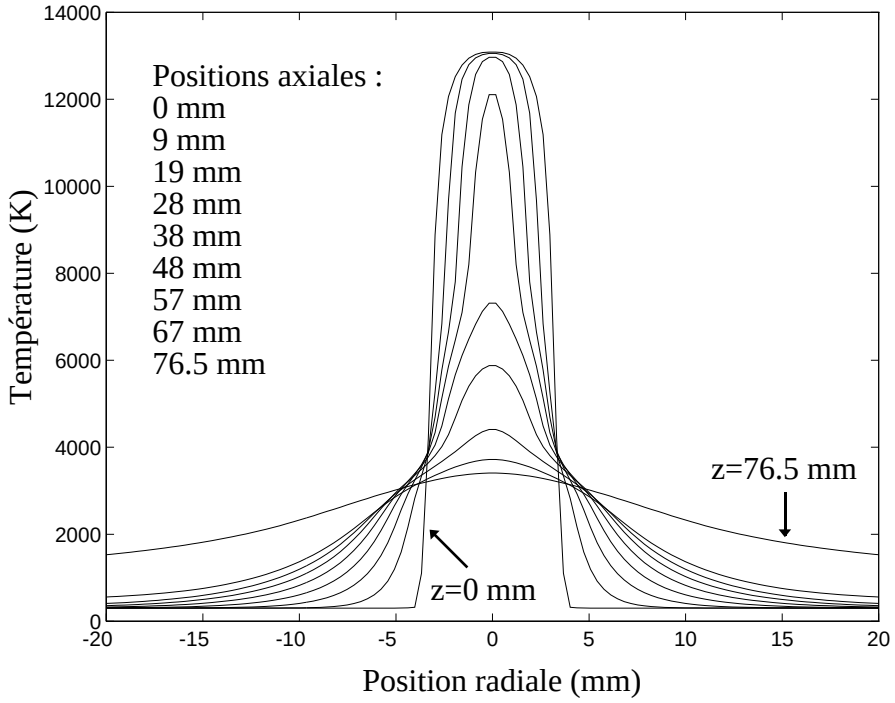


Figure 10 : *Profils radiaux de température calculés à différentes positions axiales avec l'extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim (Prt=Sct=0.7).*

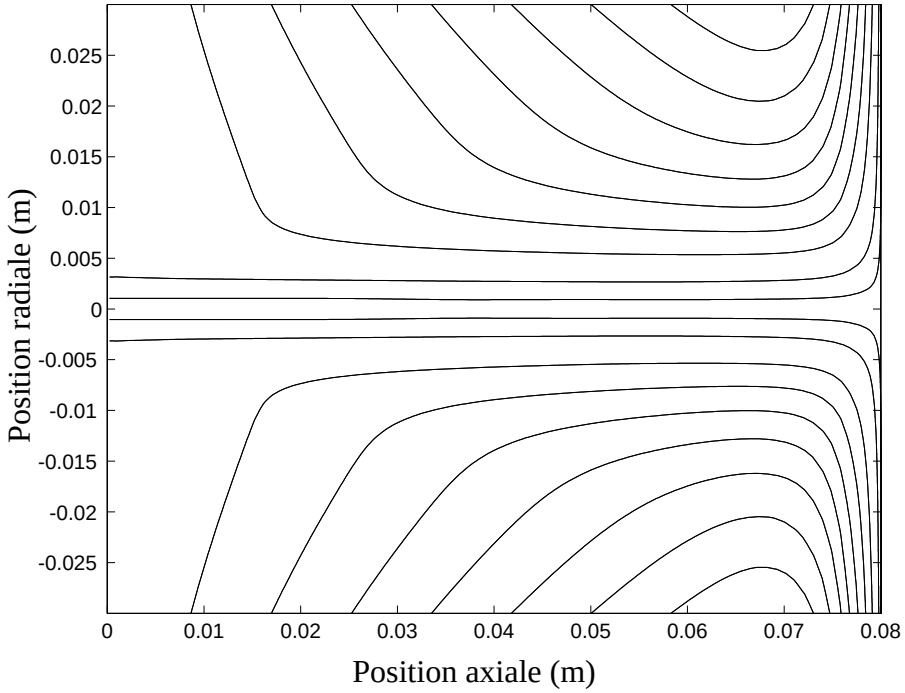


Figure 11 : *Lignes de courant calculées suivant l'extension à deux couches au modèle de Chen & Kim (Prt=Sct=0.7).*

La Figure 12 présente les vecteurs vitesse du jet de plasma calculés avec l'extension à deux couches au modèle de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7. La représentation des lignes de courant ne fournit pas d'information sur la vitesse mais uniquement sur la direction de l'écoulement. Au contraire, la représentation des vecteurs vitesse est beaucoup plus explicite à ce niveau dans la mesure où les

deux informations peuvent être visualisées. On note la présence de profils de type gaussiens dans la zone développée et un brusque changement de direction dans la zone du solide.

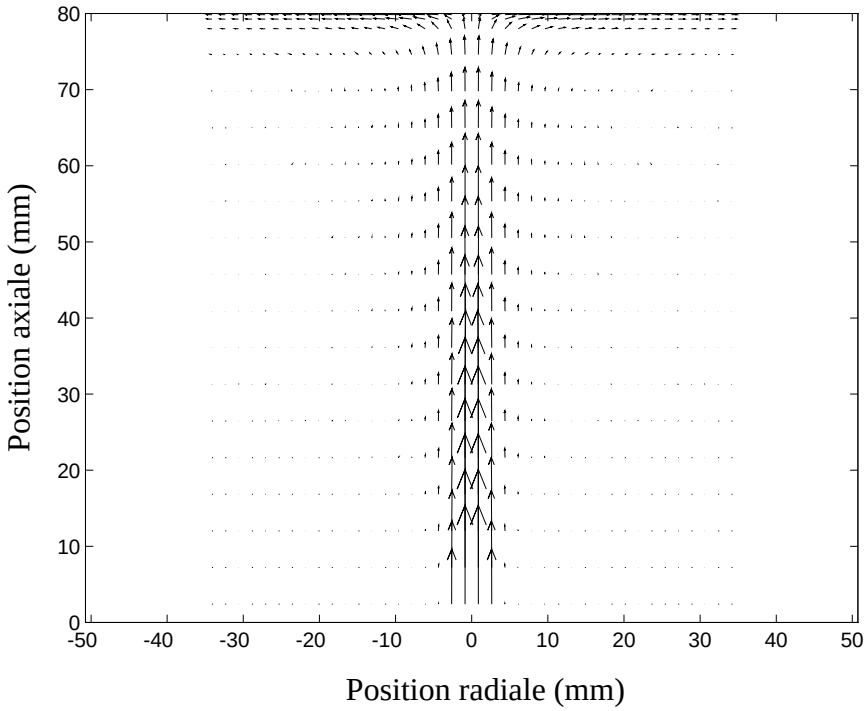


Figure 12 : *Vecteurs vitesse calculés suivant l'extension à deux couches au modèle de Chen & Kim (Prt=Sct=0.7).*

La Figure 13 présente une comparaison entre les échanges thermiques prédits par l'extension à 2 couches au modèle standard avec Prt=Sct=0.9 et par l'extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7 et Prt=Sct=0.9. Sachant que d'après la formulation empirique de Monerie-Moulin [6], le flux thermique à l'axe est d'environ 5.34 MW/m^2, il est évident que l'extension à deux couches au modèle de Chen & Kim fournit, dans ce cas, un meilleur accord que l'extension à 2 couches au modèle standard. L'ordre de grandeur du flux transmis à l'axe est également confirmé par Chambon [5] qui a déterminé une valeur maximale du flux à l'axe d'environ 6.3 MW/m^2 pour les paramètres considérés ici. On note que, dans ce cas, l'utilisation de nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents de 0.7 et 0.9 encadre approximativement les résultats obtenus par la formulation empirique et ceux mesurés par Chambon. En revanche, quel que soit le cas que nous ayons traité, nous avons toujours observé que l'utilisation de l'extension à deux couches au modèle standard ou du modèle de Lam-Bremhorst en y ajoutant le terme correctif de Yap menait à une sous-estimation du flux dans la zone du point d'impact. Les résultats présentés lors d'une première étude réalisée avec le k-ε standard [3] sont d'ailleurs en accord avec cette remarque.

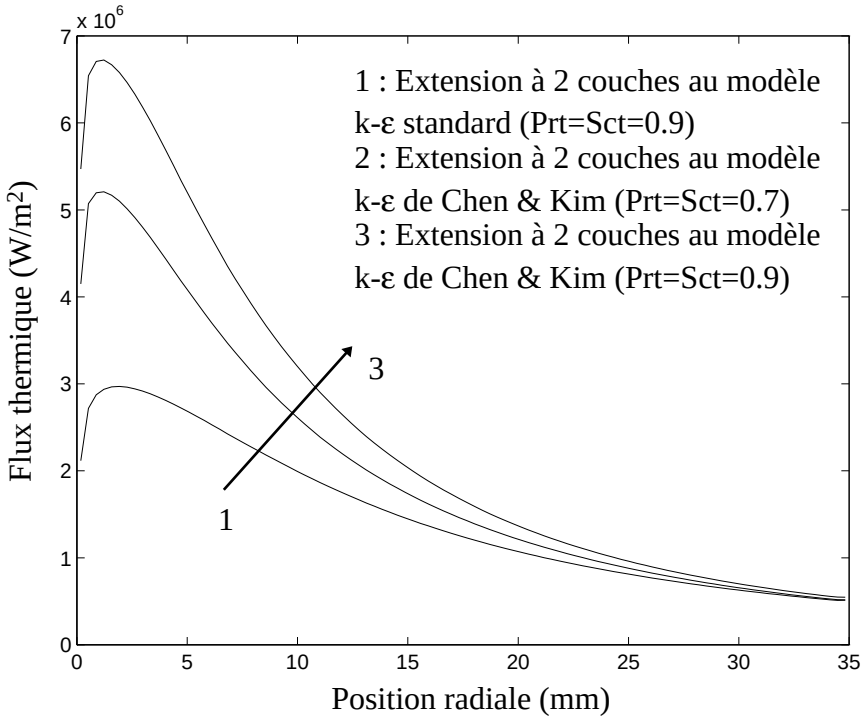


Figure 13 : *Flux thermiques calculés par utilisation de l'extension à deux couches au modèle standard et au modèle de Chen & Kim*

3.2.3. Profils radiaux du flux thermique transmis

Dans la partie précédente, nous avons essentiellement discuté la valeur du flux thermique transmis dans la zone du point d'impact. Il est également souhaitable de s'intéresser à la forme des profils radiaux du flux dont dépend grandement le flux global transmis. Pour un rayon variant de 5 mm à 30 mm (la zone centrale n'étant pas concernée), nous avions observé [3] que les profils radiaux calculés se rapprochaient beaucoup plus d'une forme exponentielle décroissante

$$\phi(r) = \phi_0 \exp\left(-\frac{r}{R}\right)$$

que d'une forme gaussienne.

Nous avions ainsi supposé une décroissance exponentielle pour r>30mm, ce qui nous avait permis d'estimer le flux thermique moyen transmis à une surface de rayon r quelconque par simple intégration.

Ainsi

$$F_a^b = 2\pi\phi_0 \int_a^b r \ \exp(-r/R)\ dr = -2\pi\phi_0 \left[R(R+r)\exp(-r/R)\right]_a^b$$

où F_a^b est le flux transmis à un anneau de rayon interne *a* et de rayon externe *b*.

La Figure 14 présente les résultats obtenus en procédant de la sorte si l'extension à 2 couches au modèle standard est utilisée avec des nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents de 0.9. Les valeurs de ϕ_o et de R sont déterminées à partir d'une régression linéaire de $\ln(\phi(r)) = f(r)$. Ici, les points situés au voisinage de l'axe ne pouvant être interpolés par une exponentielle, ils n'ont pas été

pris en compte pour le calcul de la régression. On peut préciser qu'une telle approximation est obtenue avec Matlab en 3 commandes placées sur une même ligne.

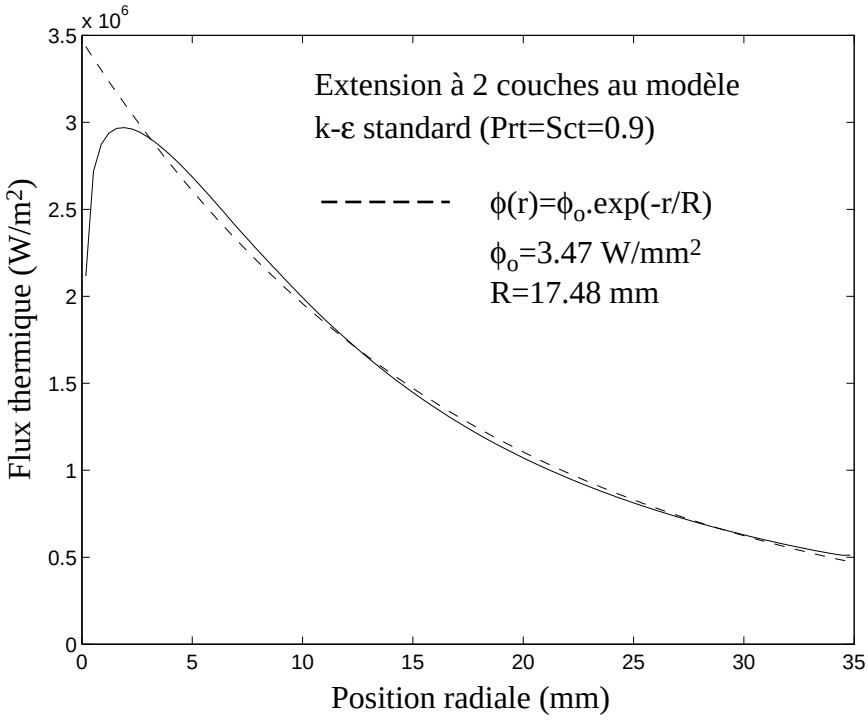


Figure 14 : *Courbe exponentielle décroissante permettant d'approcher le profil radial du flux si l'extension à 2 couches au modèle k-ε standard est utilisée.*

Avec

$$F_0^b = 2\pi\phi_0\left[R^2 - R(R+b)\exp(-b/R)\right],$$

on obtient rapidement le flux thermique transmis à des surfaces (disques) de rayons différents. Ainsi, pour des rayons de 20, 30 et 40 mm, il vient 2.1, 3.4 et 4.4 kW respectivement pour le cas de la Figure 14. Le flux qui serait alors transmis à une surface de dimension infinie serait égal à $2\pi\phi_0 R^2 = 6.7$ kW. Malheureusement la vérification de l'hypothèse de décroissance exponentielle s'est avérée incorrecte pour des rayons supérieurs, conduisant à une sous-estimation progressive du flux quand r augmente. La Figure 15 montre les profils radiaux du flux obtenus sur une distance plus importante. Les résultats présentés sont ceux obtenus avec l'extension à 2 couches au modèle standard avec Prt=Sct=0.9 et l'extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7. Bien que les 2 modèles donnent des résultats significativement différents au voisinage du point d'impact (Figure 13), la différence entre les 2 profils radiaux calculés devient très faible lorsqu'on s'éloigne de celui-ci. Sur la figure sont également représentés le profil exponentiel précédent ainsi que deux autres profils obtenus par des expressions différentes. Pour des rayons compris entre 50 et 150 mm, nous avons ainsi obtenu une meilleure approximation en utilisant des profils en $c.r^{-n}$. Pour de tels profils, les valeurs de c et n ont été déterminées en réalisant une régression linéaire du logarithme du flux en fonction du logarithme du rayon sur la zone concernée. Pour le modèle standard, on a ainsi $c=6.955.10^8$ et n=2.037, alors que pour le modèle de Chen & Kim on a

c=5.558.10^8 et n=1.995. Par conséquent, entre 50 et 150 mm, une décroissance du flux en r^{-2} est approximativement observée pour les résultats numériques.

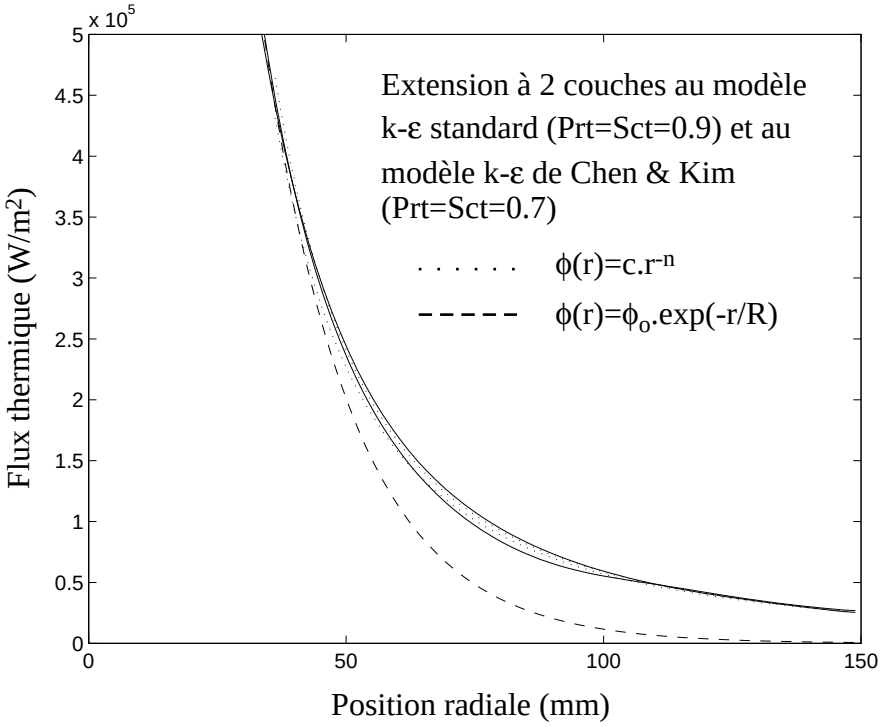


Figure 15 : *Profils radiaux des flux calculés pour des distances radiales supérieures.*

Le cas présenté sur la Figure 15 correspond à des conditions équivalentes à celles utilisées par Chambon qui a réalisé son étude avec un calorimètre externe de diamètre 300 mm. Nous avons vu que l'hypothèse d'un profil exponentiel décroissant menait à un flux total transmis de l'ordre de 6.7 kW pour l'extension à 2 couches au modèle standard, la part de ce flux transmis à l'intérieur d'un rayon de 150 mm étant de 99.8%. Toutefois, la décroissance calculée étant moins rapide que celle supposée par l'exponentielle décroissante, le flux total calculé transmis à l'intérieur d'une zone de rayon 150 mm est de 9250 W pour l'extension à 2 couches au modèle standard avec Prt=Sct=0.9 et de 9810W pour l'extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7. Il est donc intéressant de noter que bien que les flux prédits au voisinage du point d'impact soient relativement différents pour les 2 modèles, la valeur du flux transmis à une surface de rayon 150 mm est quant à elle très proche. La puissance utile de la torche étant ici de 27kW, le flux transmis à l'intérieur du rayon de 150 mm est donc de l'ordre de 35% de cette puissance utile. Si Chambon n'a pas fourni les valeurs mesurées pour un environnement d'air avec de telles conditions, il donne cependant un flux transmis d'environ 13kW pour un environnement d'argon et indique que les échanges sont plus faibles pour un environnement d'air, ce qui est donc en accord avec nos résultats.

3.2.4. Influence de la distance axiale jet/substrat

Nous avons vérifié que l'utilisation de l'extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim mène à de meilleurs résultats concernant l'ordre de grandeur du flux thermique dans la zone du point d'impact du jet de plasma (relativement à l'utilisation du modèle *k-ε* standard). Jusqu'à présent, nous nous

sommes contentés de considérer le cas d'une distance torche/calorimètre (ou torche/substrat) de 80 mm de manière à pouvoir comparer nos résultats non seulement à l'utilisation de la formulation empirique de Monerie-Moulin [6] mais aussi aux mesures de Chambon [5]. Dans cette partie, l'influence de la distance torche/calorimètre sur la prédiction des flux thermiques est donc présentée et seuls les résultats obtenus avec le modèle de Chen & Kim sont pris en compte. Les conditions sont également conservées (torche de diamètre 7mm avec des débits d'argon et d'hydrogène de 45 et 15 Nl/min et une puissance utile de 27 kW). La Figure 16 présente les flux thermiques prédits pour des positions du calorimètre de 60 et 80 mm. Cette figure confirme que non seulement, la valeur des nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents n'a d'importance qu'au voisinage du point d'impact mais semble indiquer également qu'il en est de même pour l'influence de la distance jet/calorimètre (ou jet/substrat). En effet, à partir d'un écartement radial de 25 mm, les flux thermiques prédits sont quasiment identiques pour les 2 distances.

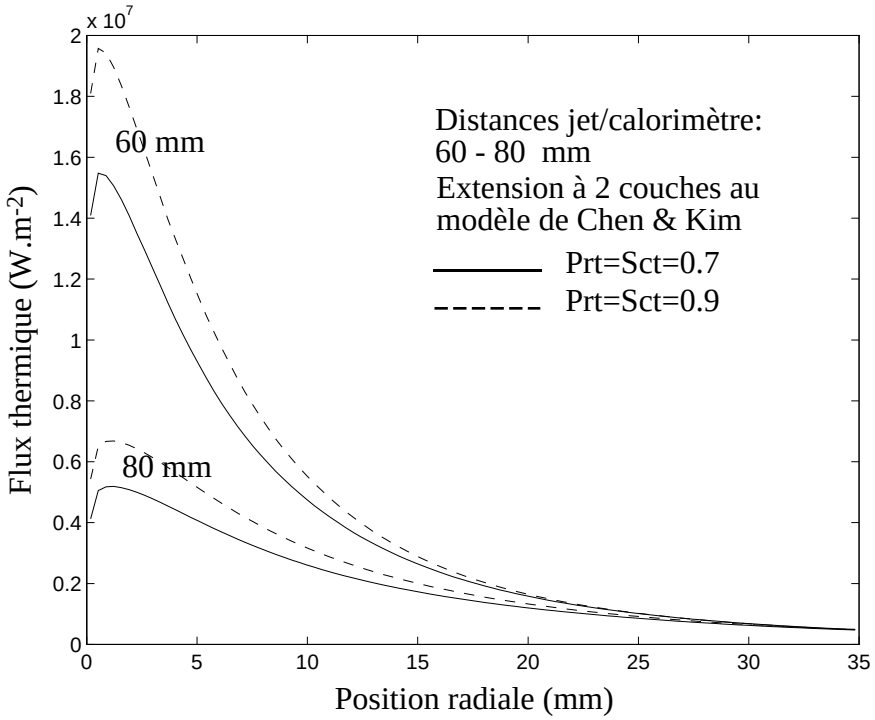


Figure 16 : *Flux thermiques prédits par utilisation de l'extension à 2 couches au modèle k-ε de Chen & Kim pour des positions axiales de 60 et 80 mm.*

La Figure 17 présente l'influence d'un allongement de la distance jet/calorimètre par rapport à la distance initiale de 80 mm. On remarque que la tendance de la diminution de l'influence de la distance jet/calorimètre quand l'écartement radial augmente est confirmée.

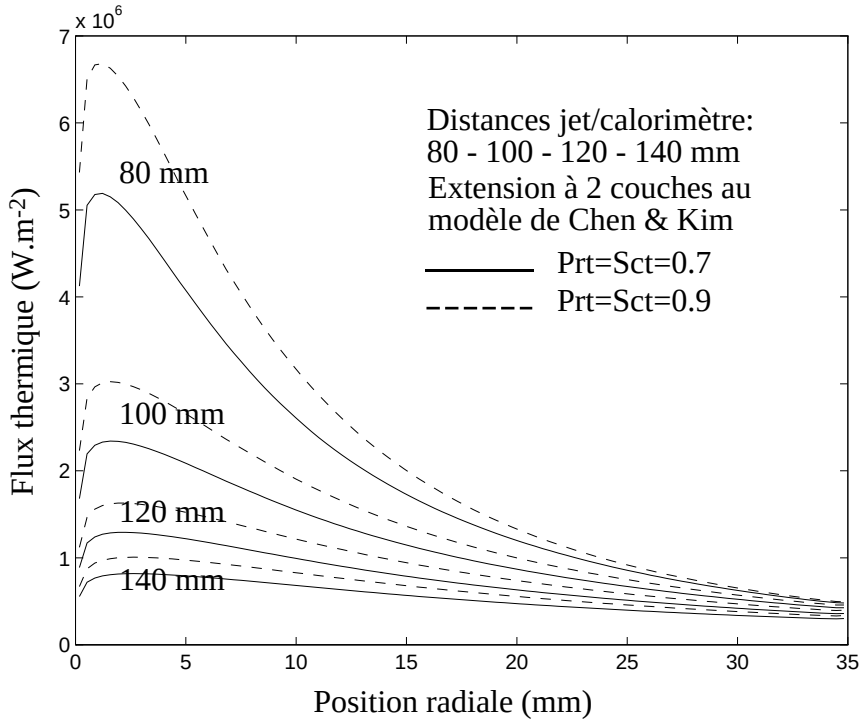


Figure 17 : *Influence de l'allongement de la distance jet/calorimètre sur le flux thermique transmis*

D'après les deux Figures précédentes, l'influence de la distance axiale du calorimètre sur la valeur du flux diminue quand l'écartement radial par rapport à l'axe augmente. Pour mieux visualiser ce phénomène, nous avons représenté sur Figure 18, le flux thermique pour des positions radiales allant de 0 à 150 mm.

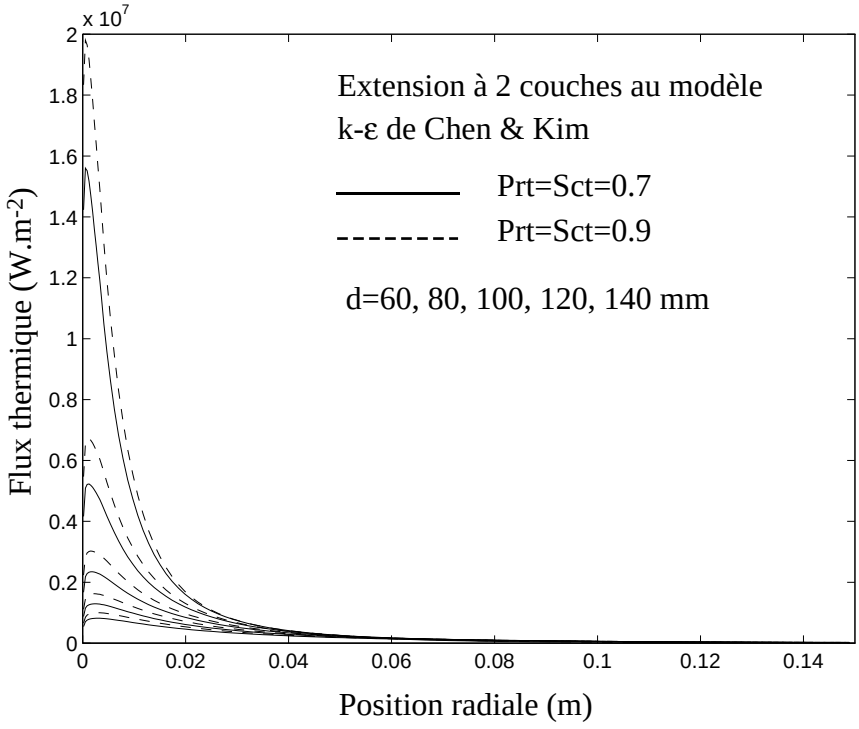


Figure 18 : *Flux thermiques prédits sur un domaine plus large par utilisation de l'extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim.*

Afin de mieux observer l'influence de la position axiale du calorimètre sur les profils radiaux, nous avons restreint l'échelle des ordonnées à des flux inférieurs à 0.5 $MW.m^{-2}$, la Figure 19 reprend les résultats de la Figure 18. On voit nettement que l'influence de la position axiale du calorimètre sur le flux thermique transmis devient moindre quand r augmente (à un tel point qu'il n'est plus forcément le plus important pour la plus faible position axiale). A partir de ces remarques, il est clair que l'influence de la distance axiale sur le flux thermique transmis varie essentiellement au voisinage de l'axe (c'est à dire pour r inférieur à 50 mm) et que la sensibilité du flux transmis en fonction de la distance axiale diminue ensuite pour des rayons supérieurs à 50 mm. A l'exception de la distance 60mm, il semble que le flux transmis soit à peu près indépendant de la distance torche/substrat pour un écartement radial de 100 mm environ. Au delà de 100 mm, on observe une inversion et le flux transmis devient plus important pour la distance torche/substrat la plus grande.

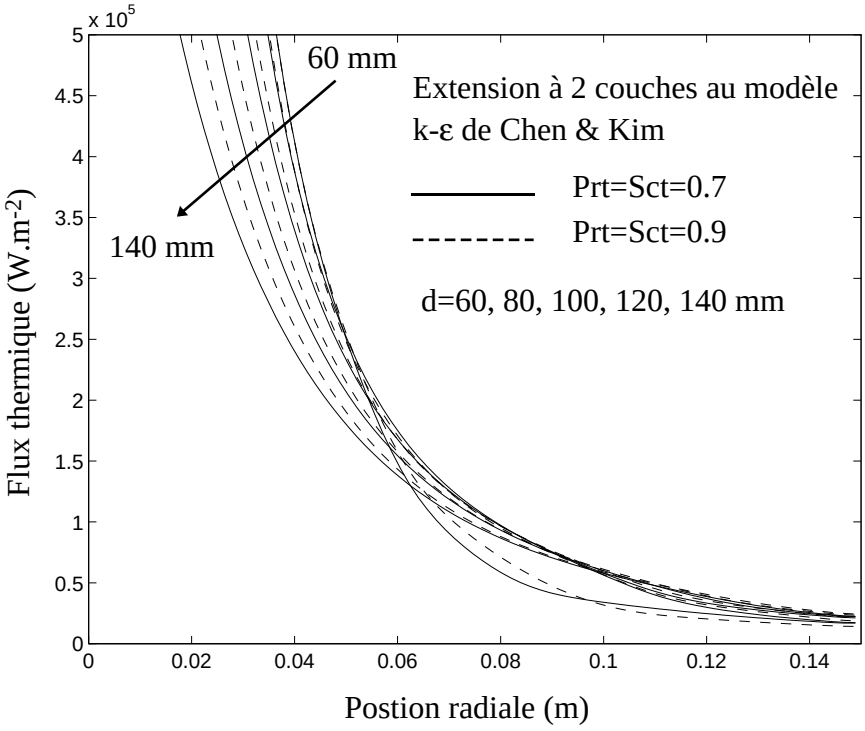


Figure 19 : *Flux thermiques prédits sur un domaine plus large par utilisation de l'extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim (échelle des ordonnées réduite).*

La Figure 20 présente une comparaison de l'influence de la distance axiale du calorimètre sur la valeur du flux thermique transmis au voisinage du point d'impact avec l'utilisation de la formulation de Monerie-Moulin. Pour les résultats numériques, le flux thermique indiqué est le flux moyen sur un diamètre de 6 mm (du même ordre que le diamètre du calorimètre interne utilisé par Monerie-Moulin). Il apparaît clairement que le modèle que nous proposons ici suggère des flux thermiques plus importants pour de faibles distances jet/calorimètre (de 60 à 80 mm) et des flux thermiques plus faibles pour des distances plus importantes (de 100 à 140 mm). En d'autres termes, la sensibilité du flux vis à vis de la distance jet/calorimètre est plus importante pour le modèle que suivant la formulation empirique. Si l'on considère cette formulation, en négligeant l'importance de la constante 0.228, le flux thermique au voisinage du point d'impact varie en $d^{-2.55}$. Si l'on considère maintenant le modèle, une évolution en $d^{-3.35}$ est prédite (quelles que soient les valeurs du nombre de Prandtl et de Schmidt turbulent choisies). Si l'on considère maintenant les résultats de Chambon, on note que pour des distances faibles (flux élevés), il obtient des valeurs légèrement supérieures à

celles obtenues suivant la formulation de Monerie-Moulin (6.3 W.mm^{-2} au lieu de 5.34 W.mm^{-2} à 80 mm). Par contre pour des distances plus importantes (flux faibles), il obtient des valeurs significativement inférieures. Ainsi pour indication, Chambon donne, pour un environnement d'argon, un flux de 0.85 W.mm^{-2} à 140 mm. Sachant que le flux thermique transmis sous air est inférieur à celui transmis sous argon, et que l'utilisation de la formulation de Monerie-Moulin donne 1.45 W.mm^{-2}, nos résultats vont dans le sens de ceux de Chambon (selon les calculs la valeur du flux transmis à 140 mm sous air est de 0.80 W.mm^{-2} en utilisant l'extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7).

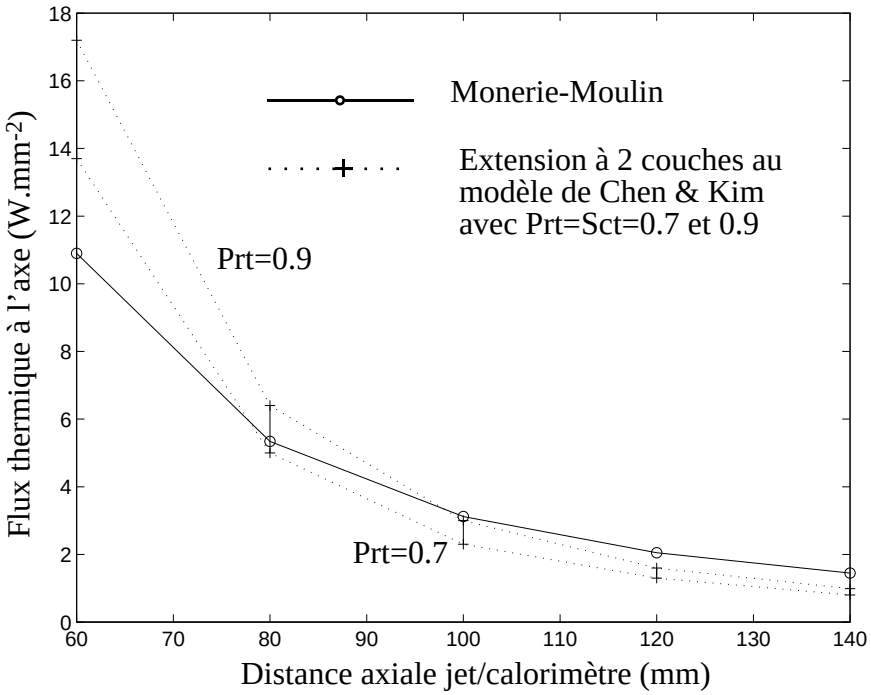


Figure 20 : *Comparaison du flux thermique au voisinage du point d'impact prédit par simulation et calculé suivant la formulation de Monerie-Moulin en fonction de la distance jet/calorimètre.*

Le Tableau 2 présente le flux thermique transmis à une surface de rayon 150 mm en fonction de la position axiale de cette surface pour les cas précédents. Comme la puissance utile de la torche est de 27 kW, les valeurs de 11.50 et 6.24 kW obtenues à 60 et 140 mm respectivement avec Prt=Sct=0.7 correspondent ainsi à 43% et 23% de cette puissance utile, d'où un coefficient inférieur à 2 et une sensibilité largement moindre que pour la valeur du flux au voisinage de l'axe.

Distance torche/surface	Flux transmis (kW) Prt=0.7	Flux transmis (kW) Prt=0.9
60	11.50	12.40
80	9.81	10.45
100	8.26	8.85
120	7.14	7.67
140	6.24	6.69

Tableau 2 *: Flux thermique transmis à une surface de rayon 150mm pour différentes positions axiale (extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim).*

Le principal apport de la simulation relativement aux mesures concerne, à n'en pas douter, la forme des profils radiaux calculés. En effet, les travaux expérimentaux supposaient en première approximation une forme gaussienne du profil. D'après les calculs, la présence de la paroi modifie significativement les isothermes du jet. Ainsi, les profils radiaux du flux thermique ne peuvent être considérés comme gaussiens. Néanmoins, si nous avons vu qu'un profil exponentiel décroissant était utilisable sur une certaine distance (entre 5 et 40 mm), aucune forme simple de profil susceptible d'être utilisée quel que soit l'écartement radial par rapport à l'axe n'a été trouvée. Malgré tout, nous suggérons que les profils radiaux calculés sont plus acceptables que des profils gaussiens. En effet, en supposant que les résultats obtenus avec l'extension à deux couches au modèle de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7 soient les plus réalistes, nous avons vu que la puissance thermique transmise sous air à une surface de diamètre 300 mm dans les conditions d'étude était de 9810 W à 80 mm et 6240 W à 140 mm. Sur ces puissances, 47.5% des 9810 W et 27.4% des 6240 W sont respectivement transmises à l'intérieur d'un rayon plus petit de 35 mm (soit 4660W et 1710 W) alors que les valeurs du flux au voisinage de l'axe sont de 5 $MW.m^{-2}$ et 0.803 $MW.m^{-2}$ respectivement. A partir de ces données, si l'on détermine les rayons des gaussiennes qui permettent d'obtenir des puissances identiques en conservant les mêmes valeurs du flux à l'axe, à 80 mm on obtient 17.5 mm en considérant le flux transmis à une surface de rayon 35 mm (proche de celui du calorimètre utilisé par Monerie-Moulin)

$$2\pi\int_0^{35} 5.0\ r\ \exp\left(-\left(\frac{r}{Rg}\right)^2\right)\ dr \approx 4660 \quad \text{si} \quad Rg \approx 17.5\ \text{mm}$$

et 25 mm si l'on considère une surface de rayon 150 mm (rayon du calorimètre utilisé par Chambon).

$$2\pi\int_0^{150} 5.0\ r\ \exp\left(-\left(\frac{r}{R_g}\right)^2\right)\ dr \approx 9810 \quad \text{si} \quad Rg \approx 25\ \text{mm}$$

Si l'on considère maintenant la distance axiale de 140 mm, les rayons des gaussiennes deviennent 30 mm et 50 mm respectivement.

$$2\pi\int_0^{35} 0.8\ r\ \exp\left(-\left(\frac{r}{Rg}\right)^2\right)\ dr \approx 1710 \quad \text{si} \quad Rg \approx 30\ \text{mm}$$

et

$$2\pi\int_0^{150} 0.8\ r\ \exp\left(-\left(\frac{r}{Rg}\right)^2\right)\ dr \approx 6240 \quad \text{si} \quad Rg \approx 50\ \text{mm}$$

La valeur de 17.5 mm à 80 mm est en bon accord avec les indications de Monerie-Moulin au contraire de la valeur de 30 mm à 140 mm (un rayon légèrement supérieur à 20 mm serait plutôt attendu). Pour obtenir une valeur plus proche de 20 mm et conserver nos 1710 W de puissance transmise, il est nécessaire d'utiliser le flux thermique à l'axe obtenu suivant la formule de Monerie-Moulin (l'utilisation 1.45 $MW.m^{-2}$ au lieu de 0.803 donne une gaussienne de rayon 20 mm au lieu de 30 mm).

$$2\pi\int_0^{35} 1.45\ r\ \exp\left(-\left(\frac{r}{Rg}\right)^2\right)\ dr \approx 1710 \quad \text{si} \quad Rg \approx 20\ \text{mm}$$

Concernant le cas d'une surface de rayon 150 mm, le passage d'une gaussienne de rayon 25 mm (pour une distance de 80 mm) à 50 mm (pour une distance de 140 mm) est en bon accord avec les résultats obtenus par Chambon pour des conditions proches. Par conséquent, en supposant que les résultats obtenus par utilisation de l'extension à 2 couches au modèle *k-ε* de Chen et Kim avec Prt=Sct=0.7 sont les plus réalistes, on parviendrait à expliquer pourquoi Monerie-Moulin et Chambon arrivent à des rayons de gaussienne différents en utilisant des calorimètres de rayons différents.

3.2.5. Influence de la température du substrat

Les résultats présentés dans ce chapitre supposaient une température de surface fixée à 300K de manière à représenter le cas d'un calorimètre refroidi. Dans le cas d'un jet de plasma impactant sur un substrat ou sur une surface plane quelconque, suivant le temps d'exposition au jet ou la vitesse relative jet/substrat, la température de surface du substrat peut s'échauffer localement et les résultats proposés ne correspondent plus strictement au cas réel. Il est donc nécessaire de vérifier dans quelle mesure la température du substrat modifie le flux thermique transmis par le jet de plasma. La Figure 21 représente le flux thermique calculé suivant l'extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7 pour des températures de surface allant de 300 à 600 K par pas de 100K dans le cas d'une distance jet/substrat de 80 mm.

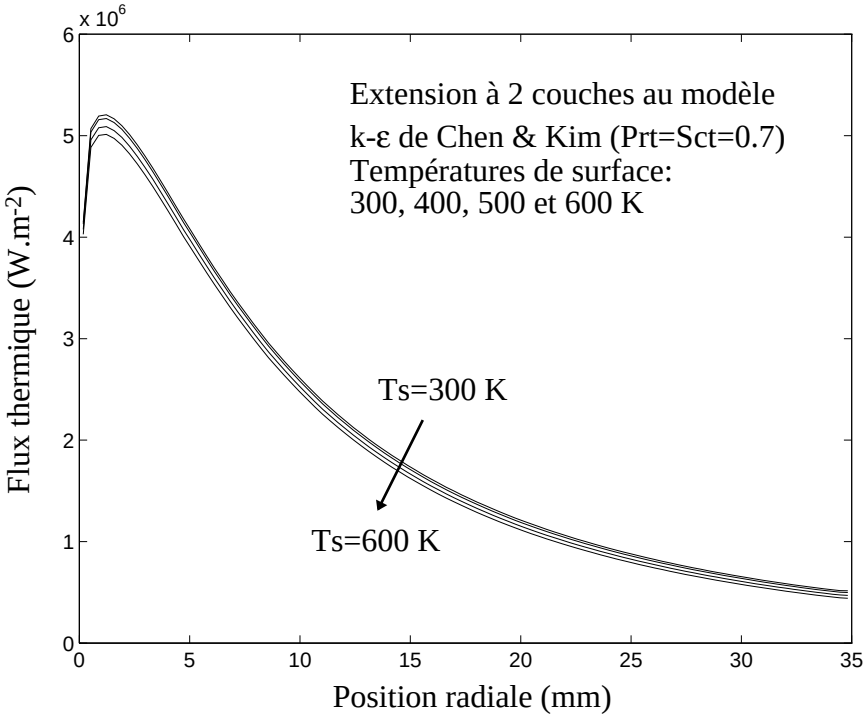


Figure 21 : *Influence de la température de surface sur le flux thermique transmis au substrat (extension à 2 couches au modèle de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7).*

On remarque que pour ces conditions, le flux n'est que faiblement modifié au voisinage du point d'impact et que la différence reste approximativement constante en valeur absolue suivant la position radiale. Cette différence constante représente par contre un pourcentage croissant du flux

quand la position radiale augmente puisque le flux diminue en valeur absolue. Toutefois, dans un cas réel, l'échauffement local de la surface est bien entendu fonction du flux local transmis. Nous avons également vérifié que l'influence de la température de surface sur le flux transmis augmente avec la distance jet/substrat car la température du jet diminuant suivant l'axe, une même augmentation de la température de surface joue un rôle d'autant plus important que la température du jet diminue.

Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons mis en évidence que les flux thermiques prédits en couplant le terme source de Yap à l'extension de Lam-Bremhorst au modèle k-ε standard sont très similaires à ceux prédits en utilisant une extension à deux couches à ce même modèle. Toutefois, nous avons montré que les flux obtenus dans les deux cas étaient sûrement sous-estimés dans la mesure où les études expérimentales de Monerie-Moulin et Chambon indiquent des flux supérieurs. Nous avons alors attribué la sous-estimation du flux à une surestimation de l'expansion radiale du jet dans la mesure où il s'agit d'un défaut connu du k-ε standard appliqué aux jets ronds. Nous avons ensuite implémenté et utilisé une extension à deux couches au modèle de k-ε de Chen & Kim décrivant les jets ronds de manière plus correcte. Les résultats obtenus avec ce nouveau modèle indiquent des échanges thermiques beaucoup plus en accord avec les travaux expérimentaux. Ceci suggère que les champs de température et de vitesse d'un jet de plasma sont ainsi mieux décrits.
Nous avons également mis en évidence que la sensibilité du flux thermique transmis vis à vis de la distance torche/paroi est plus importante pour le modèle que suivant la formule de Monerie-Moulin. Toutefois, ces résultats sont en accord avec les mesures réalisées par Chambon. Un point particulièrement important concerne la forme des profils radiaux du flux. Nous avons montré que pour un écartement radial situé entre 5 et 40 mm, le profil radial du flux est plus de type exponentiel décroissant que de type gaussien.

1 W.H. Zhuang, D. Gray, K. Etemadi, D.M. Benenson, “Study of Deposition Offset in Plasma Spray of Zirconia”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **16** (1), 127S-139S (1996).

2 G. Simard, M. Boulos, A. Charrette, “Heat Transfer from an Impinging Plasma Jet”, Proceedings of the 3rd European Congress on Thermal Plasma Processes, pp. 97-103, Aachen (1994).

3 R. Bolot, V. Monin, M. Imbert, C. Coddet, “Mathematical Modeling of a Plasma Jet Impinging on a Flat Structure”, in *Thermal Spray : Meeting the Challenges of the 21th Century*, (Proceedings of the International Thermal Spray Conference, Nice, 1998), Vol. 1, pp. 439-444, Ed. C. Coddet, Pub. ASM Int., Materials Park, OH-USA (1998).

4 F. Monerie-Moulin, “Contribution à l'étude des flux thermiques imposés en projection plasma au substrat et au dépôt et à leur influence sur les propriétés du dépôt”, Thèse - Université de Limoges, N°59-93 (1993).

5 G. Chambon, “Contribution à l'étude des flux thermiques en projection plasma et refroidissement cryogénique”, Thèse - Université de Limoges, N°49-96 (1996).

6 F. Monerie-Moulin, F. Gitzhofer, P. Fauchais, M. Boulos, A. Vardelle, “Flux Transmitted to a cold substrate by a D.C. Ar-H2 spraying plasma jet”, European Congress on Thermal Plasma Processes, Journal of High Temperature Chemical Processes, Suppl. to n°3, Vol. 1 ,pp. 249-257, (1992).

7 V.C. Patel, W. Rodi, G. Scheuerer, “Turbulence Models for Near-Wall and Low Reynolds Number Flows: A Review”, *AIAA Journal*, **23** (9), 1308-1319 (1984).

8 A. Bouvier, C. Delalondre, O. Simonin, J.F. Brilhac, “Numerical Modelling of the Internal Behaviour of a Vortex Stabilized Plasma Torch”, *EDF - Direction des Etudes et Recherches*, Internal Note N°95NM00013, (1994).

9 C. Delalondre, S. Zahrai, O. Simonin, “Turbulence Modelling in Electric Arc”, *EDF - Direction des Etudes et Recherches*, Internal Note N°95NR00038, (1994).

10 K.Y. Chien, “Predictions of Channel and Boundary-Layer Flows with a Low-Reynolds-Number Turbulence Model”, *AIAA Journal*, **20** (1) 33-38 (1982).

11 C.K.G. Lam, K. Bremhorst, “A Modified Form of the k-ε Model for Predicting Wall Turbulence”, *Journal of Fluids Engineering*, **103**, 456-460 (1981).

12 L. Davidson, “Calculation of the Turbulent Buoyancy-Driven Flow in a Rectangular Cavity using an Efficient Solver and two different Low Reynolds Number (k-ε) Models”, *Numerical Heat Transfer*, Part A, **18**, 129-147 (1990).

13 CHAM, “PHOENICS On-Line Information System”.

14 M.A. Leschziner, “Resolving Complex Strain Fields with Turbulence Transport Closure Models”, EDF - Direction des Etudes et Recherches, Internal Report N°93NB00102 (1993).

15 C. Yap, “Turbulent Heat and Momentum Transfer in Recirculating and Impinging Flows”, PhD Thesis, Faculty of Technology of Manchester (1987).

16 D. Laurence, “Modeling Flows Around Bluff Bodies by Reynolds Averaged Transport Equations”, EDF - Direction des Etudes et Recherches, Internal Report N°93NB00036 (1993).

17 . W. Rodi, “Experience with two-layer models combining the k-ε model with a one equation model near the wall”, AIAA-91-0216, 29th Aerospaces Sciences Meeting, January 7-10, Reno, Nevada, (1991)

Chapitre 4

Entraînement des particules dans le jet

4. L'entraînement des particules dans le jet

L'étude des jets impactants réalisée au chapitre précédent a permis de mettre en évidence le fait que l'utilisation d'une extension à 2 couches au modèle k-ε de Chen & Kim était préférable à celle de diverses extensions au modèle k-ε standard. Dans ce dernier chapitre, nous adopterons donc les champs calculés avec le modèle de Chen & Kim en utilisant des nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents de 0.7. L'étape préliminaire à la réalisation d'un modèle prenant en compte l'effet de charge au niveau des interactions jet/particules consiste à vérifier que l'utilisation de corrélations empiriques pour le coefficient de traînée et le nombre de Nusselt autour d'une particule, permet effectivement de prédire des vitesses et des températures de particules réalistes dans le cas d'une faible charge en particules. De par l'acquisition récente de l'outil de mesure DPV 2000, une comparaison des résultats numériques à des mesures expérimentales réalisées in situ a été rendue possible.

Le système de mesure DPV 2000 permet de détecter les particules en vol, de mesurer leur vitesse, leur température de surface et leur diamètre [1, 2, 3] ainsi que leur position dans le jet. Le principe de mesure est basé sur la détection du rayonnement émis par les particules. Il n'est donc possible de détecter que des particules chaudes. La mesure de la vitesse s'apparente à une mesure de temps de vol : le signal émis par une particule est enregistré lors de son passage devant deux fentes distantes de quelques dizaines de microns. La vitesse de la particule est déduite par connaissance de l'espacement des fentes et du temps écoulé entre les deux signaux. La mesure de la température est réalisée par pyrométrie bichromatique : la mesure du signal émis par une particule à deux longueurs d'onde différentes permet d'en déduire sa température sous l'hypothèse que son émissivité reste inchangée aux deux longueurs d'onde. La mesure du diamètre de particule est déduite de l'amplitude du signal : une particule de gros diamètre provoque la perception d'un signal plus large et d'intensité supérieure et inversement.

Comme nous l'avons indiqué, avant d'élaborer un modèle diphasique pour représenter le procédé de projection thermique (partie qui ne sera pas abordée dans cette thèse), il est judicieux de vérifier tout d'abord si le calcul de coefficients d'échanges basé sur des corrélations empiriques permet effectivement de déterminer des vitesses et des températures cohérentes avec les mesures. Pour de faibles débits de poudre, le taux de dispersion de la phase solide dans le jet est tel que le calcul peut être découplé. Ceci revient d'une part à négliger l'influence de la poudre injectée sur les champs de vitesse et de température du jet et permet d'autre part l'obtention d'un meilleur taux de détection sur le plan expérimental. Le taux de détection est défini comme le rapport du nombre de signaux réellement pris en compte pour la mesure au nombre total de signaux perçus. En effet, de manière à s'assurer que les signaux perçus sur les deux fentes ne proviennent que d'une seule et même particule, des critères établis sur le traitement du signal permettent de rejeter une mesure si les signaux enregistrés sur les deux fentes n'ont pas une forme ou une amplitude similaire. A faibles

débits de poudre, il est ainsi compréhensible que la fréquence de superposition de signaux émis par différentes particules diminue. Par conséquent, on peut dire que l'utilisation de faibles débits de poudre est avantageuse à la fois sur le réalisme d'un modèle qui négligerait l'effet des particules sur les caractéristiques du jet et sur celui d'une mesure effectuée à l'aide du DPV par une meilleure statistique sur les caractéristiques des particules injectées. Il existe par ailleurs d'autres avantages à l'utilisation d'un modèle découplé : les temps de calcul étant plus faibles et les particules étant considérées individuellement, on peut affiner le modèle et réaliser par exemple le couplage avec l'équation de conduction interne. En effet, il est connu que des particules de conductivité thermique faible (telles que des oxydes par exemple) ne s'échauffent pas en bloc et que d'importants gradients de température peuvent apparaître entre la surface d'une particule et son cœur. Nous avons donc choisi dans un premier temps de nous intéresser à un modèle qui néglige l'effet des particules sur le jet de plasma et pour lequel un découplage peut être effectué. Nous prendrons en compte l'effet du gradient thermique entre la surface et le cœur d'une particule si nécessaire.

4.1. Les échanges jet de plasma/particules

L'entraînement et l'échauffement des particules dans le jet de plasma sont modélisés par utilisation de coefficients d'échange destinés à caractériser et quantifier les échanges dynamiques et thermiques entre le jet et les particules de poudre. On fait donc généralement intervenir le coefficient de traînée d'une particule (qui quantifie les échanges dynamiques) et le nombre de Nusselt (qui quantifie les échanges thermiques). Ces deux nombres sont définis en fonction de corrélations plus ou moins empiriques. De par l'importance des travaux réalisés à ce jour concernant le transport de particules solides dans les écoulements gazeux, de nombreuses expressions de ces coefficients d'échanges peuvent être trouvées dans la littérature. Si la plupart d'entres elles ne sont pas propres au domaine des plasmas, de nombreux auteurs ont néanmoins travaillé sur ce domaine particulier : des corrélations dites “standards” sont alors utilisées et sont parfois modifiées de manière à prendre en compte notamment l'effet du gradient des propriétés thermodynamiques et des coefficients de transport du plasma intervenant dans la couche limite à la surface des particules. En effet, dans cette couche limite, la température passe de la température de surface de la particule (inférieure ou égale à la température de vaporisation du matériau) à la température locale du plasma qui peut être très largement supérieure à celle-ci dans la zone du cœur du jet, là où les échanges sont les plus importants. En outre, divers effets viennent s'ajouter dans le cas des interactions jet de plasma/particules. En effet, au vu des gammes de température observées dans le cœur d'un jet de plasma, la densité du gaz plasma (qui varie en première approximation en T^{-1}) y est très faible si bien que le libre parcours moyen des molécules du gaz plasma augmente et que le milieu ne peut alors plus être considéré comme continu. Il devient alors nécessaire d'apporter une correction aux corrélations standards, définies pour un milieu continu. Il s'agit de l'effet Knudsen (ou de raréfaction) qui peut provoquer une diminution importante des coefficients d'échange dans le cœur du jet surtout pour les plus petites particules. De la même manière, dans certains cas, une particule

peut atteindre sa température de vaporisation en surface : le flux thermique transmis par le plasma à la particule est alors partiellement absorbé pour échauffer les produits vaporisés à la température locale du plasma et on a donc une diminution du flux thermique réellement transmis à la particule. Il s'agit de l'effet de vaporisation qui affecte en fait non seulement les échanges thermiques mais qui semble également pouvoir influencer le coefficient de traînée de la particule. Différentes forces, autres que la force de traînée, sont également souvent mentionnées dans la littérature mais sont souvent négligées: c'est notamment le cas pour la force de masse ajoutée puisque la masse volumique des particules solides est toujours largement supérieure à celle des jets de plasmas utilisés. Concernant les forces extérieures éventuelles, aucun champ électrique ou magnétique n'existe dans les jets externes, alors que la pesanteur est négligeable comparée à la force de traînée. Huang [4] précise également qu'au vu des tailles de particules injectées, la force de Basset est également négligeable excepté pour des différences de vitesses gaz/particules inférieures à 1 m/s. Il en est de même pour la force de thermophorèse qui ne peut affecter que les particules les plus petites (inférieures à 10 μm) car elles sont les seules à pouvoir être accélérées et rester à des vitesses proches de celles du jet de plasma.

A partir de ces remarques, en ne considérant que la force de traînée, il vient pour l'accélération d'une particule :

$$m\frac{d\vec{V}_p}{dt} = Cd\ \ A\ \ \frac{1}{2}\rho_g\left\|\vec{V}_g - \vec{V}_p\right\|\left(\vec{V}_g - \vec{V}_p\right)$$

où *m* est la masse de la particule, *A* son maître couple (section projetée de la particule suivant la directrice $\vec{V}_g - \vec{V}_p$), *Cd* le coefficient de traînée, ρ la masse volumique et les indices p et g désignent respectivement la particule et le gaz environnant.

Pour une particule sphérique, l'équation précédente peut s'écrire

$$\frac{d\vec{V}_p}{dt} = Cd\quad \frac{3}{4d}\frac{\rho_g}{\rho_p}\left\|\vec{V}_g - \vec{V}_p\right\|\left(\vec{V}_g - \vec{V}_p\right)$$

Équation 1 : *Expression de l'accélération d'une particule sphérique soumise à la force de traînée.*

où *d* désigne le diamètre de la particule.

Concernant les échanges thermiques, pour une particule s'échauffant de manière homogène et ne subissant pas de changement d'état, il vient

$$m\ \ Cp_p\frac{dT_p}{dt} = \alpha\ \ S\ \left(T_g - T_p\right)$$

où *S* désigne la surface d'échange, T_p la température de la particule et α le coefficient d'échange.

Pour déterminer le coefficient d'échange, on introduit généralement le nombre de Nusselt

$$\mathrm{Nu} = \frac{\alpha d}{\lambda_g}$$

où λ_g est la conductivité thermique du gaz.

Le coefficient de traînée et le nombre de Nusselt doivent alors être calculés en fonction de corrélations empiriques.

4.2. Les corrélations existantes

Dans la majorité des études, les auteurs expriment le coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds relatif à la particule

$$\mathrm{Re} = \frac{\rho_g \left\| \vec{V}_g - \vec{V}_p \right\| d}{\mu_g}$$

où μ_g est la viscosité dynamique du gaz.

Les corrélations les plus utilisées sont de la forme

$$Cd = \frac{24}{\mathrm{Re}} \left(1 + a \ \mathrm{Re}^b\right)$$

Équation 2 : *Formulation courante du coefficient de traînée d'une particule en fonction du nombre de Reynolds relatif à la particule.*

Lewis & Gauvin [5], Vardelle [6] ou Yang [7] ont par exemple rappelé les valeurs de a et b suivant les relations de Stokes, Oseen et Beard-Pruppacher en fonction du nombre de Reynolds. Le Tableau 1 présente les coefficients a et b suivant ces relations.

	a	b
Re<0.2 (Stokes)	0	0
0.2Re<2 (Oseen)	0.187	1
2<Re<20 (Beard-Pruppacher)	0.110	0.81
20<Re<500 (Beard-Pruppacher)	0.189	0.62

Tableau 1 : *Coefficients a et b suivant les corrélations de Stokes, Oseen et Beard-Pruppacher.*

La relation de Schiller et Naumann permet d'utiliser des valeurs constantes de a et b sur une plus grande plage :

$$Cd = \frac{24}{\mathrm{Re}} \left(1 + 0.15 \ \mathrm{Re}^{0.687}\right) \qquad (\mathrm{Re} < 1000)$$

Équation 3 : *Coefficient de traînée suivant Schiller et Naumann.*

Huang & al. [4] utilisent quant à eux une formulation de forme différente :

$$Cd = \frac{24}{\mathrm{Re}} + \frac{6}{1 + \sqrt{\mathrm{Re}}} + 0.4$$

Équation 4 : *Coefficient de traînée suivant Huang & al.*

tout comme Mathur & al. [8] qui utilisent la formule de Kurten, Raasch et Rumpf dont la forme est très similaire

$$Cd = \frac{21}{\mathrm{Re}} + \frac{6}{\sqrt{\mathrm{Re}}} + 0.28 \qquad (2 < \mathrm{Re} < 300)$$

Équation 5 : *Coefficient de traînée suivant Kurten & al.*

Heiskanen [9] a recensé tout une série d'autres formulations applicables sur des gammes de Reynolds plus ou moins larges.

La Figure 1 présente l'évolution de $Cd\ \mathrm{Re}/24$ pour les corrélations ci-dessus en fonction du nombre de Reynolds. Alors que les relations de Schiller & Naumann et de Kurten & al donnent des résultats très semblables, les relations de Beard & Pruppacher donnent un coefficient de traînée plus faible et la relation de Huang & al prédit un coefficient de traînée plus important. La majorité des autres corrélations recensées par Heiskanen étant plus en accord avec Schiller & Naumann ou Kurten & al, la relation de Schiller & Naumann est utilisée dans notre code. Il est tout de même nécessaire de noter que la différence entre les résultats obtenus suivant Huang & al relativement à Beard & Pruppacher n'est absolument pas négligeable et augmente avec le nombre de Reynolds.

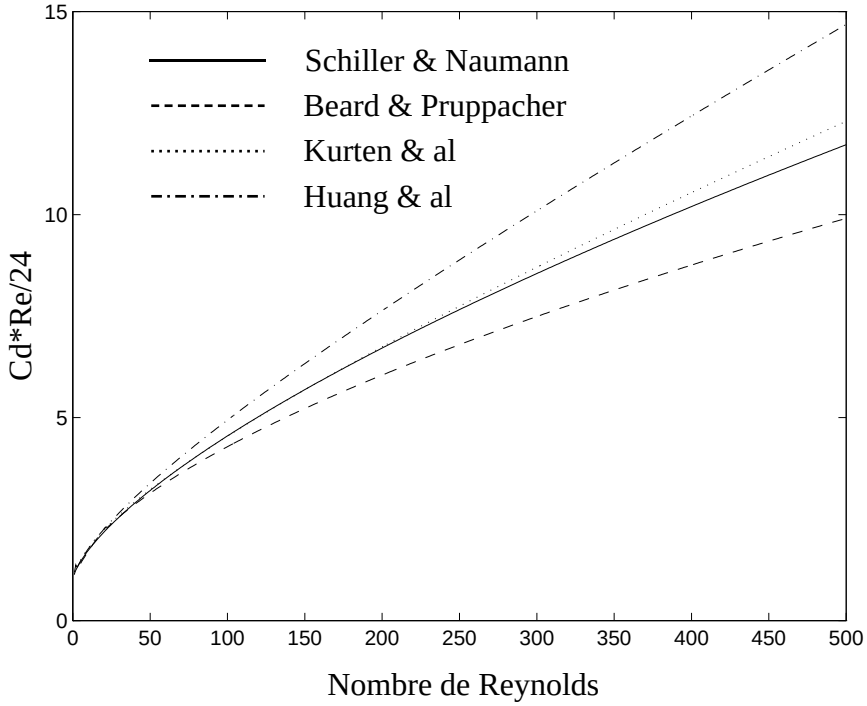


Figure 1 : *Evolution de Cd*Re/24 en fonction du nombre de Reynolds suivant différentes expressions du coefficient de traînée.*

Concernant le nombre de Nusselt, la relation la plus utilisée est celle de Ranz-Marshall [4, 8, 10, 11, 12] suivant laquelle

$$\mathrm{Nu} = 2 + 0.6\ \ \mathrm{Re}^{0.5}\,\mathrm{Pr}^{0.33}$$

Équation 6 : *Formulation du nombre de Nusselt suivant la relation de Ranz-Marshall.*

On peut noter qu'à bas Reynolds, $\mathrm{Nu} = 2$ (conduction pure autour d'une sphère).

La différence observée entre les suggestions réalisées par les différents auteurs ne concerne pas seulement la formulation initiale utilisée en elle-même. En effet, la façon de calculer les propriétés du gaz intervenant dans les expressions des nombres de Reynolds et de Nusselt joue aussi un rôle tout comme les éventuelles corrections apportées à la formule. De par l'existence du gradient thermique entre la surface de la particule et la température locale du plasma, à quelle température est-il par exemple préférable d'évaluer la viscosité et la masse volumique pour calculer le nombre de

Reynolds? Au niveau des jets de plasma, compte tenu de l'importance de ce gradient, les résultats peuvent être significativement différents suivant le choix réalisé.

Dans le cas de la conduction pure autour d'une sphère plongée dans un milieu de conductivité thermique variable en fonction de la température, on montre que le flux thermique reçu par la sphère s'exprime suivant

$$\phi_{W.m^{-2}} = \frac{2\int_{T_p}^{T_g} \lambda_g dT}{d}$$

Par conséquent, l'utilisation de Nu=2 n'est valable que si la conductivité thermique intégrée entre la température de surface de la sphère et la température locale du gaz est considérée.

Ainsi, Vardelle [13] a suggéré de conserver des corrélations standards pour déterminer les coefficients d'échange (Beard-Pruppacher pour le coefficient de traînée et Ranz-Marshall pour le nombre de Nusselt) tout en utilisant les propriétés intégrées entre la température de surface de la particule et la température locale du plasma pour le calcul des nombres de Reynolds et de Prandtl.

Lewis & Gauvin [5] ont suggéré de calculer le coefficient de traînée suivant Beard-Pruppacher en utilisant la viscosité et la masse volumique du plasma à la température du film T_f (température moyenne entre la surface de la particule et la température locale du plasma) et en considérant un coefficient correcteur faisant intervenir le rapport des viscosités cinématiques à la température du film et à la température locale du gaz. Finalement ils proposent

$$Cd = Cd_{BP}\left(\frac{\nu_f}{\nu_g}\right)^{0.15}$$

Équation 7 : *Effet du gradient thermique en surface de particule suivant Lewis & Gauvin.*

où Cd_{BP} est calculé suivant Beard-Pruppacher avec le nombre de Reynolds calculé à T_f..

Huang & al. [4] utilisent l'Équation 4 en évaluant la viscosité et la masse volumique du plasma à la température du film mais en utilisant un coefficient correcteur faisant cette fois intervenir le rapport entre le produit de la masse volumique par la viscosité dynamique à la température locale du plasma au même produit évalué à la température de surface de la particule. Il vient alors

$$Cd = Cd_H\left(\frac{\rho_\infty \mu_\infty}{\rho_s \mu_s}\right)^{-0.45}$$

Équation 8 : *Effet du gradient thermique en surface de particule suivant Huang & al.*

A basse température, nous avons vu au premier chapitre que la masse volumique du plasma d'argon évoluait en T^{-1} et sa viscosité dynamique en $T^{0.7}$. Avec ces données, sa viscosité cinématique évolue donc en $T^{1.7}$, le coefficient $\left(\nu_f/\nu_g\right)^{0.15}$ en $\left(T_f/T_g\right)^{0.255}$ et le coefficient $\left(\rho_g\mu_g/\rho_s\mu_s\right)^{-0.45}$ en $\left(T_g/T_s\right)^{0.135}$. Lorsque $T_s < T_f < T_g$ (échauffement de la particule), on a $T_s/T_g < T_f/T_g < 1$ et la correction de Lewis et Gauvin tend donc à diminuer le coefficient de traînée au contraire de la correction de Huang qui tend à l'augmenter. On voit ainsi immédiatement toute l'incertitude qui existe quant à la correction à apporter . De plus, la formulation initiale utilisée par Huang donnant

un coefficient de traînée déjà significativement supérieur à celui utilisé par Lewis & Gauvin (Figure 1), les corrections suggérées ne font qu'augmenter la différence.

Concernant le nombre de Nusselt, le principe est identique. Vardelle [13] garde la formulation de Ranz et Marshall tout en évaluant les nombres de Reynolds et de Prandtl à partir des propriétés intégrées entre T_s et T_g.

Lewis et Gauvin [5] évaluent les propriétés à la température du film et utilisent le même coefficient correcteur que pour le coefficient de traînée, soit $\left(\nu_f/\nu_g\right)^{0.15}$.

Sayegh & Gauvin [14] ont proposé une corrélation dans laquelle le nombre de Reynolds est évalué non plus à la température du film mais à $T_{0.19} = T_s + 0.19\left(T_g - T_s\right)$.

Huang & al [4] utilisent la corrélation de Ranz et Marshall et évaluent les propriétés à la température du film. Ils corrigent ensuite le nombre de Nusselt suivant

$$Nu = Nu_{RM}\left(\frac{\rho_g \mu_g}{\rho_s \mu_s}\right)^{0.6}\left(\frac{Cp_g}{Cp_s}\right)^{0.38}$$

Cette corrélation ayant été établie pour un plasma d'argon, le terme $\left(Cp_g/Cp_s\right)^{0.38}$ tend à augmenter le nombre de Nusselt d'une manière modérée. Dans le cas d'un plasma constitué d'un mélange argon/hydrogène, la température de surface d'une particule approchant souvent la température de dissociation de l'hydrogène, Cp_s est alors significativement influencé par le pic de dissociation de l'hydrogène (voir Chapitre 1) et peut ainsi dépasser largement Cp_g dans de nombreux cas. Cette correction mène alors à une diminution plus ou moins importante du nombre de Nusselt. C'est la raison pour laquelle il est préférable de n'utiliser cette corrélation que pour un plasma d'argon pur. Ces expressions sont les plus couramment mentionnées dans la littérature et ont été notamment mentionnées par Bourdin et al. [15].

4.3. L'effet Knudsen (effet de raréfaction)

Comme nous l'avons dit en introduction, de par la température élevée d'un plasma, le libre parcours moyen des molécules qui le composent augmente, si bien que l'hypothèse de milieu continu devient discutable. Néanmoins, si le régime continu est bien connu, le régime de glissement l'est moins. Chen et Pfender [16] ont montré que l'influence de l'effet de raréfaction pouvait affecter significativement le flux thermique transmis à une particule ainsi que son coefficient de traînée surtout pour de petites particules. Ils ont proposé de déterminer le coefficient de traînée suivant l'approche milieu continu et d'apporter un coefficient correcteur permettant de prendre en compte cet effet de raréfaction. Ils arrivent finalement au résultat suivant exprimant le rapport entre le flux thermique transmis à une particule en régime de glissement et en régime continu

$$\frac{\phi_{nc}}{\phi_c} = \left[1 + \left(\frac{2-a}{a}\right)\left(\frac{\gamma}{\gamma+1}\right)\left(\frac{4}{\mathrm{Pr}_s}\right)\mathrm{Kn}^*\right]^{-1}$$

Équation 9 : *Effet Knudsen sur le flux thermique transmis à une sphère.*

Dans cette expression *a* est le coefficient d'accommodation du matériau, γ est le gamma du gaz, Pr_s est le nombre de Prandtl pris à la température de surface de la particule et Kn^* peut être considéré comme le nombre de Knudsen effectif sous des conditions plasma

$$Kn^* = \frac{2\overline{\lambda}/d_s}{\rho_s \overline{v}_s \overline{C}_p} Pr_s$$

Dans cette expression du nombre de Knudsen, $\overline{\lambda}$ représente la conductivité thermique intégrée entre T_s et T_{sg} (où T_{sg}-T_s représente le saut de température en surface de la particule). De même $\overline{C}p$ représente la chaleur spécifique intégrée entre T_s et T_{sg}. Pour les autres grandeurs, d_s est le diamètre de particule, ρ_s la masse volumique du plasma à la température de surface et $\overline{v}_s$ la vitesse moléculaire à la température de surface

$$\overline{v}_s = \sqrt{\frac{8RT_s}{\pi M}}$$

où *R* est la constante universelle des gaz et *M* la masse molaire du gaz à T_s.

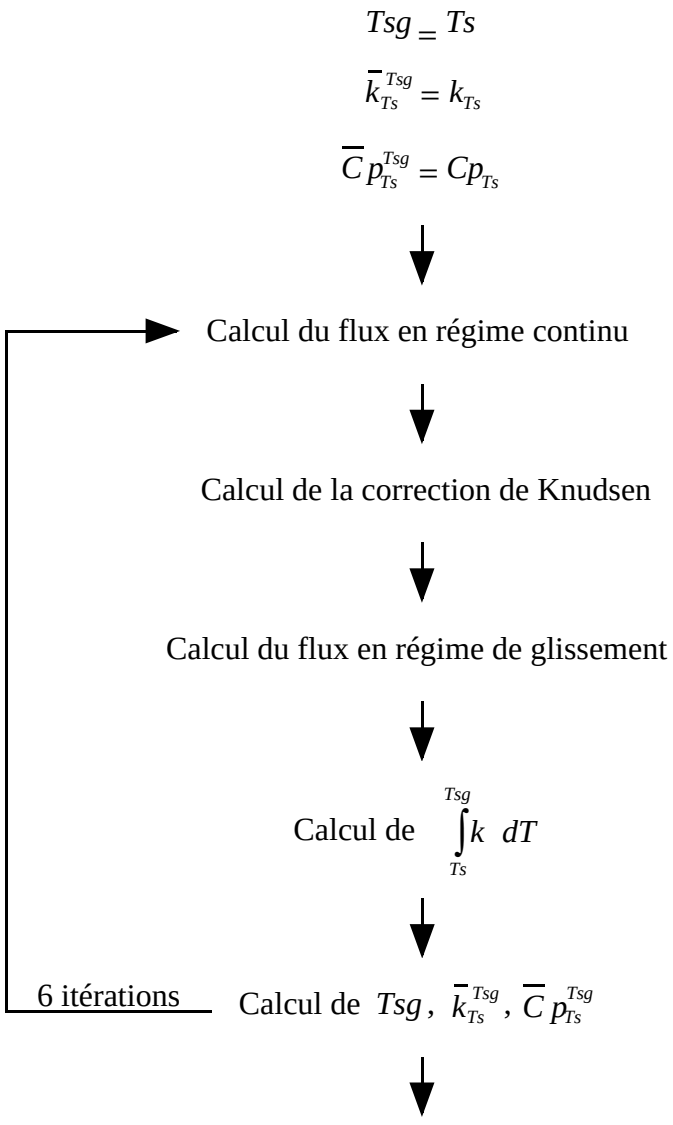


Figure 2 : *Organigramme du processus de calcul du coefficient correcteur pour l'effet Knudsen*

L'importance du saut de température n'étant pas connue initialement, une méthode itérative doit être utilisée pour le calculer et en déduire la correction à apporter. La Figure 2 présente l'organigramme de l'algorithme de résolution utilisé dans cette étude. Comme le recommandent Chen et Pfender, on suppose initialement T_{sg}-T_s=*0*, puis à partir de l'estimation de la correction de Knudsen, on recalcule T_{sg} et ce jusqu'à convergence. Dans tous les cas, six itérations suffisent à obtenir la convergence.

Remarque:

Chen et Pfender ont établi la relation précédente en considérant le cas d'un échange thermique par conduction pure autour d'une sphère ($\mathrm{Nu} = 2$). Il est donc nécessaire de supposer que cette correction reste valable dans le cas général où $\mathrm{Nu} \neq 2$, c'est à dire dès lors qu'il existe un mouvement relatif plasma/particule.

Concernant l'influence de l'effet Knudsen sur le coefficient de traînée, la correction appliquée sur le flux thermique est généralement élevée à la puissance 0.45 [4, 7, 12] et on a

$$\frac{Cd}{Cd_c} = \left[1 + \left(\frac{2-a}{a}\right)\left(\frac{\gamma}{\gamma+1}\right)\left(\frac{4}{\mathrm{Pr}_s}\right)\mathrm{Kn}^*\right]^{-0.45}$$

Yang [7] et Sobolev et al. [12] font remarquer que l'effet Knudsen est négligeable dans le cas du procédé HVOF pour lequel les températures maximales sont largement inférieures. Toutefois, pour les jets de plasma, il devient nécessaire de prendre cet effet en compte.

4.4. L'effet de vaporisation

L'effet de vaporisation en surface de particule provoque également une diminution du flux thermique transmis à la particule. En effet, lorsque la température de surface atteint la température de vaporisation ou de décomposition du matériau, le flux thermique traversant la couche limite à la surface de la particule est alors partiellement utilisé pour chauffer les produits issus de la vaporisation ou de décomposition du matériau jusqu'à la température locale du plasma. Il en résulte ainsi une baisse du flux thermique réellement transmis à la particule.

Vardelle [13] rapporte la corrélation de Chen et Pfender basée également sur le cas d'une absence de mouvement relatif entre la particule et l'écoulement ($\mathrm{Nu} = 2$).

Chen et Pfender arrivent ainsi à

$$\phi_v = \frac{2\ Lv}{d_p}\int_{Ts}^{Tg}\frac{\lambda}{(Hv - Hv_s) + Lv}\ dT$$

Équation 10 : *Flux thermique transmis à une particule en présence de vaporisation.*

où Lv est la chaleur latente de vaporisation du matériau, λ est la conductivité thermique du gaz et $(Hv - Hv_s)$ est la variation d'enthalpie de la vapeur entre T_s et T.

Dans ce cas, le flux thermique transmis sans vaporisation s'écrivant

$$\phi = \frac{2}{d_p}\int_{Ts}^{Tg}\lambda\ dT$$

il vient

$$\frac{\phi_v}{\phi} = \frac{Lv}{\int_{Ts}^{Tg} \lambda \, dT} \int_{Ts}^{Tg} \frac{\lambda}{(Hv - Hv_s) + Lv} \, dT$$

Équation 11 : *Effet de vaporisation sur le flux thermique transmis à une particule.*

En considérant des valeurs moyennes pour la conductivité thermique du gaz et la chaleur spécifique de la vapeur dans l'expression ci-dessus, il vient

$$\frac{\phi_v}{\phi} = \frac{Lv}{Tg - Ts} \int_{Ts}^{Tg} \frac{dT}{\overline{Cp}_v \, (T - Ts) + Lv} = \frac{Lv}{Hv_g - Hv_s} \ln\left(1 + \frac{Hv_g - Hv_s}{Lv}\right)$$

Équation 12 : *Formulation simplifiée de l'effet de vaporisation sur le flux thermique transmis à une particule.*

Borgianni et al [11], Johnston [10] ou Nylén et al [17] ont par exemple utilisé cette dernière équation pour traduire l'influence de l'effet de vaporisation. Comme pour l'effet Knudsen, nous notons que la correction introduite pour tenir compte de l'effet de vaporisation est initialement basée sur le cas de conduction pure si bien que là aussi, on suppose ensuite que la correction à apporter dans un cas différent est inchangée.

On peut encore utiliser le fait que

$$\frac{\ln(1+x)}{x} \approx 1 - \frac{x}{2}$$

pour *x* petit devant 1,

et obtenir que pour de faibles différences de température entre le gaz et la surface de la particule

$$\frac{\phi_v}{\phi} = 1 - \frac{Hv_g - Hv_s}{2Lv}$$

Néanmoins, cette expression diffère déjà de 28 % relativement à l'utilisation de la formulation logarithmique pour $Hv_g - Hv_s = Lv$ (correction de 0.5 au lieu de 0.69).

Remarque:

La présence de vapeur dans la couche limite en surface de particule provoque assurément une modification de la conductivité thermique. Il est bien évident qu'en toute rigueur la conductivité thermique intervenant dans l'expression intégrale du flux transmis (Équation 10) devrait tenir compte de cette modification. Il devient alors nécessaire de connaître l'évolution de la concentration de vapeur dans la couche limite ainsi que les modifications induites sur les coefficients de transport. A l'heure actuelle, cet effet n'est pas pris en compte dans le code développé.

Concernant l'effet de vaporisation sur le coefficient de traînée, Vardelle [13] rapporte que Chen propose d'utiliser la même correction que sur le flux thermique transmis. Ainsi, l'expression

$$\frac{Cd_v}{Cd} = \frac{Lv}{\int_{Ts}^{Tg} \lambda \, dT} \int_{Ts}^{Tg} \frac{\lambda}{Hv - Hv_s + Lv} \, dT$$

semble donc pouvoir être utilisée.

Néanmoins Huang & al [4] préfèrent négliger cet effet en attendant des études complémentaires concernant son influence. De même Borgianni & al. [11] négligent cet effet sur le coefficient de traînée.

4.5. Exemple de la projection d'une poudre de fer

Après avoir présenté les équations régissant le transport de particules dans un jet de plasma, nous pouvons appliquer le modèle à un cas concret. Nous avons réalisé une comparaison entre mesures DPV et simulations dans une première étude ayant porté sur une projection de fer [18]. Lors de l'étude en question, le modèle *k-ε* standard était utilisé, les particules étaient supposées entrer dans le jet à la vitesse de débit du gaz porteur et les effets Knudsen et de vaporisation étaient négligés. Le modèle ayant été modifié depuis, nous présentons ici une nouvelle analyse des résultats numériques obtenus. Toutefois, il est évident que le choix du fer comme cas test n'est pas idéal dans la mesure où l'influence de l'oxydation du fer par l'air ambiant est un élément supplémentaire.

4.5.1. Résultats expérimentaux

Rappelons tout d'abord les principaux résultats obtenus par utilisation du DVP lors de cette expérience. Concernant les conditions de projection, une torche F4 de diamètre interne 6 mm a été utilisée avec des débits de gaz de 40 l/min d'argon et 6 l/min d'hydrogène pour une intensité de courant d'arc de 500A. Concernant les conditions d'injection de la poudre (diamètre moyen 45 µm), de manière à obtenir un taux de détection maximal, un faible débit a été utilisé (3 g/min) avec un débit de gaz porteur de 1.8 l/min (injecteur de diamètre interne 1.8 mm et de longueur 25 mm). Les trois figures suivantes présentent le nombre de particules détectées par le DPV ainsi que leur vitesse et leur température à une position axiale de 100 mm et des positions verticales de 3 et -3 mm situées de part et d'autre l'axe du jet. La Figure 3 indique que le nombre de particules détectées en y=-3mm est largement supérieur au nombre de particules détectées en y=3 mm. Par conséquent, la poudre a bien pénétré dans le jet et la majorité des particules a effectivement traversé l'axe à une position axiale de 100 mm (l'axe y est représenté sur la Figure 6).

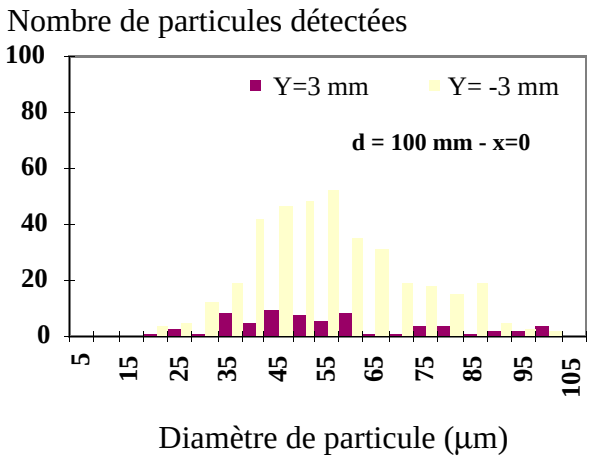


Figure 3 : *Nombre de particules détectées à une position axiale de 100 mm et des positions verticales de 3 et -3 mm.*

La Figure 4 indique que la vitesse moyenne des particules analysées est d'environ 220 m/s pour les particules de 30 µm et diminue progressivement à 100 m/s pour les particules de 100 µm. Ceci indique donc une forte dépendance vitesse de particule/ taille de particule.

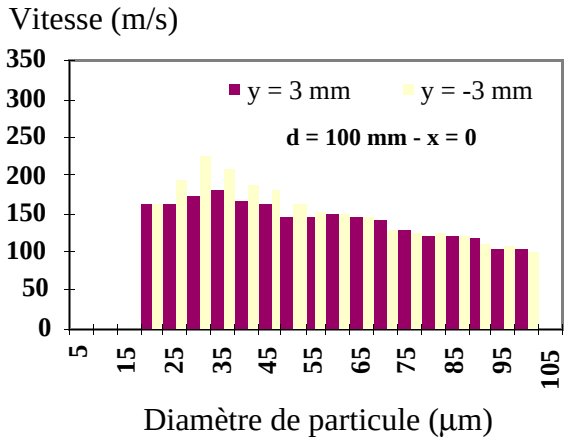


Figure 4 : *Vitesses de particules mesurées à une position axiale de 100 mm et des positions verticales de 3 et -3 mm.*

La Figure 5 indique la présence d'un palier de température pour toutes les particules de taille inférieure à 70 µm (qui semblent posséder une température identique avoisinant les 2600K). Aujourd'hui, il semble quasi certain que le palier observé est lié à la température de décomposition des particules de fer dans les conditions de projection. Sous environnement d'air, on imagine facilement que cette température de décomposition puisse être différente de la température d'évaporation du fer en atmosphère neutre.

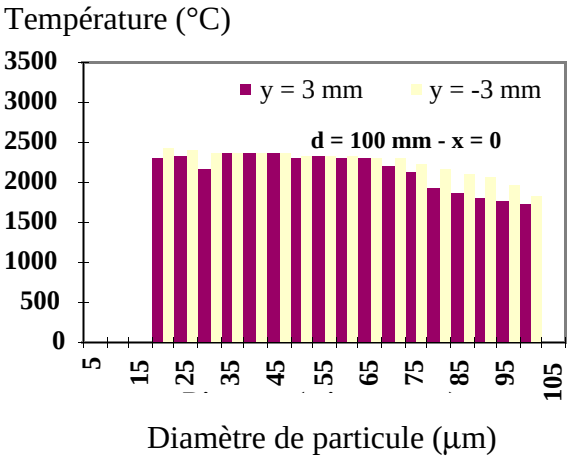


Figure 5 : *Températures de particules mesurées à une position axiale de 100 mm et des positions verticales de 3 et -3 mm.*

4.5.2. L'injection des particules dans le jet de plasma

Comme nous l'avons dit, dans l'étude précédente [18], toutes les particules étaient supposées être injectées dans le jet de plasma à la vitesse de débit du gaz porteur (indépendamment de leur taille). En réalité, nous avons depuis vérifié que les conditions d'injections des particules dans le jet de

plasma étaient en fait déterminantes et qu'en particulier la vitesse moyenne d'injection des particules dans le jet était différente de la vitesse du gaz porteur.

Nous rappelons donc sur la Figure 6, la technique d'injection des poudres dans le jet de plasma. A la sortie du distributeur de poudre, les particules sont transportées par le gaz porteur (argon) dans un conduit souple de diamètre intérieur environ 4 mm. Au point d'injection, elles sont accélérées dans l'injecteur (de diamètre interne 1.8 ou 2 mm) et de longueur standard 25 mm et pénètrent alors verticalement dans le jet de plasma.

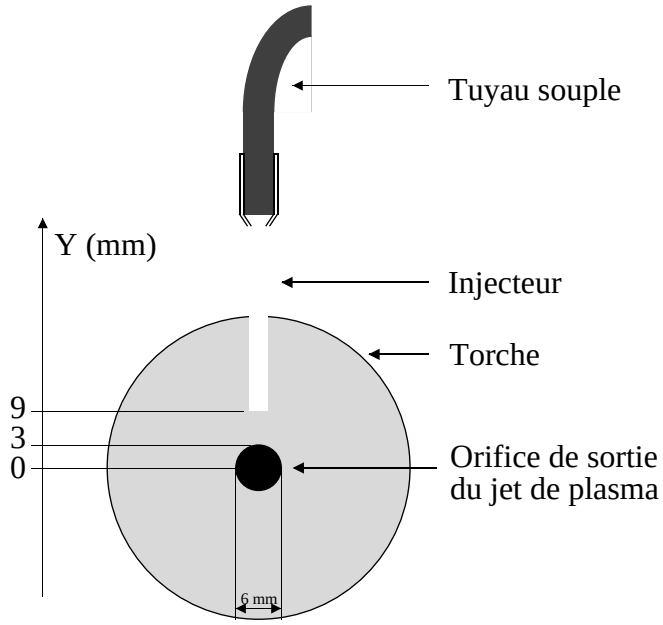


Figure 6 : *Schéma de principe de l'injection des poudres en APS.*

A partir du débit de gaz porteur et de la section du conduit souple, on peut déterminer la vitesse du gaz porteur dans ce conduit. La distance entre le distributeur de poudre et la torche étant généralement de plusieurs mètres, on peut ensuite supposer en première approximation que la poudre s'écoule à la vitesse du gaz porteur dans le conduit souple. La diminution de la section de passage du gaz dans l'injecteur provoque une augmentation de sa vitesse et une accélération des particules de poudre sur une distance voisine de la longueur de l'injecteur. En supposant que les particules n'interagissent pas entre elles et en résolvant l'équation d'accélération d'une particule de poudre soumise à la vitesse moyenne du gaz dans l'injecteur, on peut estimer la vitesse de cette particule en sortie d'injecteur. Si on réalise ce calcul pour chaque diamètre de particule, on observe que l'accélération d'une particule dépend fortement de son diamètre. La Figure 7 présente les vitesses de particules de fer en sortie d'injecteur calculées pour des débits de gaz porteur de 1.8 l/min et 3 l/min (cas d'un injecteur de 1.8 mm de diamètre interne et de 25 mm de longueur). On remarque que les petites particules sont beaucoup plus accélérées que les grosses : une particule de diamètre 10 µm a quasiment acquis la vitesse de débit du gaz porteur (11.8 m/s pour le débit de 1.8 l/min) alors qu'une particule de 100 µm n'est que faiblement accélérée sur la longueur de l'injecteur. Il est toutefois nécessaire d'insister sur le fait que ce petit calcul simple n'est valable que sous l'hypothèse d'interactions faibles entre particules.

En APS, dans des conditions classiques d'utilisation, on emploie un débit de gaz porteur de 3 Nl/min pour un débit de poudre de 30 g/min (soit guère plus de 3 ml/min de poudre suivant sa densité). Par conséquent, la fraction volumique occupée par la phase solide dans l'injecteur est de l'ordre du millième. Dans le cas de particules de même taille qui seraient injectées dans ces conditions, dans la mesure où ces particules seraient accélérées de façon homogène, l'hypothèse de non-interaction semblerait alors plausible. Au contraire, la distribution granulométrique des poudres utilisées en projection thermique étant souvent large, il est probable que des collisions entre particules viennent modifier leur accélération dans l'injecteur. Toutefois, il va sans dire que des collisions entre particules de différentes tailles provoquent plus sûrement un ralentissement des plus petites par les plus grosses qu'une accélération des plus grosses par les plus petites (principe de conservation de la quantité de mouvement lors des collisions). Par conséquent, on peut dire que ce calcul simplifié donne une bonne indication de la vitesse d'injection des particules les plus grosses mais surestime sans doute celle des plus petites.

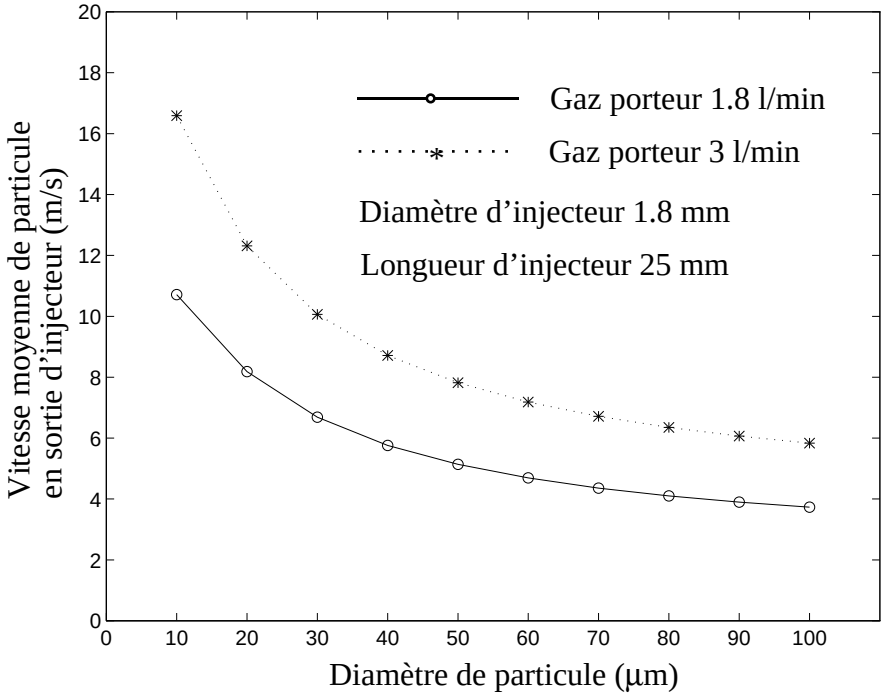


Figure 7 : *Vitesse de particule en sortie d'injecteur en fonction de la taille de particule.*

Nous avons considéré ici l'accélération de particules soumises à la vitesse moyenne du gaz porteur dans l'injecteur. Dans la pratique, au vu de l'ordre de grandeur du nombre de Reynolds relatif au diamètre de l'injecteur (de 1000 à 10000 suivant le débit de gaz porteur), un profil de vitesse différent d'un profil plat s'y établit sûrement. A faible débit de gaz porteur, un nombre de Reynolds inférieur à 2000 suggère l'établissement d'un régime laminaire (profil de vitesse parabolique). Néanmoins, dans cette gamme du nombre de Reynolds, la longueur d'établissement du régime laminaire [19]

$$L = 0.035 \; D \; \mathrm{Re}$$

serait de l'ordre de 100 mm et est donc bien supérieure à la longueur de l'injecteur. Par conséquent, quel que soit le débit du gaz porteur, un profil de vitesse parabolique semble difficilement pouvoir être supposé. Tout ceci signifie néanmoins que les vitesses indiquées sur la figure précédente sont

des vitesses moyennes estimées et que l'utilisation d'une répartition statistique autour des valeurs indiquées serait plus réaliste.

4.5.3. Résultats numériques

Les résultats présentés ci-après correspondent à l'utilisation des formules de Schiller et Naumann pour le coefficient de traînée et de Ranz-Marshall pour le nombre de Nusselt, alors que les nombres de Reynolds et de Prandtl ont été déterminés à l'aide des propriétés intégrées entre la température de surface et la température locale du plasma. Il vient

$$\frac{d\vec{V}_p}{dt} = Cd \quad \frac{3}{4d}\frac{\rho_\infty}{\rho_p}\left\|\vec{V}_g - \vec{V}_p\right\|\left(\vec{V}_g - \vec{V}_p\right) \quad \text{où} \quad Cd = \frac{24}{\mathrm{Re}}\left(\frac{\overline{\rho}}{\rho_\infty} + 0.15\,\mathrm{Re}^{0.687}\right) F_K{}^{0.45}$$

et

$$\phi = \alpha\left(T_g - T_p\right) - \varepsilon_p\sigma\left(T_p^4 - T_0^4\right) \quad \text{où} \quad \mathrm{Nu} = \frac{\alpha\ d}{\overline{\lambda}} = \left(2 + 0.6\,\mathrm{Re}^{1/2}\,\mathrm{Pr}^{1/3}\right) F_K F_V$$

$$\text{avec} \quad \mathrm{Re} = \frac{\overline{\rho}\ \left\|\vec{V}_g - \vec{V}_p\right\| d}{\overline{\mu}} \quad \text{et} \quad \mathrm{Pr} = \frac{\overline{\mu}\ \overline{C}p}{\overline{\lambda}}$$

ϕ est la valeur du flux thermique transmis par unité de surface, ε_p l'émissivité de la particule, σ la constante de Stefan ($5.67.10^{-8}$ W.m^{-2}.K^{-4}), T_0 la température du milieu environnant (288 K) et F_K et F_V représentent les effets Knudsen et de vaporisation respectivement (coefficients ≤ 1).

Le rapport $\overline{\rho}/\rho_\infty$ remplace la valeur 1 dans l'expression du coefficient de traînée pour vérifier

$$\frac{d\vec{V}_p}{dt} = \frac{18\overline{\mu}}{d^2\rho_p}\left(\vec{V}_g - \vec{V}_p\right)$$

à bas Reynolds.

Concernant l'évaluation des coefficients de transport intégrés, l'équation de conservation de la fraction massique du gaz plasma relativement au gaz environnant (équation résolue lors du calcul du jet avec PHOENICS) nous permet de déterminer les fractions molaires froides de chacun des deux gaz et de calculer la viscosité dynamique intégrée et la conductivité thermique intégrée suivant une formulation approchée de type

$$\overline{\mu} = x_1\overline{\mu}_1 + x_2\overline{\mu}_2 \quad \text{et} \quad \overline{\lambda} = x_1\overline{\lambda}_1 + x_2\overline{\lambda}_2$$

où x_i désigne la fraction molaire froide de chacun des deux gaz.

Dans le cœur du jet, la fraction du gaz environnant est nulle, si bien que les grandeurs intégrées ne subissent aucune approximation. En dehors du cœur, l'erreur maximale est commise lorsque $x_1 = x_2 = 1/2$. Toutefois, d'une manière générale, nous avons observé que l'erreur réalisée sur les grandeurs intégrées est largement moindre que celle qui peut être commises sur les grandeurs à température fixée. Concernant la viscosité, le milieu ambiant et le mélange plasmagène ayant une viscosité proche, l'erreur commise par une telle approximation est faible. Concernant la conductivité thermique, nous avons observé que l'approximation réalisée ainsi était également tout à fait correcte. Afin de mieux s'en rendre compte, la Figure 8 présente les résultats obtenus pour la conductivité thermique intégrée (entre 300 K et T) de l'air, du mélange Ar/H_2 (45/15) ainsi que du mélange composé de 50% d'air pour 50% du mélange Ar/H2 (fractions molaires ramenées à 300K). On

remarque ainsi que la conductivité thermique intégrée du mélange air/argon/hydrogène (trait plein) est constamment bien approximée par la formulation approchée faisant usage d'une pondération par la fraction molaire ramenée à 300K (trait d'axe), et ce bien que les conductivités thermiques intégrées de l'air et du mélange Ar/H_2 (45/15) soient significativement différentes à certaines températures (points).

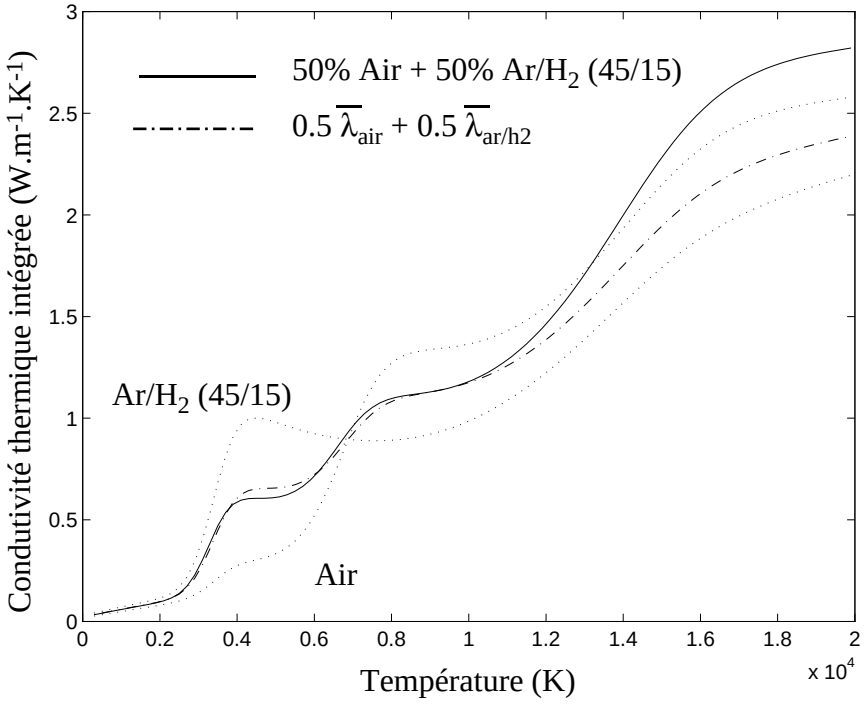


Figure 8 : *Evolution de la conductivité thermique intégrée de l'air, du mélange Ar/H_2 (45/15) ainsi que du mélange constitué de 50% d'air pour 50% d'At/H_2 (45/15).*

Au vu de ces deux résultats, nous avons considéré que l'approximation réalisée en calculant les coefficients de transport intégrés à l'aide de la formulation approchée était tout à fait suffisante.

L'effet Knudsen (représenté par F_K) a été pris en compte suivant la corrélation de Chen et Pfender (Équation 9) en supposant une valeur de 0.8 en première approximation pour le coefficient d'accommodation du fer. L'effet de vaporisation (représenté par F_V) sur la diminution du flux thermique transmis à la particule a été pris en compte suivant la formulation de Chen et Pfender également (Équation 11). Néanmoins, pour cet effet, aucune influence sur le coefficient de traînée n'a été considérée si ce n'est celui de la diminution du diamètre de particule. Pour cet effet, la méthode suggérée dans [18] a été reprise. Suivant cette dernière, le flux thermique transmis à la particule sert à diminuer sont diamètre à partir du moment où la température de particule atteint la température de vaporisation. Il vient alors

$$\alpha \; S \left(T_g - T_v\right) = \dot{m}_v \; Lv$$

où $\dot{m}_v$ est le débit massique d'évaporation à la surface S de la particule et Lv la chaleur latente d'évaporation du matériau.

Concernant les propriétés thermodynamiques du fer, les tables Janaf [20] ont été préférées aux données utilisées dans [18] (ce qui ne représente toutefois pas une modification importante). Concernant l'évolution de l'enthalpie de la vapeur de fer (nécessaire au calcul de l'effet de

vaporisation), les tables Janaf ont aussi été utilisées et seules les espèces Fe, Fe^+ et e^- ont été prises en compte (la composition à l'équilibre de la vapeur pouvant donc être simplement calculée : voir Chapitre 1). Néanmoins, ces tables n'étant disponibles qu'en deçà de 6000 K, elles ont été extrapolées à plus haute température en considérant une chaleur spécifique constante égale à celle fournie à 6000 K pour chacune des espèces.

La Figure 9 présente les trajectoires de particules injectées suivant les vitesses indiquées sur la Figure 7 pour le débit de 1.8 l/min (utilisé lors des manipulations), elle présente aussi en pointillés, les trajectoires prédites si la vitesse moyenne du gaz porteur est utilisée comme vitesse initiale des particules (vitesse de 11.8 m/s correspondant aux résultats présentés dans [18]). La différence est très importante entre les trajectoires en traits pleins et en pointillés : la dispersion réduite de quelques millimètres observée avec les vitesses d'injection de la Figure 7 étant beaucoup plus représentative de la réalité. Nous rappelons que les caractéristiques du jet de plasma ont été calculées en utilisant le modèle k-ε de Chen & Kim avec Prt=Sct=0.7. A titre indicatif (et de manière à localiser le jet relativement aux trajectoires), quelques isothermes ont été également placées sur la figure.

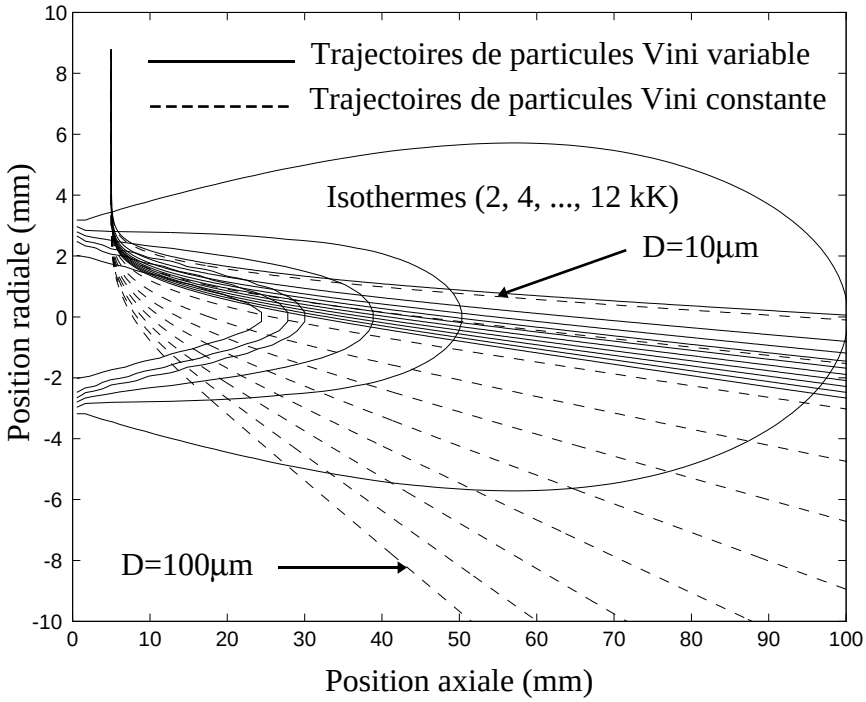


Figure 9 : *Trajectoires des particules injectées suivant des vitesses initiales inférieures ou égales à la vitesse de débit du gaz porteur.*

La Figure 10 présente les évolutions des vitesses de chacune des particules ayant suivi les trajectoires représentées en trait plein sur la Figure 9 (ou autrement dit injectées avec les vitesses initiales représentées sur la Figure 7). Les particules les plus petites ont subi des accélérations plus importantes. On note que les vitesses calculées sont en accord avec les mesures DPV pour les particules de taille supérieure ou égale à 30 µm (voir Figure 4). Toutefois, pour les particules de taille inférieure, les vitesses calculées sont significativement plus importantes que les vitesses

mesurées, ceci est à rapprocher d'une possible surestimation de la vitesse initiale de ces particules et donc d'une surestimation de leur pénétration dans le jet.

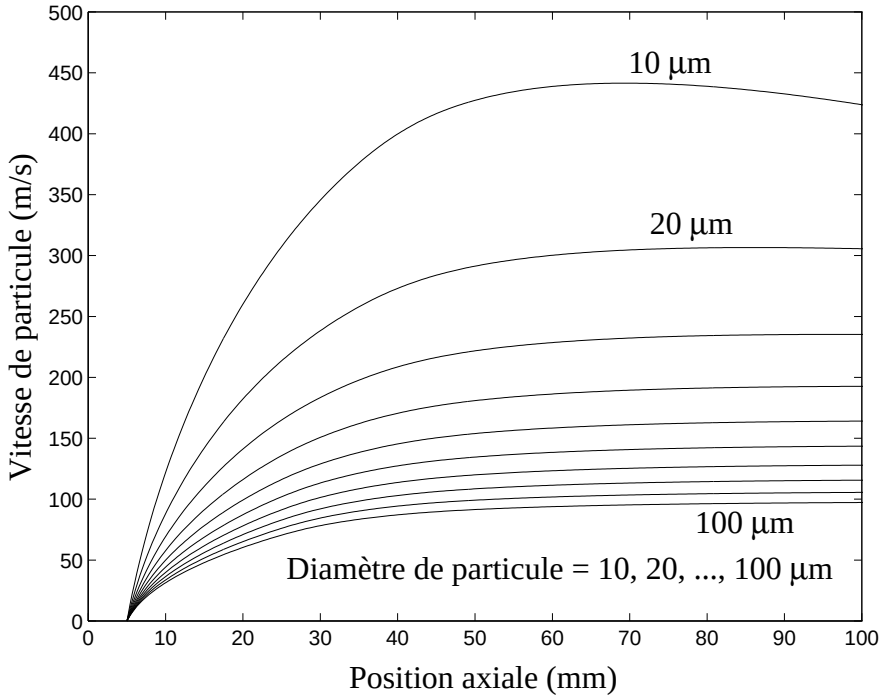


Figure 10 : *Evolution de la vitesse des particules en fonction de leur position axiale dans le jet (particules ayant suivi les trajectoires de la figure précédente).*

La Figure 11 présente les évolutions des températures de particule le long de ces mêmes trajectoires. Les particules subissent deux paliers correspondant à leur température de fusion et de vaporisation. Comme pour l'évolution de la vitesse, ce sont les plus petites particules qui subissent l'échauffement le plus rapide. On voit que les particules sont rapidement portées à leur température de vaporisation dans le cœur du jet. Dès lors, l'échange thermique du jet vers la particule est utilisé pour vaporiser la particule et réduire son diamètre. Lors du refroidissement, les particules les plus petites sont celles qui se refroidissent le plus vite. Nous avons bien entendu vérifié que dans le cas d'une projection de fer, l'effet de gradient thermique entre la surface de la particule et son cœur peut être négligé.
Du fait de l'hypothèse simplifiée utilisée pour estimer la température de décomposition du fer (3143 K calculée suivant $\Delta G = 0$ pour la réaction $Fe_l = Fe_g$), le palier de température obtenu se situe à un niveau supérieur relativement à celui indiqué par les mesures (de l'ordre de 2600 K si l'on se fie totalement au DPV : Figure 5). Nous avons alors vérifié que les vitesses de particules calculées n'étaient que peu influencées par la température de décomposition supposée pour le fer.
L'influence du débit du gaz porteur peut également être mise en évidence. La Figure 12 présente par exemple l'influence de ce débit (qui modifie ici la vitesse d'injection des particules) pour des particules de 45µm (taille moyenne des particules). On observe que les particules qui possèdent la vitesse maximale aux deux distances considérées correspondent à un débit de gaz porteur de 2.5 et 3 l/min et sont observées à une position radiale de -2 mm à 80 mm et -3 mm à 100 mm. On peut ainsi suggérer que pour une projection quelconque, en modifiant le débit du gaz porteur de manière à observer le spot créé par l'impact des particules sur le substrat à -2 ou -3 mm selon la distance de

projection, les conditions qui permettent d'avoir une énergie cinétique maximale des particules lors de leur impact sont trouvées.

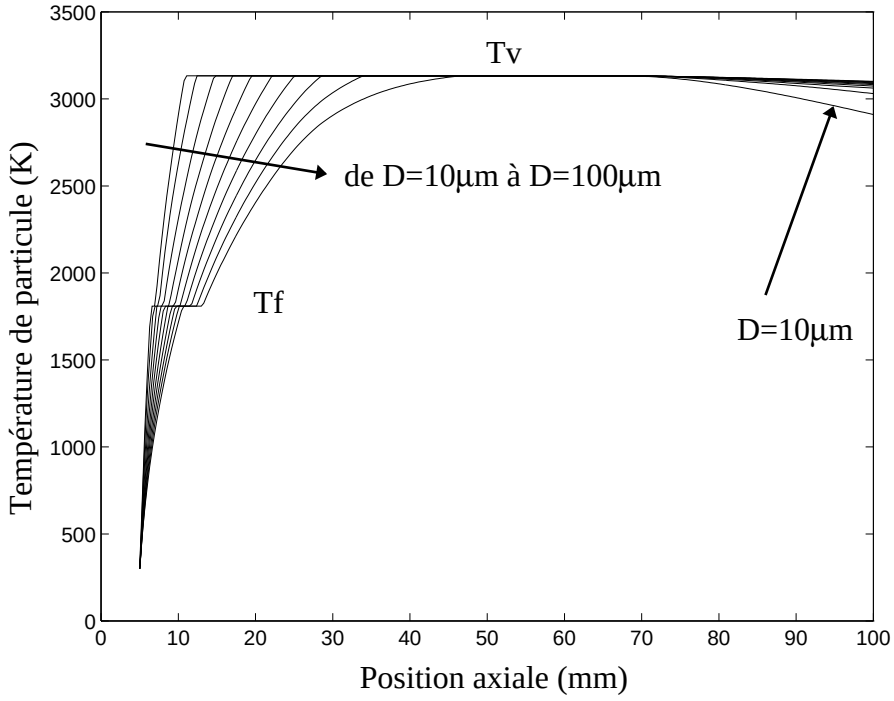


Figure 11 : *Evolution de la température des particules en fonction de leur position axiale dans le jet (particules ayant suivi les trajectoires de la figure précédente).*

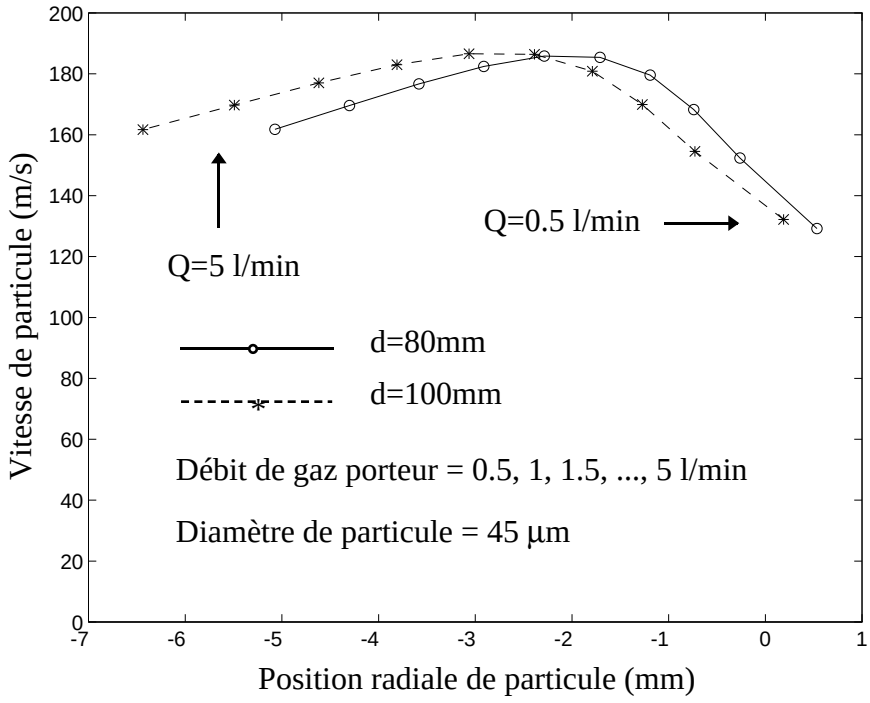


Figure 12 : *Vitesse de particule calculée suivant la vitesse moyenne du gaz porteur pour différents débits (allant de 0.5 à 5 l/min par pas de 0.5).*

Il est également intéressant de se rendre compte de l'influence de la vitesse initiale d'injection d'une particule sur sa trajectoire et sa vitesse en vol en fonction de son diamètre. Bien que nous ayons vu que l'utilisation d'un profil de vitesse parabolique dans l'injecteur soit peu appropriée, nous avons ici

utilisé cette hypothèse uniquement dans le but de créer différentes vitesses initiales de particules pour chaque diamètre. La Figure 13 présente les vitesses de particules en sortie d'injecteur calculées pour le débit de 1.8 l/min en considérant des particules soumises à une vitesse du gaz porteur donnée par

$$V_k = V_0\left(1 - k^2\right)$$

avec *k* variant de 0 à 0.9 par pas de 0.1 et où V_0 est la vitesse du gaz porteur à l'axe de l'injecteur (égale à deux fois sa vitesse de débit).

Notons que de par l'hypothèse réalisée ici, il est probable que nous surestimons cette fois la dispersion concernant les vitesses initiales de particules.

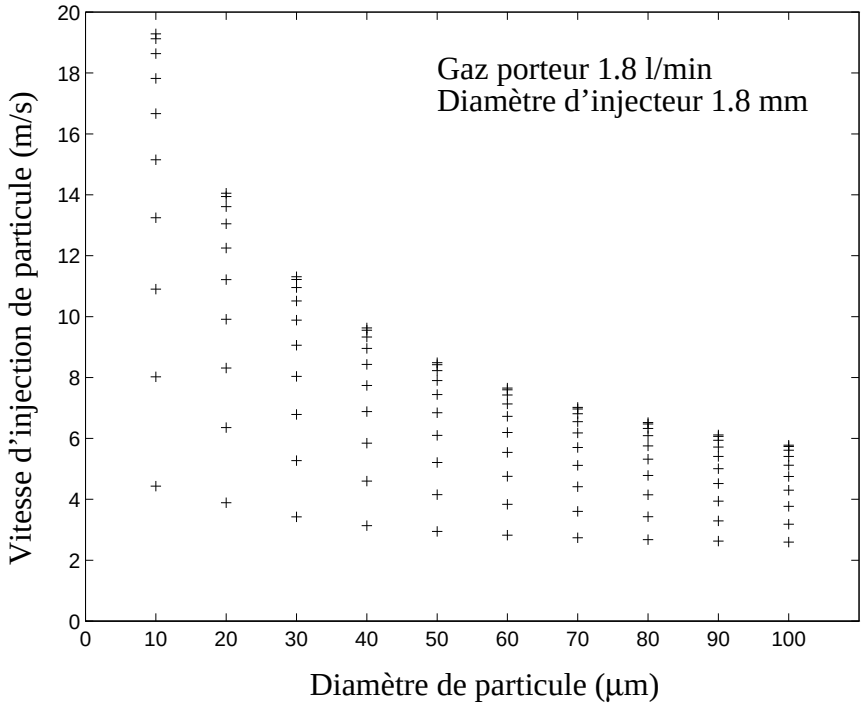


Figure 13 : *Vitesses d'injection de particules calculées suivant un profil parabolique de vitesse du gaz porteur dans l'injecteur.*

Les trajectoires de particules étant fortement sensibles à leur vitesse initiale, les positions radiales auxquelles les particules seront observées à une position axiale donnée sont influencées. La Figure 14 présente les positions radiales des particules vues à 100 mm pour chacune des vitesses initiales représentées sur la Figure 13. On note apparemment une dispersion plus importante pour les particules les plus grosses dans la mesure où les plus petites semblent avoir beaucoup de mal à pénétrer dans le jet quelle que soit leur vitesse initiale d'injection.

On note également que, hormis pour les plus petites particules, la totalité des autres semblent avoir franchi l'axe du jet pour la position axiale de 100 mm et par conséquent, seules les instabilités du jet de plasma non prises en compte ici peuvent expliquer le fait que le DPV détecte aussi des particules en y=+3mm (le nombre de ces particules étant néanmoins très faible.

La Figure 15 présente les vitesses des différentes particules vues à 100 mm. Contrairement à la Figure 14 où nous avons constaté une dispersion spatiale plus importante pour les plus grosses particules, les vitesses de particules sont cette fois beaucoup plus homogènes pour les particules les plus grosses que pour les particules les plus petites. Par conséquent, il est clair que l'incertitude sur

la vitesse des grosses particules est moindre et que ces particules devraient être observées à des vitesses proches quelle que soit la position du point de mesure. Cette remarque va dans le sens des mesures réalisées avec le DPV suivant lesquelles les vitesses des plus grosses particules dépendent peu de la position du volume de contrôle. De la même manière, le DPV confirme une dispersion plus importante des vitesses des petites particules.

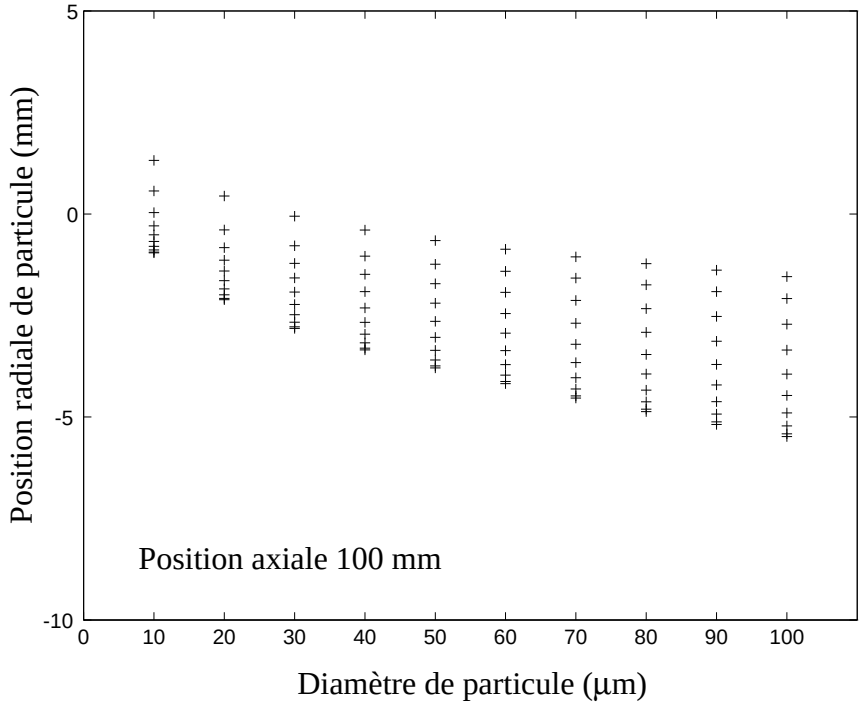


Figure 14 : *Positions radiales des particules vues à 100 mm suivant les vitesses d'injection indiquées sur la figure précédente.*

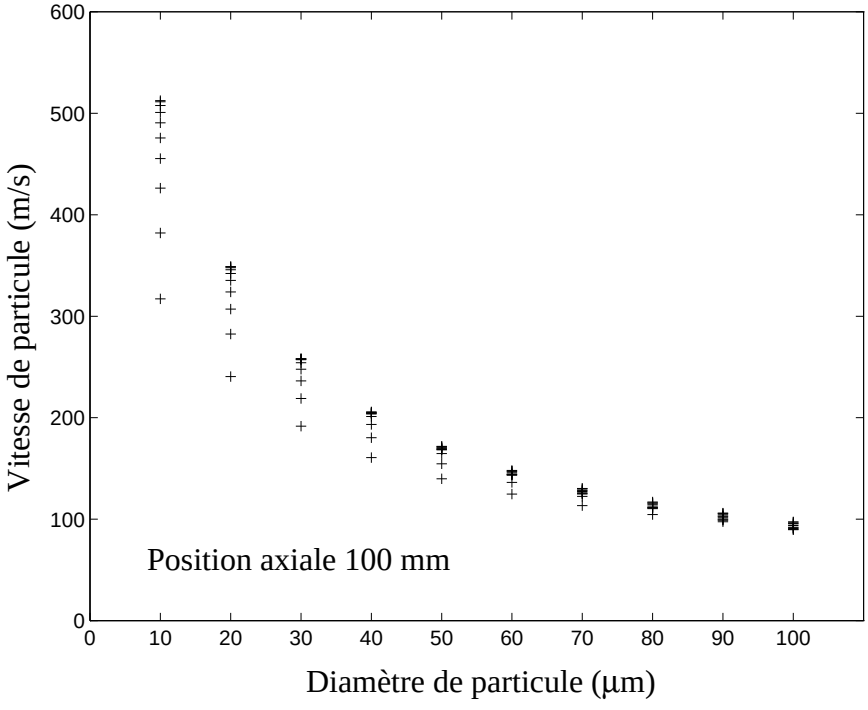


Figure 15 : *Vitesses des particules vues à 100 mm.*

Conclusion

A travers cet exemple, nous avons illustré les possibilités de simulation développées dans cette étude. L'importance de la prise en compte des conditions d'injection des particules dans le jet de plasma a été démontrée. Il demeure toujours une incertitude quant à la détermination du coefficient de traînée d'une particule et surtout du nombre de Nusselt. Au vu des comparaisons mesures/modèle, une incertitude subsiste quant à la vitesse des petites particules. Par contre, pour les plus gros diamètres, la différence entre vitesses mesurées et vitesses calculées est faible. La simulation permet de confirmer que lors de chaque projection, il doit exister un débit de gaz porteur qui permet d'optimiser la vitesse des particules lors de leur impact. Dans le cas traité, le critère de la trace d'une passe observée en y=-3mm à 100 mm correspond au critère de vitesse maximale pour le diamètre moyen de la poudre utilisée. Le choix du fer comme cas test limite les analyses possibles dans le sens où on ne sait pas à quoi imputer majoritairement la différence entre la simulation et les mesures. Le palier de température observé limite également les possibilités de comparaison mesure/modèle quant aux échanges thermiques. Dans le but de s'affranchir au mieux de ces difficultés, nous avons considéré un second cas : celui d'une céramique. La projection a été réalisée avec une poudre d'Ampérit® (Al_2O_3 97%; TiO_2 3%) fondue broyée. Au vu de la température de décomposition de l'alumine, l'effet de vaporisation sera moindre que pour le fer.

4.6. Exemple de la projection de la poudre d'alumine rutile

Si l'utilisation de l'alumine est préférable à l'utilisation d'une poudre de fer comme cas test, un problème supplémentaire est tout de même créé. En effet, il est courant de considérer que l'effet du gradient thermique au sein d'une particule doit être considéré dès que $\lambda_p / \overline{\lambda}_g < 30$ [13]. Or, au vu de la conductivité thermique de l'alumine, ce critère est largement dépassé, ce qui nécessite le couplage avec un modèle de calcul de la propagation de la chaleur en régime transitoire (au sein d'une particule).

4.6.1. Conduction en régime transitoire au sein d'une particule

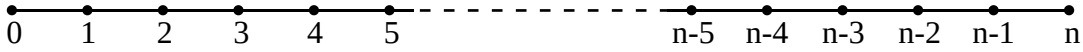
Il s'agit ici d'un problème 1D en régime transitoire. Plus par habitude liée à l'utilisation de PHOENICS™ que pour d'autres raisons, nous avons abordé le problème en terme de volumes finis. L'équation de propagation de la chaleur au sein d'une particule s'écrit en terme d'enthalpie

$$\rho \; S(r)\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\lambda}{Cp} S(r)\frac{\partial H}{\partial r}\right)$$

où ρ, Cp et k désignent la masse volumique, la chaleur spécifique et la conductivité thermique de la particule. Après discrétisation spatiale, il vient

$$\rho\frac{4}{3}\pi\left(r_{i+1/2}^3 - r_{i-1/2}^3\right)\frac{H_i^{t+dt} - H_i^t}{dt} = \left(H_{i+1} - H_i\right)\frac{4\pi r_{i+1/2}^2}{r_{i+1} - r_i}\frac{\lambda_{i+1/2}}{Cp_{i+1/2}} - \left(H_i - H_{i-1}\right)\frac{4\pi r_{i-1/2}^2}{r_i - r_{i-1}}\frac{\lambda_{i-1/2}}{Cp_{i-1/2}}$$

où l'indice i désigne le volume d'intégration (i variant de 0 à n) et i+1/2 désigne la position intermédiaire entre i et i+1.



L'équation ci-dessus peut être mise sous la forme

$$\rho v_i \frac{H_i^{t+dt} - H_i^t}{dt} = \left(H_{i+1} - H_i\right)\ a_{i+1/2} + \left(H_{i-1} - H_i\right)\ a_{i-1/2}$$

Équation 13 : *Discrétisation de l'équation de conduction au sein d'une particule.*

où les a_i sont définis positifs.

Ici $v_0 = 4/3\pi r_{1/2}^3$, $v_i = 4/3\pi\left(r_{i+1/2}^3 - r_{i-1/2}^3\right)$ et $v_n = 4/3\pi\left(r_n^3 - r_{n-1/2}^3\right)$

(on note que les cellules 0 et n sont en fait des demi volumes).

Volontairement, la notion de temps n'a pas été inclue dans le membre de droite de l'Équation 13. En effet, suivant le choix effectué, on aboutit à des schémas de discrétisation temporelle différents. Le schéma purement explicite est obtenu lorsque chaque *H* dans le membre de droite est prise au temps t. Si un tel choix est réalisé, les H_i^{t+dt} peuvent être calculées directement en fonction des H_i^t. Le schéma totalement implicite est obtenu lorsque chaque *H* dans le membre de droite est pris au temps t+dt. Contrairement au schéma explicite, un système d'équations tridiagonal doit alors être résolu à chaque itération pour obtenir les H_i^{t+dt} en fonction des H_i^t. Le schéma implicite présente cependant l'avantage de ne pas être théoriquement limité par la valeur du pas de temps. Entre ces deux schémas extrêmes, toutes les possibilités peuvent être envisagées. Le schéma de Crank-Nicholson constitue un schéma strictement intermédiaire aux deux cas précédents. Dans ce schéma, chaque *H* dans le membre de droite est prise comme étant la moyenne des *H* à t et des *H* à t+dt. Comme tous les schémas implicites, il nécessite cependant la résolution d'un système d'équations à chaque itération. Après avoir vérifié que les résultats obtenus avec le schéma implicite étaient identiques à ceux obtenus avec le schéma de Crank-Nicholson, nous avons choisi d'utiliser le schéma implicite. Toutefois, nous avons gardé la possibilité d'activer le schéma explicite ou celui de Crank-Nicholson par simple activation d'un booléen. Concernant la répartition des points du maillage, après divers essais, un pas radial constant a été conservé. Toutefois, un choix différent peut être réalisé simplement en utilisant un coefficient q différent de 0. En agissant ainsi, on aurait $dr(i) \propto i^q$. Pour q=0, on a donc un maillage à pas constant, pour q<0 un resserrement vers la surface de la particule et pour q>0 un resserrement vers le cœur.

Concernant les conditions aux limites, la condition de dérivée nulle au centre de la particule est obtenue en omettant $a_{i-1/2}$ en $i = 0$ dans l'Équation 13, ce qui correspond à $\left(H_{i-1} - H_i\right)\ a_{i-1/2} = 0$ pour ce point.

Pour l'échange thermique en surface de particule, $a_{i+1/2}$ est omis en $i = n$ et le terme d'échange

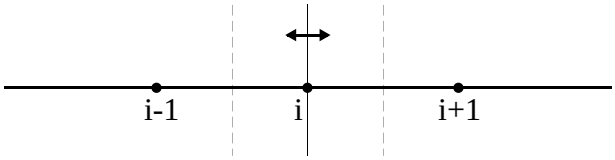
$$\alpha 4\pi r_n^2\left(T_g - T_n\right)$$

est ajouté dans le membre de droite (où α désigne le coefficient d'échange thermique calculé à partir du nombre de Nusselt).

Chaque matériau est caractérisé par cinq valeurs de son enthalpie. On note

- H0 l'enthalpie du matériau solide à 300K
- H1 l'enthalpie du matériau solide à la température de fusion
- H2 l'enthalpie du matériau liquide à la température de fusion
- H3 l'enthalpie du matériau liquide à température de vaporisation
- H4 l'enthalpie du matériau vaporisé à la température de vaporisation (ou de décomposition).

Concernant la propagation du front de fusion, différents auteurs utilisent un maillage mobile pour le prendre en compte [7]. Dans cette étude, une autre façon de procéder a été développée. Avant chaque itération, le front de fusion (s'il existe) se situe dans le volume i pour lequel $H1 < H_i < H2$. Le taux de fusion de ce volume est alors donné par $X_f = (H_i - H1)/(H2 - H1)$, qui permet de calculer la position exacte du front de fusion dans la cellule. Avant chaque itération, différentes modifications doivent être apportées aux équations pour le volume i concerné par le front de fusion et ses voisins de par et d'autre. Pour ce faire, le nœud i concerné est déplacé à la position du front de fusion jusqu'à mi-distance par rapport à i-1 ou mi-distance par rapport à i+1.



Coté solide (coté i-1), le second terme du membre de droite de l'Équation 13

$$(H_i - H_{i-1})\frac{4\pi r_{i-1/2}^2}{r_i - r_{i-1}}\frac{\lambda_{i-1/2}}{Cp_{i-1/2}}$$

est remplacé par

$$(H1 - H_{i-1})\frac{4\pi\left(\frac{r_f + r_{i-1}}{2}\right)^2}{r_f - r_{i-1}}\frac{\lambda_{i-1/2}}{Cp_{i-1/2}}$$

Coté liquide (coté i+1), le premier terme du membre de droite de l'Équation 13

$$(H_{i+1} - H_i)\frac{4\pi r_{i+1/2}^2}{r_{i+1} - r_i}\frac{\lambda_{i+1/2}}{Cp_{i+1/2}}$$

est remplacé par

$$(H_{i+1} - H2)\frac{4\pi\left(\frac{r_f + r_{i+1}}{2}\right)^2}{r_{i+1} - r_f}\frac{\lambda_{i+1/2}}{Cp_{i+1/2}}$$

Pour le volume i-1 (solide), le premier terme du membre de droite est remplacé de manière similaire au second terme du membre de droite pour le volume i. Pour le volume i+1 (liquide), le second terme du membre de droite est remplacé de manière similaire au premier terme du membre de droite pour le volume i.

Une fois ces modifications réalisées, le système assemblé contient 2 zéros supplémentaires (sur la partie tridiagonale) et, dans le cas d'un schéma implicite, il se présente sous la forme

$$\begin{matrix} -a_{i-2} & \rho v_{i-1}/dt + a_{i-2} + a_{i-1}^{*} & \mathbf{0} & 0 & 0 & \rho v_{i-1} H_{i-1}^{t}/dt + a_{i-1}^{*} H1 \\ 0 & -a_{i-1}^{*} & \rho v_i/dt & -a_i^{*} & 0 & \rho v_i H_i^{t}/dt - a_{i-1}^{*} H1 - a_i^{*} H2 \\ 0 & 0 & \mathbf{0} & \rho v_{i+1}/dt + a_i^{*} + a_{i+1} & -a_{i+1} & \rho v_{i+1} H_{i+1}^{t}/dt + a_i^{*} H2 \end{matrix}$$

L'exposant * indique qu'il s'agit d'un coefficient modifié.

Les cinq premières colonnes représentent la portion de la matrice tridiagonale concernée par le front de fusion alors que la sixième représente le second membre associé à chaque ligne (les inconnues du système étant les H_i^{t+dt}).

Cette façon de procéder (seul le front de fusion est mobile) permet d'éviter la gestion d'un maillage entièrement mobile et de diminuer le nombre d'opérations à réaliser lors de chaque itération. Toutefois, ceci est rendu possible par le seul fait que le problème est traité en terme d'enthalpie plutôt qu'en terme de température. On remarque que l'équation du nœud i correspond à l'équation de propagation du front de fusion.

Un ordre de grandeur du pas de temps à utiliser peut être obtenu par $\Delta t = \frac{\rho Cp (dr)^2}{20\ \lambda}$

Si l'on compare l'ordre de grandeur de ce pas de temps à celui qu'il est possible d'utiliser pour le calcul du mouvement, il s'avère qu'il est souvent largement inférieur. Dans le but de ne pas être obligé de diminuer le pas de temps utilisé pour le calcul du mouvement (qui mène déjà à un nombre de points de l'ordre de 4000 le long d'une trajectoire d'une quinzaine de centimètres), il a été choisi de le diviser en sous pas utilisables pour le calcul de la conduction interne. Quel que soit le cas traité, la prise en compte de la conduction interne mène à des temps de calcul largement supérieurs à ceux requis pour le modèle de l'échauffement en bloc.

4.6.2. Les propriétés de l'Ampérit proches de celles de l'alumine

Le cas que nous nous proposons d'analyser concerne la projection d'une poudre d'Ampérit® (Al2O3 97% /TiO2 3%) de granulométrie +5-45 μm et de taille moyenne 26 μm. Au vu de la composition de cette poudre, nous avons considéré en première approximation que ses propriétés sont équivalentes à celles de l'alumine pure. A partir d'une étude de la décomposition de l'alumine sous un plasma d'argon généré par induction, Borgianni & al [11] ont déterminé une température de décomposition de 3240K et ont suggéré une enthalpie de décomposition de 24.66 $MJ.kg^{-1}$. Dans le cas d'un plasma d'argon/hydrogène généré par arc électrique, Vardelle [6] suggère une température de décomposition supérieure (3800K) et conserve une valeur identique de l'enthalpie de décomposition. Dans cette étude, nous avons conservé une température de décomposition de 3800K (plus proche de la valeur de 4000 K correspondant à une température de décomposition théorique si l'influence de l'environnement est négligée) et nous avons utilisé la composition chimique à l'équilibre de la vapeur d'alumine à 3800K pour définir l'enthalpie de décomposition à cette température. Les tables JANAF [20] ont été utilisées concernant la détermination des propriétés de chacune des espèces créées lors de la décomposition. La Figure 16 présente l'évolution de la

composition chimique de la vapeur d'alumine entre 3800K et 14000K. Comme pour le fer, les tables ont été extrapolées au delà de 6000K.

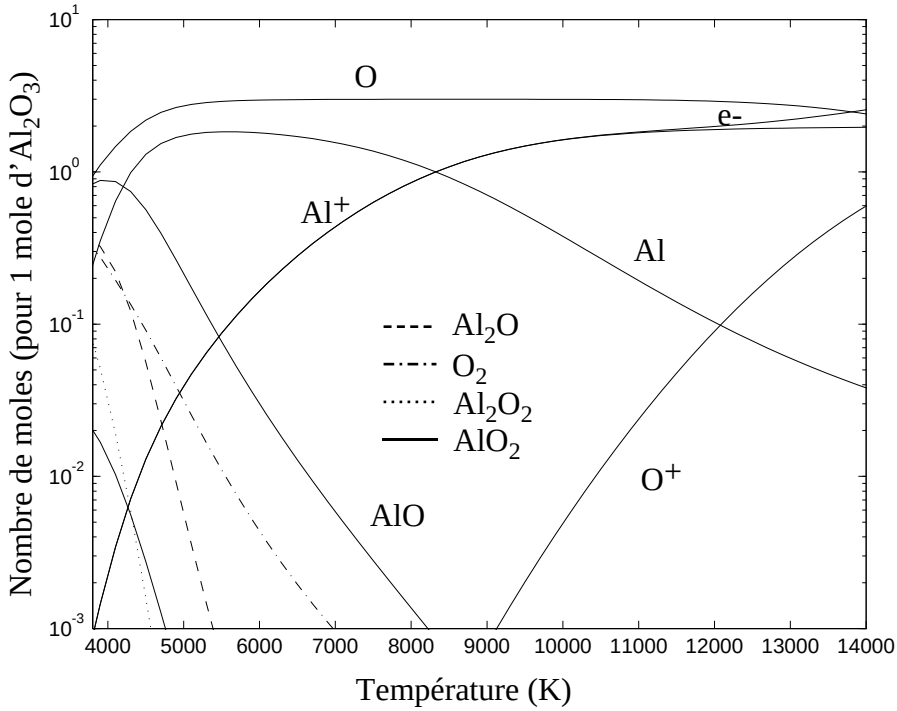


Figure 16 : *Evolution de la composition chimique de la vapeur d'alumine.*

On voit que les espèces majoritairement créées à 3800K sont 0 et AlO mais que de nombreuses autres espèces sont également présentes en quantités non négligeables. A partir de ces données, nous aboutissons finalement à une enthalpie de décomposition de l'alumine égale à 16.49 $MJ.kg^{-1}$ à 3800K ce qui est significativement inférieur à la valeur suggérée par Borgianni & al. La Figure 17 présente l'évolution de l'enthalpie de la vapeur d'alumine entre 3800 et 14000 K calculée suivant la composition de la

Figure 16.

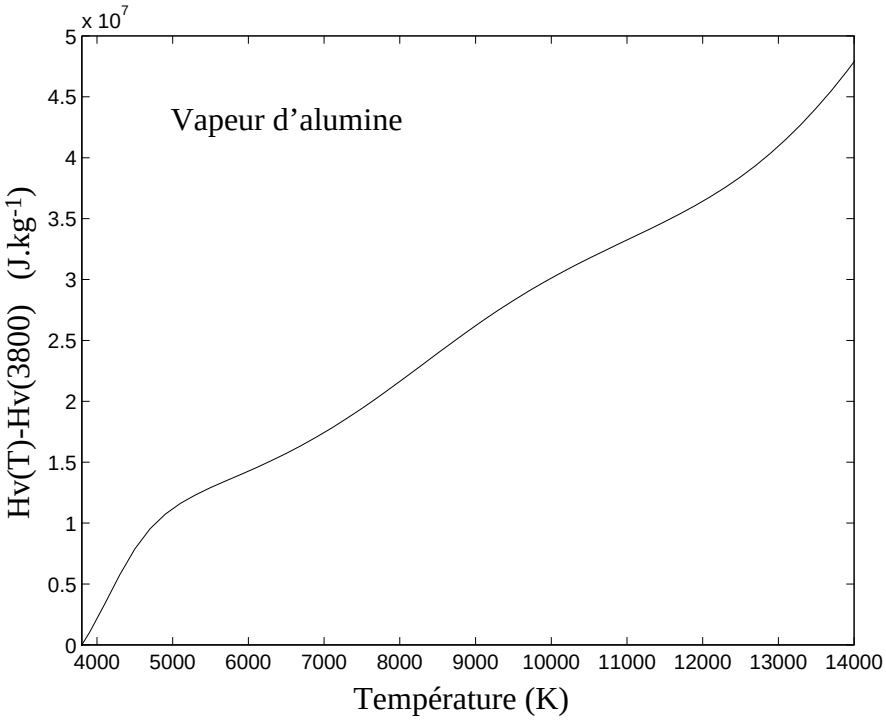


Figure 17 : *Elévation de l'enthalpie de la vapeur d'alumine à partir de 3800 K en fonction de la température.*

A partir de l'évolution de l'enthalpie de la vapeur d'alumine et de son enthalpie de décomposition, il est possible de déterminer l'importance de l'effet de vaporisation sur la diminution du flux transmis en présence d'évaporation. La Figure 19 présente donc cet effet en fonction de la température si la relation utilisée par Johnston & al [10] ou Borgianni & al. [11] est conservée pour le représenter.

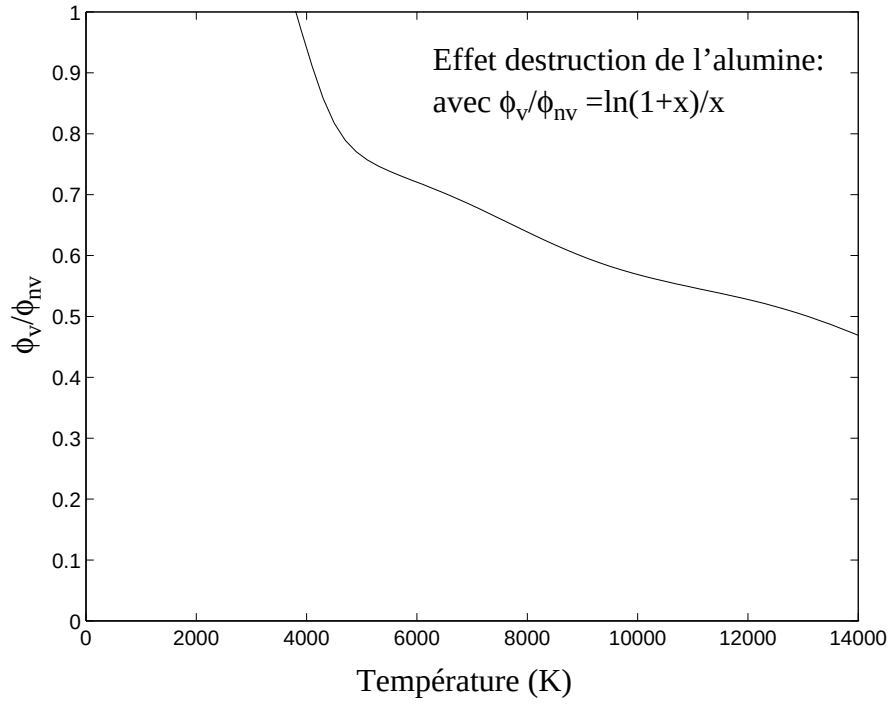


Figure 19 : *Effet de vaporisation sur la diminution du flux thermique transmis à une particule d'alumine en fonction de la température (suivant l'équation 12).*

Dans la mesure où nous avons considéré une enthalpie de décomposition plus faible que celle utilisée par Borgianni & al, nous obtenons bien entendu une correction plus importante. En effet, alors que Borgianni & al. aboutissent à un coefficient de 0.7 à 9000K, nous obtenons une correction plus proche de 0.6 à cette même température.

Nous avons considéré une chaleur spécifique moyenne de l'alumine sous forme solide entre 300 K et 2327 K (température de fusion) et de l'alumine liquide entre 2327K et 3800K. Ainsi les valeurs de 1252 $J.kg^{-1}.K^{-1}$ et 1419 $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ont respectivement été utilisées pour les phases solide et liquide. Toujours suivant les tables JANAF, une chaleur latente de fusion de 1.065 $MJ.kg^{-1}$ a été considérée (valeur également utilisée par Vardelle [6]) alors qu'une masse volumique de 3900 $kg.m^{-3}$ a été utilisée. Concernant l'émissivité, nous avons également considéré les valeurs suggérées par Vardelle suivant lesquelles une transition apparaît au moment de la fusion (passage de 0.3 à 0.9). Toutes ces données ont été notamment reprises par Nylén [21]. Enfin concernant la conductivité thermique, elle diminue de 36 $W.m^{-1}.K^{-1}$ à 300K à environ 7.4 $W.m^{-1}.K^{-1}$ à 1000K et 5.5 $W.m^{-1}.K^{-1}$ à 2000K (Techniques de l'ingénieur). Finalement, en première approximation, une valeur moyenne de 6.3 $W.m^{-1}.K^{-1}$ à été utilisée [15].

4.6.3. Mesures expérimentales

Une torche F4 de diamètre 6 mm a été utilisée pour la projection avec des débits de 40 l/min d'argon pour 10 l/min d'hydrogène et une intensité de courant de 500A menant à une tension de 60V et un rendement estimé de 62%. Concernant les conditions d'injection de la poudre, un débit de gaz porteur (argon) de 3.4 l/min a été utilisé avec un injecteur de diamètre 1.8 mm.

Pour une position axiale donnée, la position verticale où le flux maximal de particules est observé constitue le point d'auto-centrage du DPV. Les mesures ont été réalisées pour 4 positions axiales différentes (60, 80, 100 et 120 mm). Le point d'auto-centrage est passé d'une position verticale de -1 mm à 60 mm à une position de -3 mm à 100 et 120 mm, ce qui indique une pénétration tout à fait correcte des particules dans le jet de plasma. Toutefois, le point d'auto-centrage ne correspond pas forcément à l'endroit où la mesure statistique est réalisée sur un maximum de particules. En effet, plus le flux de particules est important, plus la probabilité de superposition de signaux émis par différentes particules augmente, si bien que la part des signaux réellement pris en compte pour la mesure statistique diminue avec le flux de particules.

Au vu de la gamme des vitesses mesurées au point d'auto-centrage (de 250 à 280 m/s pour les particules de 30 μm et plus quelle que soit la position axiale), il est fort probable qu'une part importante des particules les plus petites aient possédé une vitesse supérieure à 400 m/s. La frange utilisée lors des expérimentations ne permettant pas des mesures de vitesse supérieures à cette limite, nous ne prendrons donc pas en compte les particules de taille inférieure à 30 μm. Cette remarque est d'ailleurs en accord avec le fait que le nombre de particules ayant servi à la mesure statistique diminue brusquement en dessous de 20 μm quelle que soit la position axiale (ce qui indique un rejet important et donc une moyenne non représentative).

Concernant les mesures de température, une influence faible de la position axiale dans le jet a été observée, la température des particules de taille supérieure ou égale à 30 μm variant faiblement autour de 2600 K quelle que soit la position axiale.

4.6.4. Corrélations pour Cd et Nu

Après avoir testé des corrélations identiques à celles utilisées pour le fer, nous avons observé une bonne concordance avec les mesures de vitesse pour les particules de taille supérieure ou égale à 30 μm mais une concordance moins bonne pour la température. En effet, si les calculs ont permis de déterminer des vitesses de particules variant de 250 m/s à 350 m/s pour les particules de taille supérieure à 30 μm, nous avons observé que les températures de surface de particules calculées étaient significativement supérieures à celles mesurées (typiquement 800 K de différence).
Dans un second temps, nous avons donc testé l'utilisation des corrélations suggérées par Huang & al [4] également décrites dans cette étude. Si la bonne concordance avec les mesures de vitesse a été conservée, nous avons cette fois observé une sous-estimation de la température de surface des particules relativement aux mesures. Au vu des résultats obtenus aussi bien pour la projection de fer que pour la projection d'alumine, les prédictions de vitesse sont tout à fait correctes, au contraire des températures de surface.
Après avoir réfléchi à la cause de cette large incertitude concernant les températures, nous suggérons qu'il est nécessaire d'aborder les échanges thermiques jet/particules en des termes différents.
Suivant Stokes ($\mathrm{Re} < 0.2$), il vient

$$m\frac{d\vec{V}_p}{dt} = 12\frac{\mu A}{d}\left(\vec{V}_g - \vec{V}_p\right)$$

alors que dans la région de Newton ($500 < \mathrm{Re} < 200000$), le coefficient de traînée ne varie que peu

$$m\frac{d\vec{V}_p}{dt} = Cd\ \ A\ \frac{1}{2}\rho_\infty\left\|\vec{V}_g - \vec{V}_p\right\|\left(\vec{V}_g - \vec{V}_p\right) \quad \text{avec} \quad Cd \approx 0.44$$

Par conséquent, à bas Reynolds, l'accélération d'une particule est indépendante de la masse volumique du fluide qui l'entraîne et ce sont les échanges visqueux dans la couche limite de la particule qui importent. Par contre, à plus haut Reynolds, l'accélération d'une particule devient indépendante de la viscosité du milieu et c'est la masse volumique du milieu non perturbé qui importe alors.
Nous suggérons donc que les échanges dynamiques et thermiques entre un écoulement et une particule font intervenir deux contributions distinctes de type

$$m_p\frac{d\phi_p}{dt} = A\left[\frac{C_\phi\overline{\Gamma}_\phi}{d} + \rho_\infty\left\|\vec{V}_g - \vec{V}_p\right\| f_\phi(\mathrm{Re},\mathrm{Pr})\right]\left(\phi_g - \phi_p\right)$$

Équation 14 : *Formulation générales des échanges jet/particules.*

où ϕ_p représente successivement chacune des deux composantes de vitesse de la particule ou l'enthalpie de la particule, ϕ_g est la grandeur en question liée à l'écoulement, Γ_ϕ est le coefficient

d'échange associé à la grandeur ϕ, C_ϕ est une constante et f_ϕ une fonction du nombre de Reynolds pour les composantes de vitesse et des nombres de Reynolds et de Prandtl pour l'enthalpie.

D'un point de vue physique, le premier terme du membre de droite de l'équation précédente correspond au terme de diffusion dominant à bas Reynolds alors que le second terme correspond au terme de convection dominant à haut Reynolds. On note que le second terme est proportionnel à la quantité de fluide qui entrerait dans la zone de la particule si celle-ci n'était pas présente.

En identifiant, il vient

$$C_v = 12$$

si *v* est une composante de vitesse et

$$C_h = 8$$

si *h* est l'enthalpie (la surface externe d'une particule sphérique étant égale à quatre fois son maître couple *A*).

Concernant les termes de diffusion, nous suggérons de conserver l'utilisation des propriétés intégrées entre la température de surface et la température de l'écoulement. Ainsi

$$\overline{\Gamma}_v = \overline{\mu}_{Tp}^{Tg} \quad \text{et} \quad \overline{\Gamma}_h = \overline{\lambda}_{Tp}^{Tg} \Big/ \overline{C}_{p\,Tp}^{\,Tg}$$

La valeur $Cd = 0.44$ à haut Reynolds correspond à

$$f_v(\mathrm{Re}) = Cd/2 = 0.22$$

alors que pour la corrélation de Schiller et Naumann, il vient

$$f_v(\mathrm{Re}) = 1.8/\mathrm{Re}^{0.313}$$

Pour l'enthalpie, dans le but de conserver un bon accord avec la relation de Ranz-Marshall, il vient

$$f_h(\mathrm{Re},\mathrm{Pr}) = 2.4/\left(\mathrm{Re}^{0.5}\,\mathrm{Pr}^{2/3}\right)$$

Finalement, nous suggérons

$$\rho_p \frac{d\vec{V}_p}{dt} = \left[\frac{18\overline{\mu}}{d^2} + \frac{\rho_\infty}{d}\left\|\vec{V}_g - \vec{V}_p\right\|\left(\frac{2.7}{\mathrm{Re}^{0.313}}\right)\right]\left(\vec{V}_g - \vec{V}_p\right)$$

(La corrélation de Schiller et Naumann est conservée).

et

$$\rho_p \frac{dh_p}{dt} = \left[\frac{12}{d^2}\frac{\overline{\lambda}}{\overline{C}_p} + \frac{\rho_\infty}{d}\left\|\vec{V}_g - \vec{V}_p\right\|\left(\frac{3.6}{\mathrm{Re}^{0.5}\,\mathrm{Pr}^{2/3}}\right)\right]\left(h_g - h_p\right)$$

(La corrélation de Ranz-Marshall est conservée).

et nous continuons à évaluer les nombres de Reynolds et Prandtl en fonction des propriétés intégrées :

$$\mathrm{Re} = \frac{\overline{\rho}\left\|\vec{V}_g - \vec{V}_p\right\| d}{\overline{\mu}} \quad \text{et} \quad \mathrm{Pr} = \frac{\overline{\mu}\overline{C}_p}{\overline{\lambda}}$$

En terme de coefficient de traînée, il vient

$$Cd = \frac{24\overline{\mu}}{d\left\|\vec{V}_g - \vec{V}_p\right\|}\frac{1}{\rho_\infty} + \left(\frac{3.6}{\mathrm{Re}^{0.313}}\right) = \frac{24}{\mathrm{Re}}\left(\frac{\overline{\rho}}{\rho_\infty} + 0.15\,\mathrm{Re}^{0.687}\right)$$

Équation 15 : *Corrélation suggérée pour le coefficient de traînée*

avec

$$\vec{F} = Cd \;\; A \; \frac{1}{2}\rho_\infty \left\| \vec{V}_g - \vec{V}_p \right\| \left(\vec{V}_g - \vec{V}_p \right)$$

C'est à dire une expression du coefficient de traînée strictement équivalente à celle utilisée précédemment.

Pour le nombre de Nusselt, il vient

$$Nu = \left\lceil 2 + \rho_\infty d \frac{\overline{C}_p}{\overline{\lambda}} \left\| \vec{V}_g - \vec{V}_p \right\| \left(\frac{0.6}{\mathrm{Re}^{0.5}\,\mathrm{Pr}^{2/3}} \right) \right\rceil = \left\lceil 2 + 0.6 \left(\frac{\rho_\infty}{\overline{\rho}} \right) \mathrm{Re}^{0.5}\,\mathrm{Pr}^{1/3} \right\rceil$$

Équation 16 : *Corrélation suggérée pour le nombre de Nusselt.*

où

$$Nu = \frac{\alpha \;\; d}{\overline{\lambda}}$$

α étant le coefficient d'échange.

C'est à dire un nombre de Nusselt différent de celui utilisé précédemment dans le sens où le coefficient multiplicateur $\rho_\infty / \overline{\rho}$ n'apparaissait pas.

Nous suggérons donc que l'Équation 15 peut être utilisée pour représenter l'effet du gradient thermique existant dans la couche limite en surface de particule sur le coefficient de traînée et que l'Équation 16 peut être utilisée pour représenter ce même effet sur le nombre de Nusselt. Il s'agit ainsi de versions modifiées de la corrélation de Ranz-Marshall pour le nombre de Nusselt et de la formulation de Schiller et Naumann pour le coefficient de traînée.

- Si l'on revient à la formulation générale des échanges jet/particule suggérée dans l'Équation 14, l'oubli de la correction suggérée pour le nombre de Nusselt (Équation 16) équivaudrait à considérer que la masse de fluide qui traverse une section équivalente à celle de la particule est proportionnelle à

$$\overline{\rho} A \left\| \vec{V}_g - \vec{V}_p \right\| \quad \text{au lieu de} \quad \rho_\infty A \left\| \vec{V}_g - \vec{V}_p \right\|$$

Intuitivement, il est beaucoup plus compréhensible de dire que l'échange par convection est proportionnel à $\rho_\infty A \left\| \vec{V}_g - \vec{V}_p \right\|$, ce qui est d'ailleurs couramment utilisé par les différents auteurs concernant les équations de quantité de mouvement.

- De manière identique, l'oubli de la correction suggérée pour le coefficient de traînée (Équation 15), correspondrait à l'utilisation d'une accélération de la particule proportionnelle à

$$\frac{18\overline{\mu}}{d^2}\left(\frac{\rho_\infty}{\overline{\rho}} \right) \quad \text{au lieu de} \quad \frac{18\overline{\mu}}{d^2}$$

à bas Reynolds.

Or nous avons vu que l'accélération d'une particule est indépendante de la masse volumique du fluide à bas Reynolds.

En accord avec les corrections utilisées par Huang & al. [4], les corrections que nous suggérons ici ont tendance à augmenter le coefficient de traînée et à diminuer les échanges thermiques. Toutefois, la correction que nous apportons au coefficient de traînée concerne uniquement le terme de

diffusion alors que celle effectuée sur le nombre de Nusselt concerne uniquement le terme de convection. Par conséquent, sans aucun mouvement relatif entre la particule et l'écoulement (conduction pure), le flux thermique transmis à la particule reste proportionnel à $\overline{\lambda}$ uniquement (suivant notre suggestion) alors que la masse volumique du gaz environnant intervient si la corrélation de Huang est utilisée.

Par souci de simplicité, les propriétés du fluide à la température du film pourraient être préférées aux propriétés intégrées lors de l'évaluation des nombres de Reynolds et de Prandtl. Dans ce cas, nous suggérons de remplacer la correction $(\overline{\rho}/\rho_\infty)$ par (ρ_f/ρ_∞) (où l'indice f correspond à la température du film).

Pour conclure, nous souhaitons faire remarquer que la correction suggérée pour le nombre de Nusselt apparait immédiatement si les échanges thermiques sont abordés en utilisant le nombre Stanton plutôt que de Nusselt.

Les corrections que nous suggérons ne représentent que l'effet du gradient thermique en surface de particule. Ainsi, les corrections à apporter pour représenter l'effet Knudsen et l'effet de vaporisation doivent aussi être maintenues.

4.6.5. Résultats numériques

Les résultats présentés correspondent à l'utilisation de l'Équation 15 et de l'Équation 16. Les effets Knudsen et de vaporisation sont pris en compte de la même manière que précédemment (corrélations de Chen et al.), l'effet de vaporisation sur le coefficient de traînée n'étant pas considéré. Comme pour le cas du fer, un ordre de grandeur des vitesses de particules en sortie d'injecteur peut être obtenu en calculant l'accélération des particules soumises à la vitesse moyenne du gaz porteur dans l'injecteur. On obtient ainsi une vitesse moyenne d'injection des particules dans le jet en fonction du diamètre de particule. La Figure 20 présente les trajectoires de particules injectées dans le jet suivant cette vitesse moyenne estimée pour différents diamètres. Cette figure permet de visualiser la pénétration des particules dans le jet. Elle est en accord avec les positions d'auto-centrage du DPV (y=-1 mm à 60 mm et y=-3 mm à 100 mm).

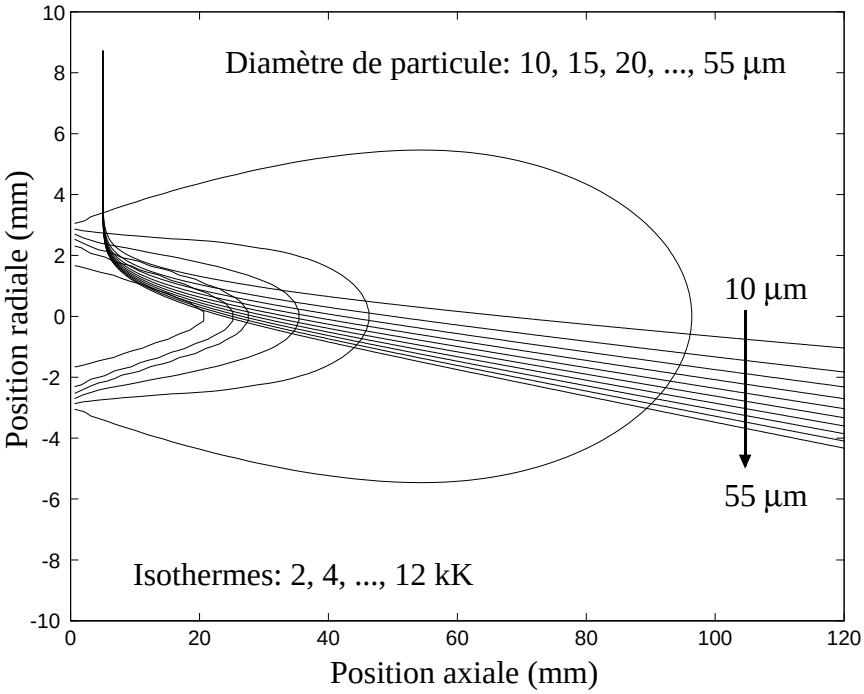


Figure 20 : *Trajectoires de particules d'alumine injectées avec des vitesses moyennes déterminées suivant l'accélération des particules dans l'injecteur pour chaque diamètre.*

La Figure 21 présente l'évolution des vitesses des particules ayant suivi les trajectoires de la Figure 20. Comme nous l'avons déjà souligné, il semble que les particules les plus petites soient rapidement accélérées à une vitesse telle que leur analyse par le DPV n'est plus fiable (vitesses fiables en deçà de 400 m/s). Si nous comparons les vitesses calculées des particules d'alumine à celles des particules de fer (Figure 10), nous constatons que les particules d'alumine sont plus accélérées que les particules de fer quel que soit leur diamètre. Par exemple, alors que la particule de fer de 30 µm est accélérée jusqu'à 240 m/s (Figure 10), celle d'alumine atteint 330 m/s environ. Il s'agit ici de l'influence de la masse volumique du matériau. Les particules de taille supérieure à 30 µm sont observées à l'aide du DPV à des vitesses moyennes variant de 250 à 280 m/s quelle que soit la position axiale. Suivant le modèle numérique, les particules de tailles 30 et 50 µm sont accélérées jusqu'à atteindre des vitesses de 330 m/s et 220 m/s respectivement. Conformément aux mesures, les vitesses calculées évoluent peu entre 60 mm et 120 mm. On peut dire qu'à 60 mm, l'accélération des particules est terminée et qu'un palier est atteint.

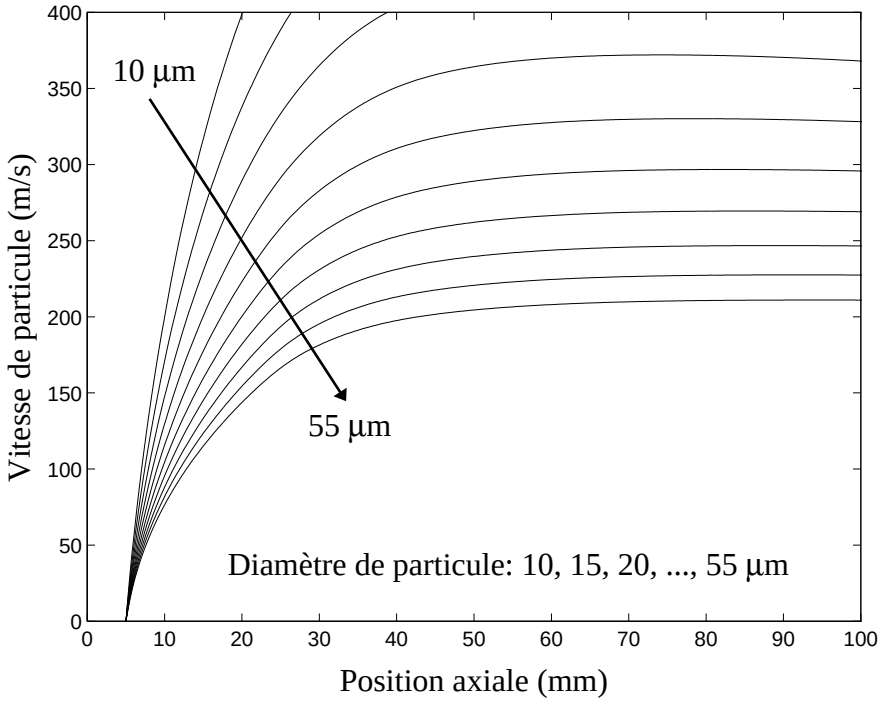


Figure 21 : *Evolution des vitesses des particules ayant suivi les trajectoires de la Figure 20.*

La Figure 22 présente l'évolution des températures de surface des particules ayant suivi les trajectoires de la Figure 20. Expérimentalement, les particules de taille supérieure à 30 µm sont observées à une température moyenne de 2600 K quelle que soit leur position axiale. Suivant le modèle, les particules de 30 µm et 40 µm possèdent une température de surface d'environ 2900 K et 2500 K respectivement. Là aussi, la corrélation entre mesures et modèle semble donc être correcte. Comme pour la vitesse, un palier de température est atteint quel que soit le diamètre de particule. Pour les particules les plus grosses, la température de surface calculée est très voisine de la température de fusion de l'alumine, ce qui indique que de plus grosses particules seraient sans doute difficilement fondues avec les paramètres utilisés ici.

Sur la Figure 22, seules les températures de surface de particules sont représentées. Afin de mettre en évidence la nécessité du calcul prenant en compte la conduction de la chaleur et la propagation du front de fusion au sein de la particule, la Figure 23 présente à la fois la température de surface et la température de cœur pour trois particules de taille différente. On observe que pour la particule de 10 µm, le front de fusion progresse rapidement jusqu'au centre de la particule. Pour les particules de diamètre supérieur, le front de fusion atteint le cœur de la particule beaucoup plus tard. Ces particules subissent alors des gradients thermiques importants sur une distance relativement longue. Par exemple, si la température de surface de la particule de 40 µm dépasse rapidement le point de fusion du matériau (quasiment dès son injection dans le jet), le front de fusion ne pénètre jusqu'au cœur de la particule qu'à une distance supérieure à 60 mm. Toutefois, le modèle indique que cette particule devrait être complètement fondue lors de son impact sur le substrat généralement situé à une distance supérieure. La distance à partir de laquelle le front de fusion atteint le cœur de particule augmente avec le diamètre. Des particules de taille supérieure ou égale à 50 µm ne seraient que

partiellement fondues. On remarque qu'à partir d'une certaine distance, une inversion s'effectue et la température de cœur d'une particule devient supérieure à sa température de surface (phase de refroidissement).

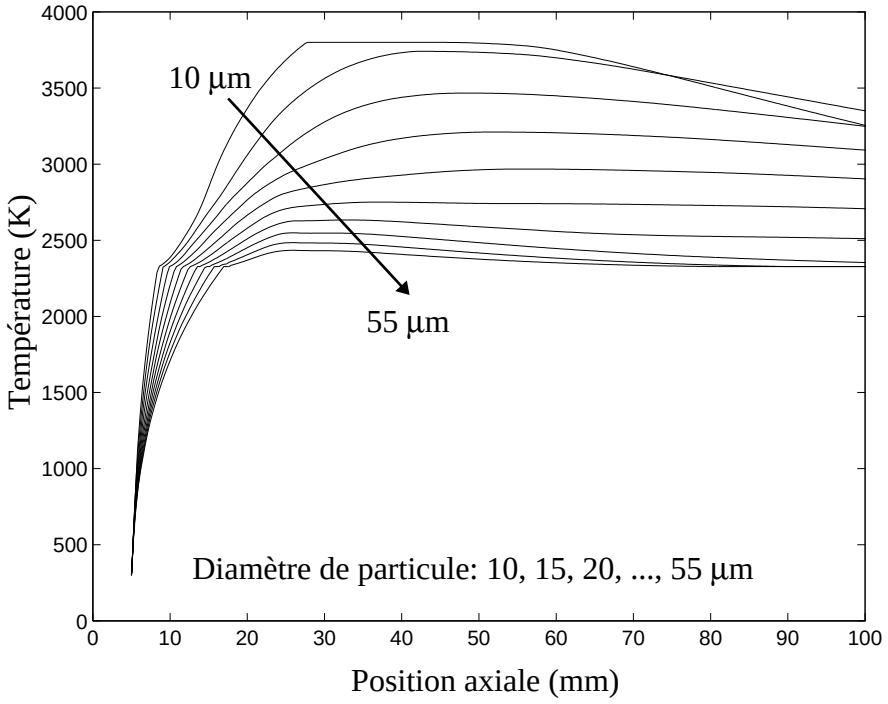


Figure 22 : *Evolution des températures de surface des particules ayant suivi les trajectoires de la Figure 20.*

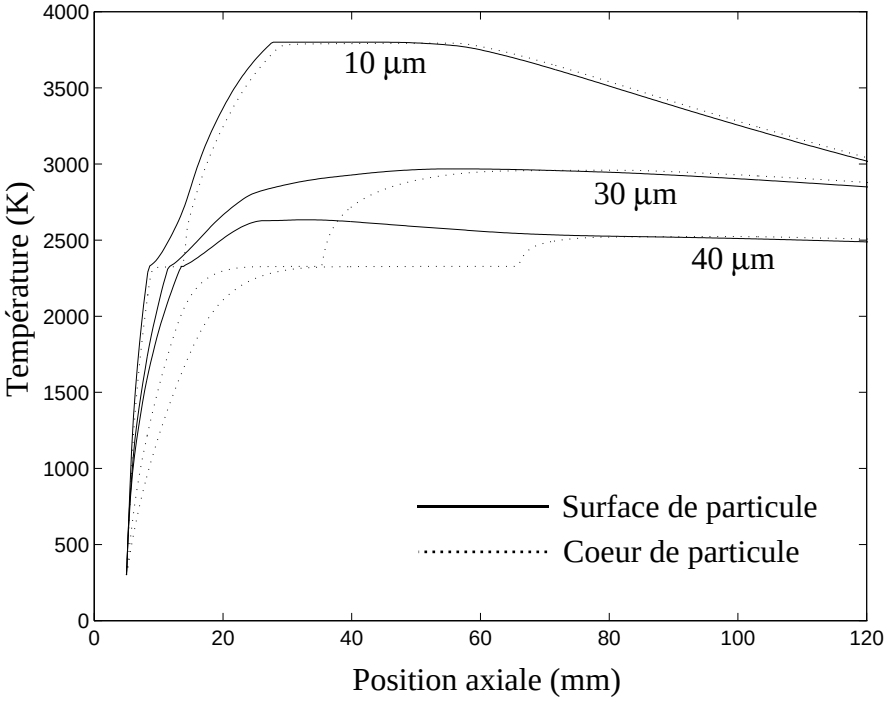


Figure 23 : *Evolution des températures de surface et de cœur des particules de diamètre 10, 30 et 40 µm.*

La Figure 24 présente le profil interne de température de la particule de 40 μm à différentes positions axiales le long de sa trajectoire. Tout au long de celle-ci, le front de fusion progresse est arrive au centre de la particule entre les positions axiales de 60 et 70 mm. A partir de 40 mm, même si le front de fusion n'est pas encore parvenu jusqu'au cœur de la particule, la conduction a toutefois permis de porter la partie solide restante jusqu'à la température de fusion. Le front de fusion parvenu au cœur de la particule, la température s'équilibre alors assez rapidement au sein de toute la particule. D'un point de vue quantitatif, les résultats doivent tout de même être considérés avec précautions dans la mesure où une conductivité thermique moyenne de l'alumine indépendante de la température a été utilisée ici. Néanmoins, on constate que le gradient thermique entre la surface et le cœur d'une particule d'alumine peut atteindre plusieurs centaines de degrés au long de sa trajectoire.

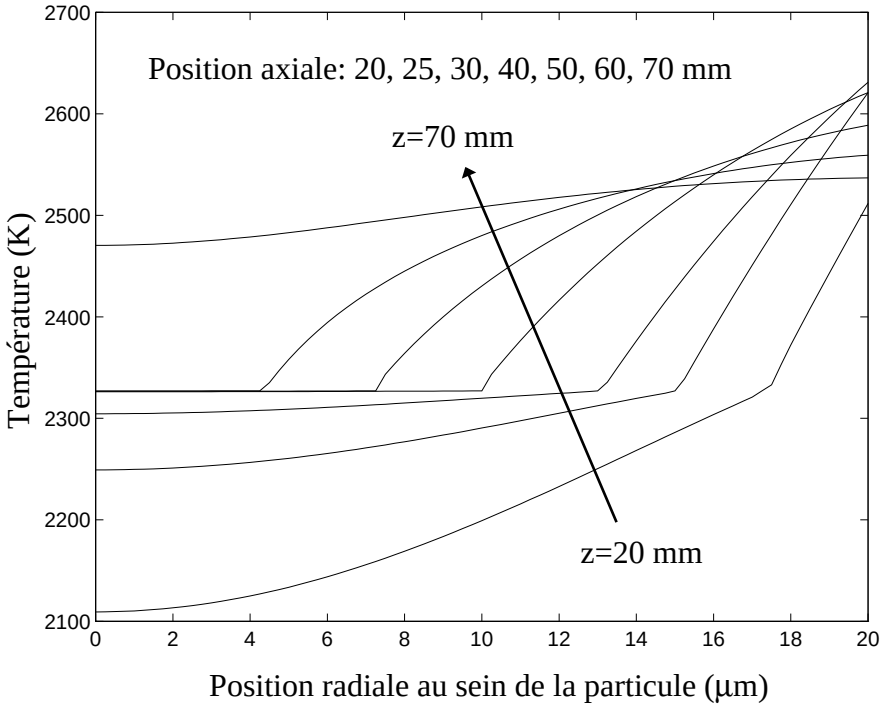


Figure 24 : *Profil interne de température de la particule de 40 μm à différentes positions axiales le long de sa trajectoire.*

La Figure 25 présente les vitesses de particules de trois diamètres différents observées à une position axiale de 100 mm et injectées suivant différentes vitesses initiales. Pour chaque taille, les vitesses d'injection sont calculées en fonction de la vitesse moyenne du gaz porteur dans l'injecteur en faisant varier le débit de gaz porteur de 2 l/min à 6.5 l/min par pas de 0.5. Comme pour les particules de fer de 45 μm, les vitesses maximales des particules sont observées à une position radiale de l'ordre de -3 mm pour une position axiale de 100 mm. Cette vitesse maximale est obtenue pour une vitesse initiale de particule calculée suivant la vitesse moyenne du gaz dans l'injecteur pour un débit de gaz porteur de 3 à 4 l/min (qui correspond aux conditions utilisées lors des mesures).

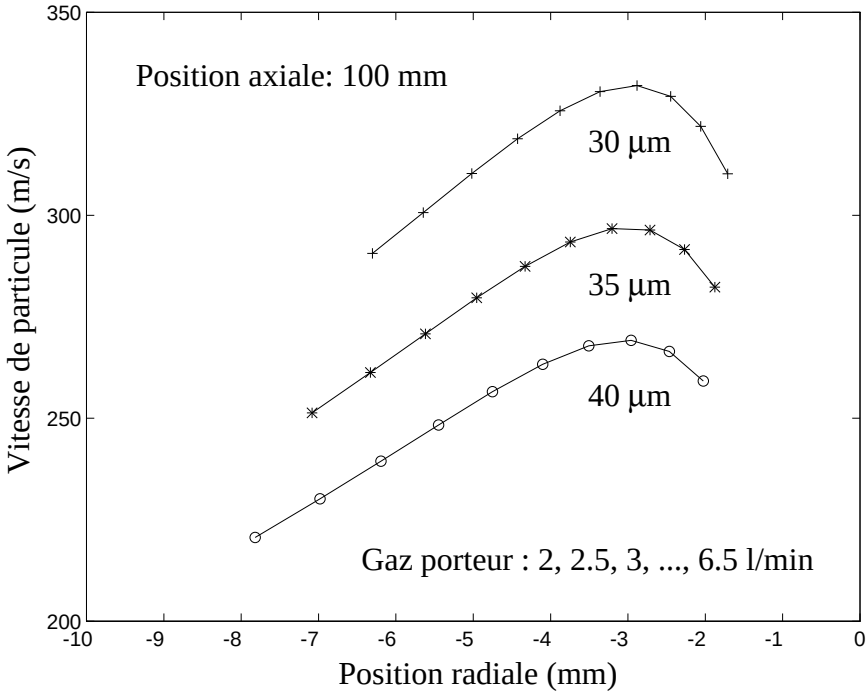


Figure 25 : *Vitesses de particules de différents diamètres vues à 100 mm pour différentes vitesses initiales de particules calculées suivant la vitesse moyenne du gaz porteur pour différents débits.*

La Figure 26 présente les températures de surface de ces mêmes particules observées à une position axiale de 100 mm. A 0.5 mm près, les particules qui ont subi le maximum d'accélération ont également subi le maximum d'échange thermique. Le débit de gaz porteur, en influençant la vitesse moyenne d'injection des particules, joue donc un rôle déterminant quant à l'optimisation des échanges entre le jet et les particules de poudre.

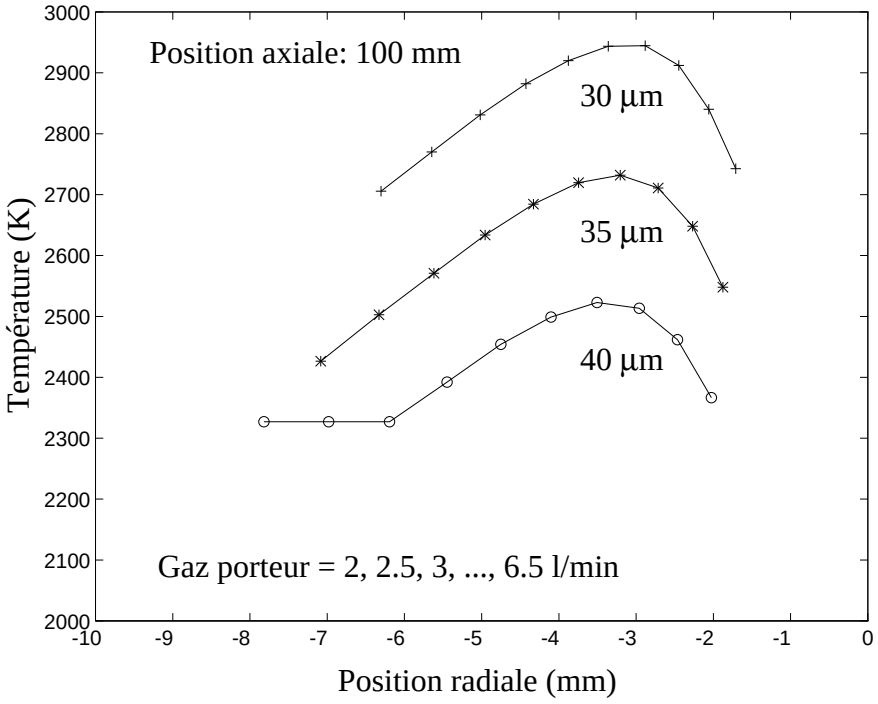


Figure 26 : *Températures de particules de différents diamètres vues à 100 mm pour différentes vitesses initiales de particules calculées suivant la vitesse moyenne du gaz porteur pour différents débits.*

Il reste un élément dont nous avons peu parlé : l'influence du rayonnement d'une particule lors de son refroidissement. En fait, nous avons constaté une faible influence quel que soit le cas. Une particule d'émissivité proche de 0.9 rayonne une puissance ϕ_r d'environ 4 W.mm^{-2} si sa température de surface est de 3000 K. Le refroidissement de cette particule associé à l'énergie rayonnée sur une distance L le long de sa trajectoire est donné par

$$\Delta T = \frac{6\phi_r L / V_p}{\rho_p d_p Cp_p}$$

où V_p, ρ_p, d_p, Cp_p sont les vitesse, masse volumique, diamètre et chaleur spécifique de la particule.

Pour une particule d'alumine liquide de diamètre 10 µm et de vitesse 500 m/s, il vient $\Delta T \approx 44\ °C$ sur 50 mm. Pour une particule d'alumine liquide de diamètre 50 µm et de vitesse 200 m/s, il vient alors $\Delta T \approx 22\ °C$ sur cette même distance. Dans la zone de chauffage, la contribution des pertes par rayonnement est négligeable devant l'importance des échanges convectifs. Toutefois, même si sa contribution est faible, le rayonnement est pris en compte dans nos calculs.

4.7. Retour à la projection de fer

L'utilisation d'une expression modifiée du nombre de Nusselt (Équation 16) nous a permis d'obtenir une concordance correcte entre les mesures de température de particules d'alumine en vol et les simulations. Cette expression modifiée n'ayant pas été utilisée pour la projection de fer, il est souhaitable d'en vérifier son influence. Nous avions observé sur la Figure 11 que la température de particules de fer de différents diamètres ayant suivi les trajectoires de la Figure 9, était limitée par la température de vaporisation du fer. Au vu du palier de température observé également sur les mesures, nous avons suggéré que la température de décomposition du fer est certainement différente de sa température de vaporisation théorique (de par la présence d'oxygène dans le milieu ambiant). Toutefois, en conservant l'hypothèse d'une température de décomposition égale à la température de vaporisation, nous présentons sur la Figure 27 les nouvelles températures de particules prédites si l'Équation 16 est utilisée pour l'expression du nombre de Nusselt. On remarque que toutes les particules de taille inférieure où égale à 70 µm possèdent une température supérieure au palier indiqué par les mesures (2600 K). Au contraire les particules de taille supérieure possèdent une température inférieure à 2600 K (ce qui n'était pas le cas sur la Figure 11). Ainsi, la différence mesures/modèle concerne maintenant essentiellement la valeur du palier de température. Cette différence s'explique par l'influence de l'oxydation de fer par l'oxygène contenu dans l'air ambiant qui modifie la température de décomposition du fer. A ce niveau, des études complémentaires s'imposent donc.

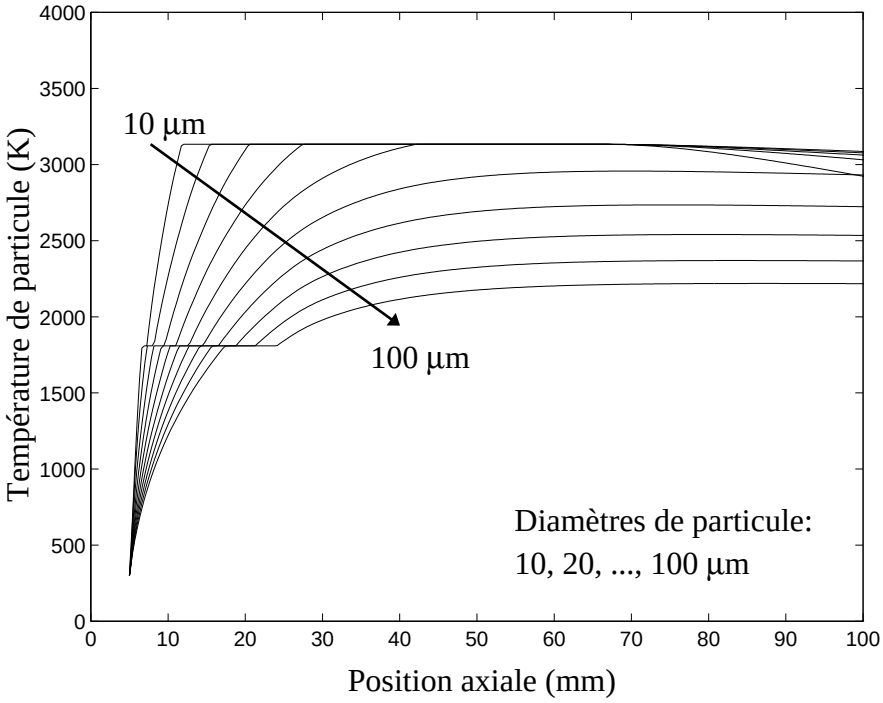


Figure 27 : *Evolution des températures de particules de fer de différents diamètres injectées dans des conditions similaires à celles de la figure 5 suivant l'utilisation de l'expression du nombre de Nusselt donné par l'équation 17.*

Conclusions

Lors de la projection d'une poudre de fer, nous avions mis en évidence que les particules observées à une position radiale de -3 mm et une position axiale de 100 mm subissent une accélération maximale au long de leur trajectoire. Au vu des résultats obtenus pour la poudre d'alumine, ce critère est confirmé et nous mettons également en évidence que les particules subissent aussi un maximum d'échanges thermiques. D'un point de vue pratique, il est donc nécessaire de régler avant projection, le débit du gaz porteur de manière à obtenir une bonne pénétration des particules dans le jet. La simulation est donc susceptible de permettre une optimisation des conditions de projection. En effet, on utilise par exemple souvent des injecteurs standards et on ajuste le débit du gaz porteur pour optimiser l'injection des particules dans le jet. Cette façon de faire, si elle a le mérite d'exister, n'est pas la seule est n'est pas forcément la plus efficace. Dans certains cas, il peut être souhaitable de favoriser les échanges pour les particules les plus grosses seulement (dans la mesure où elles ont plus de mal à fondre). Une solution consiste alors à employer un injecteur plus long sans augmenter le débit du gaz porteur. Comme, nous avons vu que les particules les plus petites sont accélérées à la vitesse du gaz porteur, celles-ci ne seront que peu influencées par ce changement. Par contre, les particules les plus grosses, accélérées sur une distance plus grande, seront injectées avec une grande vitesse et subiront ainsi plus d'échanges (si l'on se situait auparavant en deçà de la vitesse d'injection optimale). On peut ainsi permettre une meilleure fusion des particules les plus grosses sans pour

autant augmenter la vaporisation des plus petites, ce qui n'est pas possible en ajustant uniquement le débit du gaz porteur.

Dans tous les résultats présentés, il été supposé que les particules sont injectées dans la direction de l'axe du jet. En réalité, le diamètre de l'injecteur n'étant pas négligeable devant celui de l'anode (1.8 mm pour 6 mm), les particules ne passent pas toutes par l'axe du jet. De ce fait, nous avons récemment inclus la possibilité de tester l'influence d'un léger décalage radial du point d'injection des particules. Les différences observées sont peu significatives. Toutefois, tout comme l'effet de la vitesse initiale des particules, l'effet d'un décalage radial contribue à la dispersion des résultats de manière très similaire à la Figure 15 par exemple.

Le code développé permet également de tester l'influence de l'angle d'injection des particules dans le jet (qu'il est possible de modifier sur une torche F4 de ± 15°). A ce niveau, nous avons pu vérifier que la position à laquelle une particule est observée (par exemple y=-3 mm à une position axiale de 100 mm) n'est que très peu influencée par son angle d'injection dans le jet si tout les autres éléments demeurent inchangés par ailleurs. Toutefois, l'effet de charge devra être pris en compte dans une étude ultérieure dans la mesure où la pratique indique qu'il est notamment susceptible de modifier la structure des dépôts réalisés par projection thermique.

1 C. Moreau, P. Gougeon, M. Lamontagne, "Diagnostics of Thermal Sprayed Particles upon Impact", *Proceedings of the International Thermal Spray Conference*, pp 347-351, Ed. A. Ohmori, Kobe (1995).

2 C. Moreau, P. Gougeon, M. Lamontagne, V. Lacasse, G. Vaudreuil, P. Cielo, "On-Line Control of the Plasma Spraying Process by Monitoring the Temperature, Velocity and Trajectory of the In-Fligth Particles", *Proceedings of the National Thermal Spray Conference*, Ed. C.C. Berndt & T.F. Bernecki, ASM Int., Materials Park, Ohio (1994).

3 C. Moreau, "Towards a better control of thermal spray processes", *Proceedings of the International Thermal Spray Conference*, pp 1681-1693, Nice, Ed. C. Coddet, ASM Int, Materials Park, Ohio (1998).

4 P.C. Huang, J. Heberlein, E. Pfender, "Particle behavior in a two-fluid turbulent plasma jet", *Surface and Coatings Technology*, **73**,142-151 (1995).

5 J.A. Lewis, W.H. Gauvin, "Motion of Particles Entrained in a Plasma Jet", *AIChE Journal*, **19**, 5, 982-990 (1973).

6 M. Vardelle, A. Vardelle, P. Fauchais, M.I. Boulos, “Plasma/Particle Momentum and Heat transfer : Modelling and Measurements”, *AIChE Journal*, **29**, 2, 236-243 (1983).

7 Y.M. Yang, “Modélisation mathématique d'un système de projection thermique à la flamme de type HVOF : application à l'élaboration de revêtements protecteurs”, Thèse de l'Université de Franche Comté (1996).

8 P. Mathur, D. Apelian, A. Lawley, “Analysis of the Spray Deposition Process”, *Acta metall*. **37**, 2, 429-443 (1989).

9 K. Heiskanen, “Particle Classification”, Chapman & Hall (1993).

10 P.D. Johnston, “The Rate of Decomposition of Silica Particles in an Augmented Flame”, *Combustion and Flame* **18**, 373-379 (1972).

11 C. Borgianni, M. Capitelli, F. Cramarossa, L. Triolo, E. Molinari, “The behavior of metal oxydes injected into an argon induction plasma”, *Combustion and Flame* **13**, 181-194 (1969).

12 V.V. Sobolev, J.M. Guilemany, J.C. Garmier, J.A. Calero, “Modelling of particle movement and thermal behaviour during high velocity oxy-fuel spraying”, *Surface and Coatings Technology*, **63**, 181-187 (1994).

13 A. Vardelle, “Etude Numérique des transferts de chaleur et de masse entre un plasma d'arc a la pression atmosphérique et des particules solides”, Thèse de L'Université de Limoges (1987).

14 N.N. Sayegh, W.H. Gauvin, “Numerical Analysis of Variable Property Heat Transfert to a single Sphere in High Temperature Surroundings”, *AIChE Journal*, **25**, 3, 522-534 (1979).

15 E. Bourdin, P. Fauchais, A. Vardelle, “Les transferts de chaleur et de quantité de mouvement plasma/particules sans réactions chimiques”, *Revue Générale de Thermique*, N°253, 47-69 (1983).

16 X. Chen, E. Pfender, “Effect of the Knudsen Number on Heat Transfer to a Particle Immersed into a Thermal Plasma”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **3**,1,97-112 (1983).

17 P. Nylén, M. Friis, A. Hansbo, L. Pejryd, “Investigation of Particle In-flight Characteristics during Atmospheric Plasma Spraying of Yttria Stabilised ZrO2”, soumis à Journal of Thermal Spray Technology.

18 M.P. Planche, R. Bolot, C. Coddet, “Comparison between Experimental and Numerical results obtained on in-fligth Particles Characteristics”, in *Thermal Spray : Meeting the Challenges of the 21th Century*, (Proceedings of the International Thermal Spray Conference, Nice, 1998), Vol. 1, pp. 355-360, Ed. C. Coddet, Pub. ASM Int., Materials Park, OH-USA (1998).

19 R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot, “Transport Phenomena”, p 47, John Wiley & soons (1960).

20 M.W. Chase et al, “JANAF Thermochemical Tables”, *J. Phys. and Chem. Reference Data*, **14**, Suppl. 1 (1985).

21 P. Nylén, M. Edberg, “Robot Trajectory Generation and Coating Temperature prediction of Plasma Sprayed Coatings”, in Thermal Spray : A United Forum for Scientific and Technological Advances, (Proceedings of the United Thermal Spray Conference, Indianapolis, 1997), pp 583-592, Ed. C.C. Berndt, Pub. ASM Int., Materials Park, OH-USA (1997).

Conclusion Générale

Tout au long de cette étude, nous avons décrit les étapes successives qui nous ont permis d'arriver à une simulation du procédé de projection thermique APS.

La première partie de l'étude a été consacrée à la réalisation d'un code de calcul des propriétés thermodynamiques et des coefficients de transport des plasmas thermiques. Après avoir comparé les résultats obtenus à ceux de différents auteurs, nous avons pu confirmer la validité de ce code. Si le travail réalisé ne représente pas une grande originalité relativement aux travaux antérieurs, il apporte néanmoins d'énormes facilités pour les étapes suivantes. En effet, à l'issue du lancement d'un calcul pour un mélange donné (réalisé sous MATLAB™), un fichier résultat est automatiquement créé (format ASCII). Ce fichier peut ensuite être chargé par PHOENICS™ et utilisé pour le calcul des jets de plasma (programmation FORTRAN de la lecture du fichier ASCII).

La deuxième partie de l'étude a été consacrée à l'étude des jets libres de plasma. Ceci nous a permis de déterminer des éléments les plus influents sur les caractéristiques d'un jet de plasma. Le code PHOENICS™ a été utilisé. Finalement, il s'avère que la nature du gaz environnant, le modèle de turbulence et les paramètres de projection (débits de gaz, intensité du courant, diamètre de torche) sont des éléments plus sensibles que la forme du profil de vitesse ou l'intensité de turbulence en sortie de torche. En particulier, les simulations tendent à indiquer que l'utilisation de torches de diamètre supérieur à 6 mm peut représenter un intérêt non négligeable dans la mesure où un allongement des isothermes est prédit.

Le choix d'un modèle de turbulence a été réalisé dans la troisième partie sur la base des échanges thermiques entre un jet de plasma et un calorimètre refroidi. Cette troisième partie constitue l'originalité première de cette thèse. En effet, la modélisation des échanges thermiques entre un écoulement turbulent et une surface est un problème sensible. En particulier, peu d'études ont été consacrées aux jets de plasma impactants. Nous montrons dans cette étude que l'utilisation de fonctions de paroi fournit des résultats très approximatifs. Il est donc nécessaire de modéliser les échanges intervenant dans la couche limite. A ce niveau, une attention particulière a été portée quant à la validité du modèle utilisé pour représenter cette couche limite sur la surface d'impact. Si un modèle de turbulence à deux équations a pu être conservé, le modèle proposé permet de maintenir l'échelle de longueur du modèle de turbulence proche de sa valeur d'équilibre au voisinage de la paroi et utilise une expression de la viscosité turbulente traduisant sa réelle importance relativement à la viscosité laminaire (fonction f_μ) au voisinage de la paroi. Au vu de la

comparaison des prédictions du flux thermique transmis avec les mesures expérimentales de Monerie-Moulin et de Chambon, nous avons finalement conclu que le modèle k-ε modifié de Chen & Kim était plus adéquat que le modèle k-ε standard pour décrire un jet de plasma, ce qui est en accord avec leurs aptitudes respectives à décrire le cas des jets ronds (qui constitue un point fort du modèle de Chen & Kim et un point faible du modèle standard). Nous obtenons ainsi les profils radiaux du flux transmis pour un jet de plasma impactant. Nous montrons que les profils radiaux obtenus ne peuvent être approximés par des fonctions mathématiques simples. Toutefois, une décroissance exponentielle semble pouvoir être utilisée sur une zone relativement importante.

Dans la dernière partie de l'étude, nous avons utilisé le modèle k-ε de Chen & Kim et calculé les interactions jet/particules de manière à prédire l'état des particules lors de leur impact sur le substrat. Sur la base de considérations théoriques, nous suggérons des modifications à apporter aux expressions du coefficient de traînée des particules et du nombre de Nusselt autour des particules de manière à représenter l'influence du gradient thermique important existant entre la température de surface des particules et la température locale du plasma. Les corrections proposées sont en accord avec celles suggérées par Huang & al dans le cas d'un jet de plasma d'argon dans le sens où elles tendent à augmenter le coefficient de traînée et à diminuer le nombre de Nusselt relativement aux expressions non corrigées. Elles présentent toutefois l'avantage d'être utilisables quel que soit le mélange plasma considéré. Les corrélations proposées par Chen & al ont été conservées concernant l'influence des effets de vaporisation et de raréfaction (effet Knudsen) sur le coefficient de traînée et le nombre de Nusselt.

Concernant l'influence du gradient thermique au sein des particules qui doit être pris en compte pour les matériaux de faible conductivité thermique, nous avons développé une méthode traitant le problème en terme d'enthalpie plutôt que de température. Cette méthode présente l'avantage de ne pas nécessiter la résolution d'une équation séparée concernant la propagation du front de fusion dans la mesure où cette dernière équation fait alors partie du système résolu. L'utilisation d'un maillage mobil au sein de la particule peut également être évité.

Au vu de la comparaison des résultats numériques à des mesures expérimentales de caractéristiques de particules en vol réalisées avec l'appareil de mesure DVP 2000, nous avons pu observé que les vitesses et températures de particules prédites sont en bon accord avec les résultats expérimentaux aussi bien pour une projection de fer qu'une projection d'alumine. Ce critère renforce ainsi la validité des champs de vitesse et de température calculés avec le modèle de Chen & Kim.

Toutefois, concernant la caractérisation des échanges jet de plasma/ particules, deux points au moins restent à étudier plus précisément :

Le premier concerne les vitesses obtenues sur des particules de taille inférieure à 30 µm qui ne sont plus en accord avec les mesures. Cette différence peut avoir deux origines :

- ces particules ont acquis une trop grande vitesse et ne sont plus correctement détectées par le DPV.
- la validité du modèle est mise en cause pour les particules les plus petites.

A l'heure actuelle, nous n'avons pas répondu à cette question et nous devrons réaliser des études complémentaires.

Le deuxième point concerne l'influence de l'environnement sur l'évolution des matériaux projetés. Il semble acquis que l'oxygène contenu dans l'air environnant puisse provoquer une oxydation des particules de fer en vol. Dans la mesure où la température de décomposition d'un matériau est fonction du milieu environnant, nous pensons qu'elle devient différente de la température de vaporisation du fer calculée suivant $\Delta G = 0$ pour la réaction $Fe_l = Fe_g$. Ceci signifie qu'un modèle plus rigoureux serait souhaitable à ce niveau dans la mesure où cet effet n'est pas pris en compte dans le modèle. Pour parvenir à déterminer une température de décomposition théorique du fer en présence d'air, nous avons été confronté à une donnée manquante, à savoir les concentrations des différents éléments à prendre en compte pour le calcul. Il s'agit donc de connaître les concentrations relatives de l'élément Fe relativement aux éléments contenus dans le gaz environnant au voisinage de la surface des particules où la décomposition se produit. Il semble improbable que le simple rapport du débit du matériau au débit du gaz plasma soit représentatif des proportions à utiliser pour le calcul.

Une solution consisterait à supposer que la température mesurée par le DPV est la température de décomposition du matériau projeté sous ces conditions. Ceci doit être vérifié.

Différentes suites à cette étude peuvent être envisagées. Premièrement, on peut se poser la question de savoir quelle serait l'influence d'une modification de la géométrie de la torche telle qu'un léger divergent en sortie par exemple. En effet, les calculs que nous avons réalisés indiquent que pour une torche de 6 mm de diamètre interne en particulier (telle que celle que nous utilisons), la vitesse de l'écoulement s'approche de la vitesse du son dans le milieu pour des débits de gaz importants et des intensités de courant importantes. Pour une telle étude, la simulation de l'arc électrique devrait être envisagée par le biais d'un couplage magnéto-hydrodynamique (modèle de Murphy et al. par exemple) dans la mesure où ce qui peut se produire dans le divergent dépend de ce qui se passe en amont.

Une seconde possibilité de suite serait de s'intéresser à l'effet de charge (augmentation du débit de poudre). En effet, nous avons ici négligé l'influence de l'injection des particules sur le jet de plasma et nous n'avons considéré que celle du jet sur les particules. A faible débit de poudre, nous sommes

en droit de dire que cette hypothèse est valable. Toutefois, au delà d'une certaine limite, un calcul couplé s'impose. Un tel calcul doit impérativement être réalisé en 3D et ne peut plus se faire par résolution d'un système d'équations parabolique dans la mesure où la direction privilégiée de l'écoulement ne concerne pas l'injection des poudres qui se fait perpendiculairement. Pour ces deux raisons, une augmentation significative du temps de calcul requis devient inévitable.

Une autre possibilité de suite pourrait concerner le mécanisme d'entraînement du gaz environnant dans un jet de plasma. Pfender et al. ont montré que le processus s'apparente plus à l'entraînement de bulles d'air (par engouffrement) qu'à un processus diffusionnel. Ils ont donc suggéré d'utiliser un modèle à deux fluides pour simuler les jets de plasma. Suivant un tel modèle, le gaz plasma et le gaz environnant sont considérés comme deux entités distinctes qui conservent chacun leur propre température et leur propre vitesse localement. Si plusieurs éléments tendent à indiquer que l'utilisation du modèle k-ε de Chen & Kim permet de déterminer des champs de vitesse et de température réalistes, il est probable que le modèle à deux fluides puisse décrire plus précisément les franges du jet au voisinage de la zone de la sortie de la torche, là où le cisaillement est maximal. En effet, il est souvent dit dans la littérature que l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local (ETL) est en cause sur les franges du jet.

Cette liste des possibilités de suite à cette étude est loin d'être exhaustive. On peut encore mentionner un travail d'adaptation au procédé VPS sachant que l'hypothèse d'ETL serait alors remise en cause.

Annexe

Le code de calcul PHOENICS

Annexe - Le code de calcul PHOENICS

De par le développement des ordinateurs et l'augmentation régulière de leur puissance de calcul, la simulation est aujourd'hui de plus en plus utilisée dans l'industrie où elle constitue un outil d'assistance au développement de procédés. Le concept CFD "Computational Fluid Dynamic" consiste à résoudre les équations qui régissent un phénomène physique de manière à en donner une image approchée mais réaliste. Toutefois, chacun doit au départ être conscient du fait qu'il n'est jamais possible de corréler à 100% une simulation à la réalité pour différentes raisons. Premièrement, la complexité des phénomènes étudiés est souvent telle que de trop nombreux paramètres entrent en jeu. Deuxièmement, bien que les capacités des ordinateurs soient en constante augmentation, elles demeurent encore souvent trop faibles pour pouvoir réaliser certaines études de manière suffisamment précise (aujourd'hui surtout dans le cas d'études 3D). Troisièmement, les bases scientifiques des calculs sont parfois inadaptées à l'étude de tel ou tel phénomène physique. Enfin, la prise en compte des phénomènes de turbulence se fait le plus souvent à l'échelle macroscopique si bien que ce n'est pas la turbulence elle-même qui est modélisée mais son effet global sur l'écoulement.

Nous présentons dans un premier temps le code PHOENICS en lui-même puis la discrétisation des équations régissant les écoulements, la méthode de résolution de ces équations ainsi que le traitement des conditions aux limites. Développé par la Société CHAM, PHOENICS est un code général de mécanique des fluides destiné à la simulation de tous types d'écoulements et d'échanges thermiques. D'un point de vue historique, PHOENICS a été le premier code à caractère général au niveau CFD (début des années 80). En tant que pionnier, il a été également à l'origine de nombreuses techniques mathématiques et de nombreux modèles physiques repris aujourd'hui dans l'industrie (en particulier pour la simulation de la turbulence, les écoulements multi-phases et l'aspect réactivité chimique). Il reste encore aujourd'hui le code qui offre le maximum de modèles physiques et le seul à fournir certaines possibilités, notamment concernant le couplage simultané avec l'étude des contraintes dans les solides ou l'utilisation de modèles de turbulence multi-fluides.

1. Structure

PHOENICS se présente sous la forme de différents programmes permettant de définir un problème, de le résoudre et de tracer des représentations graphiques des résultats obtenus.

Le fichier Q1 contient la définition d'un problème (maillage, propriétés du fluide, propriétés de l'écoulement, équations résolues, conditions aux limites, etc). Ce fichier peut être soit créé à l'aide

d'un éditeur de texte, soit par utilisation d'une interface permettant de définir toutes ces données, soit en combinant ces deux méthodes (création initiale par l'interface puis ajustement manuel). Bien que ce fichier permette à lui seul de définir de nombreux calculs, certaines applications ne peuvent être traitées simplement et il existe donc un second fichier (fichier ground.f en programmation FORTRAN) dans lequel l'utilisateur peut définir à souhait la dépendance des propriétés du fluide en fonction de la température et de la pression, des conditions aux limites particulières, etc. La résolution des équations discrétisées s'effectue ensuite à l'aide de l'algorithme SIMPLEST qui constitue une version modifiée de SIMPLE [1]. Une fois la convergence obtenue, la visualisation des résultats et la création de figures peuvent être réalisées à l'aide de 3 programmes différents. "Autoplot" permet de tracer l'évolution d'une grandeur le long d'une directrice (typiquement pour tracer des profils axiaux ou radiaux d'une grandeur). Il peut aussi tracer la courbe X-Y représentant les données d'un fichier quelconque contenant 2 colonnes et n lignes. "Photon" permet d'effectuer des tracés d'isovaleurs, de vecteurs vitesse, de lignes de courant, dans des plans choisis du maillage, et ce en couleur ou en noir et blanc. Enfin "VR" (Virtual Reality) permet dans le cas d'études 3D, d'obtenir des vues en 3D des résultats obtenus.

2. Formulation générale des équations de conservation

D'un point de vue général, un code CFD est un outil permettant de résoudre des équations de conservation de différentes quantités par utilisation d'algorithmes appropriés. L'équation de conservation d'une grandeur ϕ en régime stationnaire est généralement écrite sous la forme

$$\nabla.\left(\rho \mathbf{V}\phi - \Gamma_\phi \nabla\phi\right) = S_\phi$$

ρ la masse volumique,

$\mathbf{V}$ le vecteur vitesse,

Γ_ϕ le coefficient d'échange associé à ϕ

et S_ϕ le terme source associé à ϕ.

Le premier terme $\rho\mathbf{V}\phi$ est appelé terme de convection alors que le second terme $-\Gamma_\phi\nabla\phi$ est appelé terme de diffusion.

3. Discrétisation des équations de conservation

Suivant la méthode des volumes finis, la discrétisation des équations de conservation pour chaque grandeur ϕ est basée sur l'intégration des équations sur chaque élément de volume crée lors de la construction du maillage.

La Figure 1 présente un élément de volume pour un cas 2D (on a ici dz=1). Les majuscules et les minuscules indiquent les centres et faces des cellules respectivement.

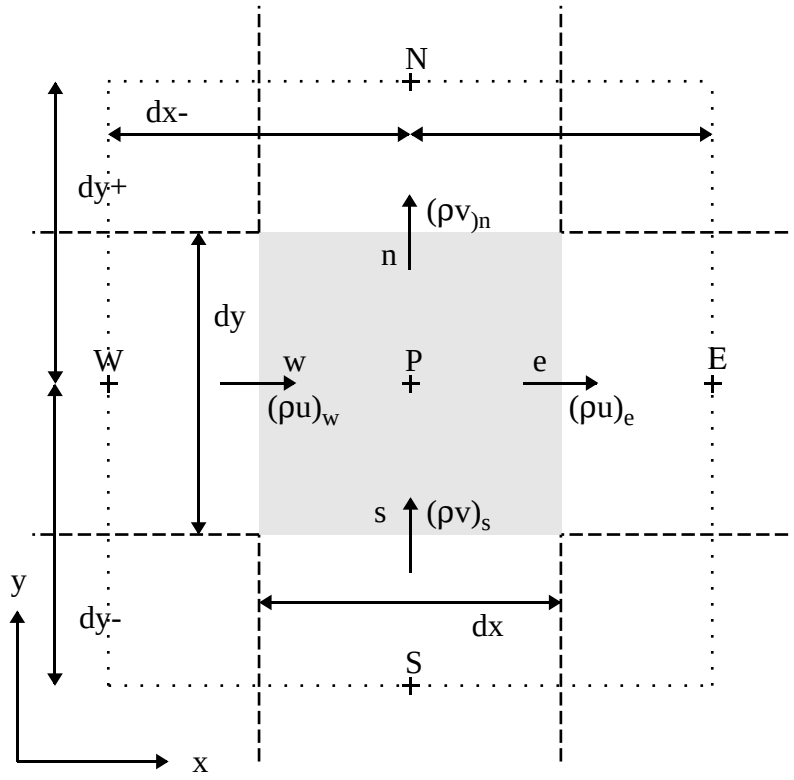


Figure 1 *: élément de volume en 2D.*

En intégrant l'équation de conservation de ϕ sur l'élément de volume, il vient

$$(\rho u)_e \phi_e dydz - (\rho u)_w \phi_w dydz + (\rho v)_n \phi_n dxdz - (\rho v)_s \phi_s dxdz$$
$$-\Gamma_e dydz(\phi_E - \phi_P)/dx_+ + \Gamma_w dydz(\phi_P - \phi_W)/dx_- - \Gamma_n dxdz(\phi_N - \phi_P)/dy_+ + \Gamma_s dxdz(\phi_P - \phi_S)/dy_-$$
$$= S_P dxdydz$$

Différentes options sont disponibles quant à la discrétisation des termes de convection dans chaque équation (expression des ϕ_i en fonction des ϕ_I). En considérant le cas le plus simple du schéma amont ("upwind"), la valeur de ϕ considérée sur chaque face d'un volume d'intégration est celle du centre du volume en question si le fluide sort par la face et celle du centre du volume voisin ayant la face commune si le fluide entre par celle-ci. Avec cette hypothèse, il vient

$$(\rho u)_e \phi_e = [0,(\rho u)_e]\phi_P - [0,-(\rho u)_e]\phi_E$$
$$(\rho u)_w \phi_w = [0,(\rho u)_w]\phi_W - [0,-(\rho u)_w]\phi_P$$
$$(\rho v)_n \phi_n = [0,(\rho v)_n]\phi_P - [0,-(\rho v)_n]\phi_N$$
$$(\rho v)_s \phi_s = [0,(\rho v)_s]\phi_S - [0,-(\rho v)_s]\phi_P$$

où l'opérateur $[A,B]$ désigne ici la valeur maximale parmi A et B.

En introduisant ces expressions dans l'équation précédente, il vient

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + b_P$$

avec en identifiant

$$a_E = \left(\frac{\Gamma_e}{dx_+} + [0, -(\rho u)_e] \right) dydz$$

$$a_W = \left(\frac{\Gamma_w}{dx_-} + [0, (\rho u)_w] \right) dydz$$

$$a_N = \left(\frac{\Gamma_n}{dy_+} + [0, -(\rho v)_n] \right) dxdz$$

$$a_S = \left(\frac{\Gamma_s}{dy_-} + [0, (\rho v)_s] \right) dxdz$$

$$a_P = \left(\frac{\Gamma_e}{dx_+} + [0, (\rho u)_e] + \frac{\Gamma_w}{dx_-} + [0, -(\rho u)_w] \right) dydz$$

$$+ \left(\frac{\Gamma_n}{dy_+} + [0, (\rho v)_n] + \frac{\Gamma_s}{dy_-} + [0, -(\rho v)_s] \right) dxdz$$

$$b_P = S_p dxdydz$$

En utilisant les égalités

$$[0, (\rho u)_e] - [0, -(\rho u)_e] = (\rho u)_e$$

$$[0, (\rho u)_w] - [0, -(\rho u)_w] = (\rho u)_w$$

$$[0, (\rho v)_n] - [0, -(\rho v)_n] = (\rho v)_n$$

$$[0, (\rho v)_s] - [0, -(\rho v)_s] = (\rho v)_s$$

Il vient

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + (\rho u)_e dydz - (\rho u)_w dydz + (\rho v)_n dxdz - (\rho v)_s dxdz$$

L'équation de continuité s'écrivant

$$(\rho u)_e dydz - (\rho u)_w dydz + (\rho v)_n dxdz - (\rho v)_s dxdz = 0$$

On obtient finalement

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S$$

L'avantage principal du schéma amont réside dans le fait que le critère $a_P > 0$ est toujours vérifié dans la mesure où a_P est la somme de termes positifs uniquement. Néanmoins, cette expression de a_P suppose que l'équation de continuité est vérifiée lors de chaque itération.

Dans le cas d'un schéma centré, les grandeurs ϕ_i sur les faces des cellules sont interpolées linéairement entre ϕ_P et ϕ_I. Néanmoins, dans ce cas, le terme de convection disparaît de l'expression de a_P et dans le cas d'un écoulement non visqueux, on aurait même alors $a_P = 0$ (ce

qui entraînerait la divergence instantanée du calcul). Mais tout ceci est expliqué plus en détail par Patankar [1].

Si les premières versions du code ne disposaient que des schémas “amont” et “hybride” (intermédiaire entre “amont” et “centré”), les versions actuelles permettent l’utilisation de schémas d’ordre supérieur. Ces schémas diffèrent du schéma “amont” dans le sens où les valeurs ϕ_i sur les faces des cellules sont calculées cette fois-ci par interpolation entre ϕ_P, ϕ_I et un troisième point plus en amont. Zijlema & al [2, 3, 4] ont répertorié et explicité différents schémas. Par exemple, pour le schéma "QUICK” (Quadratic Upwind Interpolation), il vient pour ϕ_e si $u_e > 0$

$$\phi_e = \tfrac{1}{2}\left(\phi_P + \phi_E\right) - \tfrac{1}{8}\left(\phi_W - 2\phi_P + \phi_E\right)$$

au lieu de

$$\phi_e = \phi_P$$

pour le schéma “amont”

et de

$$\phi_e = \left(\phi_P + \phi_E\right)/2$$

pour le schéma “centré”

Au sein de PHOENICS, les modifications entraînées par l’utilisation de schémas d’ordre supérieur sont prises en compte par le biais de termes sources ajoutés aux équations obtenues avec le schéma amont et aucune linéarisation n’est utilisée. Par conséquent, l’influence d’un schéma différent du schéma amont est entièrement transcrite dans le terme b_P, ce qui permet de conserver des systèmes tridiagonaux (voir partie sur les méthodes de résolution ci-après). Parmi les schémas disponibles dans PHOENICS, on a notamment les schémas QUICK, SMART ou VAN-LEER. Si l'on reprend l'exemple précédent, pour tous les schémas, ϕ_e peut être mis sous la forme

$$\phi_e = \phi_P + \tfrac{1}{2} B(r)\left(\phi_P - \phi_W\right)$$

où

$$r = \frac{\phi_E - \phi_P}{\phi_P - \phi_W}$$

et $B(r)$ est la fonction caractéristique de chaque schéma.

Ainsi, pour le schéma QUICK que nous avons explicité ci-dessus, on aurait

$$B(r) = \tfrac{3}{4} r + \tfrac{1}{4}$$

alors que pour le schéma SMART par exemple, on a

$$B(r) = \max\left(0;\ \min\left(2r;\ \tfrac{3}{4} r + \tfrac{1}{4};\ 4\right)\right)$$

Un schéma est dit linéaire si la fonction $B(r)$ peut être représentée par une seule droite. Ainsi, le schéma QUICK est un schéma linéaire alors le schéma SMART ne l'est pas.

Quel que soit le schéma utilisé, on aboutit donc finalement à un système d'équations reliant chaque ϕ_P aux valeurs de ϕ dans les cellules immédiatement voisines à P.

4. Linéarisation des termes sources

Dans le paragraphe précédent, nous avons considéré le cas d'un terme source constant par unité de volume. En règle générale, PHOENICS permet d'introduire tous les termes sources de manière à permettre leur linearisation (exceptés le gradient de pression pour les équations de quantité de mouvement qui est traité de manière différente). Dans le but de faciliter la convergence des calculs, il est souvent utile de décomposer chaque terme source en une partie constante et une partie proportionnelle à la variable elle-même. Il est ainsi possible d'introduire tous les termes source à toutes les équations résolues. Ces termes source sont toujours introduits par le biais d'un coefficient (C) et d'une valeur (V) tels que

$$S_P = M.C(V - \phi_P) = SC - SP\ \phi_P$$

où M est un coefficient multiplicateur supplémentaire dépendant du type du terme source (terme source par cellule, par unité de volume, par unité de masse, par unité de surface de chacune des faces du volume, ...).

Avec cette formulation, tous les cas peuvent être traités. **Un terme source indépendant** de ϕ_P est introduit en utilisant un très petit coefficient (ex: $C = 1E-10$) et une valeur telle que $V >> \phi_P$. **Un terme source complètement proportionnel** à ϕ_P est quant à lui introduit en utilisant $V = 0$. Finalement, la partie constante du terme source (SC) sera maintenue dans le membre de droite de l'équation de ϕ_P (autrement dit dans b_P) alors que la partie proportionnelle à ϕ_P sera ajoutée au coefficient a_P. De manière à toujours garder $a_P > 0$, il est préférable de n'utiliser que des valeurs de (C) positives, on augmente ainsi la valeur de a_P. La linéarisation des termes source est notamment très importante pour les grandeurs de turbulence, l'utilisation d'un terme non linéarisé ne permettant généralement pas la convergence.

5. Conditions aux limites

L'introduction des conditions aux limites se fait elle aussi par le biais de termes source ajoutés aux équations discrétisées. Par défaut, dans PHOENICS, les termes de diffusion et de convection sont omis sur toutes les faces en bordure du domaine de calcul pour toutes les équations résolues. En d'autres termes, le coefficient a_S est par exemple omis pour les cellules les plus au sud, le coefficient a_N pour les cellules les plus au nord, etc. Le coefficient a_P étant calculé en fonction des autres a_I avec $I = E, W, N, S$, il est bien sur lui aussi influencé. L'omission du terme de convection

sur la frontière correspond à la nullité de la composante de vitesse normale à la face située sur la limite alors que l'omission du terme de diffusion correspond à une condition de dérivée nulle toujours normalement à la face. Par conséquent, cette condition aux limites est donc particulièrement représentative du cas d'un axe de symétrie qui ne nécessite donc aucun autre égard.

Une condition également simple à introduire concerne le cas d'un **flux constant par unité de surface** par exemple. En spécifiant l'ajout d'un terme source par unité de surface (voir la formulation des termes source au paragraphe précédent), un flux constant par unité de surface peut alors être spécifié par $C = 1E-10$ et $V = Flux/C$ où $Flux$ est la valeur du flux en $W.m^{-2}$. Le coefficient multiplicateur M est donc ici la valeur de l'élément de surface en m^2. Dans le cas d'un **flux par unité de volume**, la méthode serait identique avec cette fois le flux en $W.m^{-3}$ et M en m^3.

Le cas d'un **coefficient d'échange thermique** (ou équivalent pour les autres équations) est également simple à représenter à partir du moment où l'on connaît sa valeur. Si T est la grandeur résolue, il vient alors $C = \alpha$ (où α est le coefficient d'échange en $W.m^{-2}.K^{-1}$) et $V = T_p$ où T_p est la température de la paroi. Si h, l'enthalpie est résolue (ce qui est plus généralement le cas), il vient alors $C = \alpha / Cp$ où Cp est la chaleur spécifique du fluide et $V = h_p = CpT_p$ si le référentiel pour h est tel que $h = 0$ à $T = 0$. Dans le cas où le maillage est suffisamment fin près de la paroi, les cellules frontières font alors partie de la couche limite laminaire et il vient $\alpha = \lambda/d$, où λ est la conductivité thermique du fluide et d la distance du centre de la cellule à la paroi. Dans le cas d'une composante de vitesse tangentielle à une paroi (équation de quantité de mouvement), on aurait de même $C = \mu/d$ et $V = 0$ (pour une paroi fixe) où μ est la viscosité dynamique du fluide.

Pour fixer strictement la variable à une valeur quelconque, on utilise $C = 1E10$ et $V = V_0$ où V_0 est la valeur à laquelle on souhaite fixer la grandeur. Le coefficient étant très grand, le terme inclus est alors dominant et l'équation devient $C(V_0 - \phi_P) \cong 0$, ce qui revient donc à fixer ϕ_p à V_0.

Dans le cas d'une entrée, le terme de diffusion est généralement négligé par rapport au terme de convection. Si F est la valeur du produit de la masse volumique par la composante normale de vitesse sur cette limite, on peut alors utiliser $C = F$ et $V = V_0$ où V_0 représente ici, dans le cas de l'équation d'énergie par exemple, l'enthalpie du fluide qui entre par la limite en question. Pour l'équation de continuité, on a $C = 1E-10$ et $V = F/C$.

Dans le cas d'une limite libre, comme pour une entrée, on ne considère bien souvent que le terme de convection si bien que la condition de dérivée nulle est maintenue au niveau du terme de diffusion. En accord avec l'hypothèse "amont", dans le cas où le fluide sort par la limite, aucun terme de convection ne doit être inclus (voir les expressions des a_I précédemment définis) si bien qu'aucun terme source ne doit être ajouté. Par contre, dans le cas où le fluide entre par la limite, on

procède alors de la même façon que pour une entrée et on utilise $C = F$ et $V = V_0$ où V_0 est par exemple la valeur de l'enthalpie du fluide qui entre par la limite dans le cas de l'équation d'énergie.

Au travers de ces quelques exemples, nous venons de résumer la façon d'introduire les conditions aux limites dans PHOENICS. D'un point de vue pratique, chaque PATCH (ensemble de cellules) sur lequel on souhaite ajouter tel ou tel terme source doit être défini ainsi que son type (dont on déduit le coefficient multiplicateur à associer au terme source).

Pour la définition de chaque PATCH dans le fichier Q1, on aura la commande :

PATCH(NOM,TYPE,N1X,N2X,N1Y,N2Y,N1Z,N2Z)

où NOM est le nom du PATCH,

TYPE est le type du PATCH,

et les Nik définissent l'ensemble des cellules du PATCH.

PHOENICS reconnaît de nombreux types de PATCH. Par exemple, si l'on souhaite ajouter un terme source par unité de volume, le type du PATCH devra être VOLUME alors que si le terme source à ajouter est par unité de masse, son type devra être PHASEM. Suivant le type du PATCH, c'est le coefficient multiplicateur qui change.

Pour appliquer un terme source à une variable sur ce PATCH, on aura la commande :

COVAL(NOM,VAR,CO,VAL)

où VAR est le nom de la variable,

CO est la valeur numérique du coefficient,

et VAL est la valeur numérique de la valeur.

Les différents guides de l'utilisateur proposés soit sous forme de mini-classeurs [5, 6], soit "On-Line" sous PHOENICS [7] donnent de plus amples détails à ce sujet.

6. Equation de correction de pression

Suivant l'algorithme de résolution SIMPLEST implanté dans PHOENICS, les équations de continuité et de quantité de mouvement sont traitées de façon différente des autres. Si les grandeurs scalaires sont bien calculées pour chaque centre de cellule, les composantes normales de la vitesse (grandeurs vectorielles) sont elles calculées sur les faces du volume d'intégration des scalaires et on a par conséquent des volumes d'intégration décalés pour les équations de quantité de mouvement. Patankar et Spalding [1, 8, 9] ont détaillé le fonctionnement de l'algorithme SIMPLE dont SIMPLEST est dérivé et ont indiqué les avantages de l'utilisation de volumes d'intégration décalés pour les équations de quantité de mouvement. Les valeurs de la pression étant calculées au centre des cellules, elles correspondent aux faces des volumes d'intégration des équations de quantité de

mouvement, ce qui est avantageux dans la mesure où le gradient de pression intervenant dans ces équations peut alors être calculé au centre des volumes d'intégration de ces équations.

La Figure 2 présente le décalage des volumes d'intégration pour les composantes de vitesse.

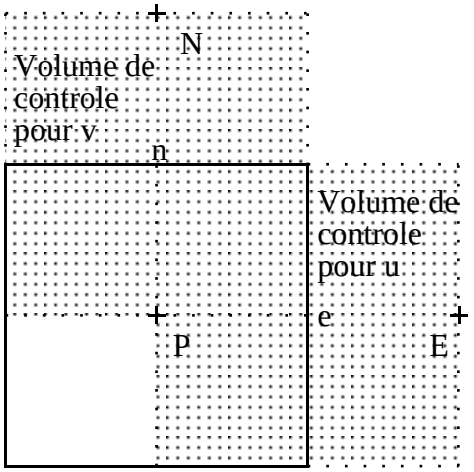


Figure 2 *: Décalage des volumes d'intégration pour les composantes de vitesse*

La discrétisation des composantes de vitesse sur les volumes d'intégration décalés aboutit, en procédant de la même manière que précédemment, à des expressions de type

$$a_e u_e = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb} + b + (p_P - p_E) A_e$$

et

$$a_n v_n = \sum_{nb} a_{nb} v_{nb} + b + (p_P - p_N) A_n$$

où nb représente les voisins de e et n respectivement et

$$A_e = dydz \quad \text{et} \quad A_n = dxdz$$

sont les valeurs des surfaces sur lesquelles la pression s'exerce.

L'algorithme SIMPLE est basé sur une méthode de correction de pression. Si p^* désigne le champ de pression à un certain niveau d'avancement du calcul, les équations de quantité de mouvement précédentes peuvent être écrites suivant

$$a_e u_e^* = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb}^* + b + (p_P^* - p_E^*) A_e$$

et

$$a_n v_n^* = \sum_{nb} a_{nb} v_{nb}^* + b + (p_P^* - p_N^*) A_n$$

où les composantes de vitesse étoilées seront donc associées au de champ de pression p^*.

En supposant que le champ de pression correct soit donné par

$$p = p^* + p'$$

où p' sera appelée correction de pression, les corrections de composantes de vitesse correspondantes peuvent être introduites de manière similaire et il vient

$$u = u^* + u' \quad \text{et} \quad v = v^* + v'$$

En supposant que les corrections de vitesse peuvent s'écrire

$$u'_e = (p'_P - p'_E)A_e / a_e \quad \text{et} \quad v'_n = (p'_P - p'_N)A_n / a_n \ ,$$

on peut maintenant déduire une équation pour la correction de pression p' en utilisant l'équation de continuité.

Avec

$$(\rho u)_e A_e - (\rho u)_w A_w + (\rho v)_n A_n - (\rho v)_s A_s = 0 \ ,$$

et en introduisant les expressions des composantes de vitesses en fonction des composantes étoilées et des corrections de vitesse, il vient

$$a_P p'_P = a_W p'_W + a_E p'_E + a_S p'_S + a_N p'_N + b_P$$

avec, en identifiant

$$a_E = \rho_e A_e^2 / a_e$$

$$a_W = \rho_w A_w^2 / a_w$$

$$a_N = \rho_n A_n^2 / a_n$$

$$a_S = \rho_s A_s^2 / a_s$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S$$

$$b_p = -(\rho u^*)_e A_e + (\rho u^*)_w A_w - (\rho v^*)_n A_n + (\rho v^*)_s A_s$$

Suivant SIMPLE, on commence donc par supposer un champ de pression initial p^*, on résout les équations de quantité de mouvement de manière à obtenir u^* et v^* puis on résout l'équation de correction de pression qui nous donne p'. Les corrections de pression calculées sont ensuite ajoutées au champ de pression et sont utilisées pour corriger les composantes de vitesse. On résout alors les équations de conservation pour toutes les autres grandeurs scalaires. Une fois ces opérations terminées, on recommence avec le nouveau champ de pression jusqu'à convergence. L'algorithme SIMPLEST implanté dans PHOENICS [10] est quelque peu différent de SIMPLE. Il en diffère principalement dans le sens où, pour les équations de quantité de mouvement, seuls les termes de diffusion sont pris en compte dans les expressions des a_i, et par conséquent, les termes de convection sont ajoutés en termes source. Cette modification a été apportée pour compenser le fait que SIMPLE avait tendance à surestimer les corrections de pression à chaque itération [1, 11], ce qui nécessitait une sous-relaxation importante.

7. Relaxation

La résolution des systèmes d'équations obtenus pour chaque grandeur à chaque itération doit permettre d'assurer la convergence progressive des calculs. Dans le but de faciliter leur convergence, PHOENICS propose deux méthodes de relaxation différentes. La première méthode (traditionnelle) consiste après chaque itération à ne prendre qu'une partie de la correction calculée. On utilise ainsi

$$\phi_P = \phi_P^{old} + \omega \left(\phi_{PC} - \phi_P^{old}\right)$$

où ω le coefficient de relaxation et ϕ_{PC} la valeur calculée de ϕ_P après résolution du système.

La seconde méthode consiste à modifier le système d'équations avant même sa résolution en utilisant un “faux pas de temps” qu'il est possible de fixer pour chaque variable. Suivant cette méthode, on ajoute donc au coefficient a_P le rapport de la masse de fluide située dans la cellule au faux pas de temps spécifié pour la variable et le produit de ce terme par l'ancienne valeur de la variable au coefficient b_P. Dans l'expression $a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + a_S\phi_S + a_N\phi_N + b_P$, les coefficients a_P et b_P deviennent ainsi $a_P + m/DTF$ et $b_P + m\ \phi_P^{old}/DTF$ respectivement (*DTF* désignant la valeur du faux pas de temps). On conserve bien sûr l'unité de a_P (kg.s^{-1}).

On remarque que si la valeur du faux pas temps est très grande, les grandeurs ajoutées aux deux coefficients a_P et b_P deviennent très faibles si bien que l'on retrouve l'équation initiale et qu'aucune relaxation n'est alors utilisée (équivalent à la première méthode avec $\omega=1$). Par contre, si la valeur du faux pas de temps est très faible, les deux quantités ajoutées deviennent prédominantes et l'équation devient peu différente de $\phi_P = \phi_P^{old}$ (équivalent à la première méthode avec $\omega=0$). Par conséquent, l'utilisation d'un faux pas de temps qui tendrait vers l'infini ne provoque pas forcément la divergence d'un calcul et l'utilisation d'un faux pas de temps très faible est susceptible de ralentir la convergence de manière importante. Le nom “faux pas de temps” provient du fait qu'il s'agit exactement du terme qui serait ajouté en régime instationnaire suivant un schéma implicite (de discrétisation temporelle). Néanmoins, si en régime instationnaire, le pas de temps doit respecter des critères stricts, dans le cas présent, seule la solution stationnaire importe et aucun critère physique n'est à respecter (si ce n'est que la convergence puisse être obtenue).

Pratiquement, une méthode de relaxation traditionnelle est utilisée pour l'équation de pression alors que la technique “faux pas de temps” s'emploie plus souvent pour les autres grandeurs. Dans ce cas, un ordre de grandeur du “faux pas de temps” peut être déterminé en fonction de la taille des cellules et de la vitesse de l'écoulement (proportionnel à la taille des cellules et inversement proportionnel à la vitesse de l'écoulement).

8. Méthodes de résolution

Nous avons vu que la forme des équations à résoudre pour chaque grandeur ϕ s'écrit

$$\phi_P = \frac{\sum_{nb} a_i \phi_i + b_P}{a_P}$$

où l'indice P représente chaque cellule du maillage et (nb) désigne le nombre de cellules voisines à P (2 pour un cas 1D, 4 pour un cas 2D et 6 pour un cas 3D). Il s'agit donc de résoudre à chaque itération et pour chaque grandeur résolue, le système formé par les n équations (n correspondant au produit des nombres de cellules suivant chacune des dimensions).

Différentes méthodes de résolution peuvent être utilisées afin de résoudre chacun des systèmes d'équation obtenus pour chaque grandeur. On peut ainsi utiliser les procédures point par point (suivant la méthode de Jacobi), tranche par tranche "slab by slab" ou domaine entier "Whole Field".

La procédure point par point est de loin la plus rapide mais nécessite en contre partie un nombre d'itérations plus important.

La procédure tranche par tranche est celle utilisée par défaut. Dans le cas d'une simulation 2D, si une tranche est par exemple définie pour un même (x) et en supposant pour chaque tranche que les grandeurs dans les tranches voisines sont connues, on aboutit à un système tri-diagonal suivant (y) et la résolution est donc rapide. Dans le cas d'une simulation 3D, si une tranche est par exemple définie pour un même (z) et en supposant que les grandeurs dans les tranches voisines et aux (y) voisins sont connues lors des itérations suivant (x) et réciproquement lors des itérations suivant (y), on aboutit à nouveau à des systèmes tri-diagonaux. Nous verrons que cette procédure est idéale pour les simulations paraboliques dans la mesure où on aura pas à revenir sur une tranche une fois la convergence obtenue sur celle-ci.

La procédure "Whole Field" est la plus coûteuse au niveau temps de calcul mais nécessite moins d'itérations pour obtenir la convergence. Si on considère le cas 3D précédent, suivant la procédure "Whole Field", les itérations suivant (z) s'effectuent comme pour les deux autres directions, c'est à dire par résolution d'un système tri-diagonal obtenu sous l'hypothèse que les grandeurs sont connues dans les (x) et (y) voisins.

Dans PHOENICS, la procédure de résolution doit être définie pour chacune des variables résolues. En effet, il est possible d'utiliser la procédure point par point pour une variable, tranche par tranche pour une autre et "Whole Field" pour une troisième. Par exemple, lors de calculs de jets libres en elliptique, nous utilisons généralement la procédure "Whole Field" pour l'équation de continuité et la procédure "slab by slab" pour toutes les autres équations car après un certain nombre de tests, cette méthode est apparue la plus efficace et la plus économique.

9. Calculs paraboliques

Pour les écoulements possédant une direction fortement privilégiée, la composante de vitesse suivant cette direction est toujours positive (pas de recirculation). En considérant notre exemple 2D précédent et en supposant que la direction x est la direction privilégiée, on a alors la condition

$$u_e > 0$$

sur tout le domaine si bien que

$$\left[0, -(\rho u)_e\right] = 0 \qquad et \qquad \left[0, (\rho u)_e\right] = (\rho u)_e$$

Avec cette simplification, et en considérant le cas d'un schéma "amont", on voit immédiatement que le terme de convection disparaît dans l'expression de a_E. Le terme de diffusion suivant la direction privilégiée étant très petit devant les autres termes (par exemple, dans le cas d'un jet, le gradient axial de vitesse est petit devant le gradient radial et encore plus petit devant le terme de convection axial), il vient alors

$$a_E = 0 \qquad et \qquad a_W = (\rho u)_w dydz$$

et les équations discrétisées prennent la forme

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_S \phi_S + a_N \phi_N + b_P$$

Dans le cas de l'équation de quantité de mouvement suivant la direction principale, le gradient de pression est également négligé (ou bien peut être strictement fixé par l'utilisateur). Par conséquent, si une tranche initiale amont est définie, chaque tranche peut être calculée successivement en fonction de la tranche précédente, les grandeurs avales n'intervenant pas dans les équations discrétisées. Pour chaque tranche, les ϕ_W étant définitivement déterminés à la tranche précédente, la matrice formée par l'ensemble des équations discrétisées sur une tranche est alors tri-diagonale si bien que la résolution de manière "slab by slab" devient alors très avantageuse par rapport à une résolution "point by point". Dans le cas d'écoulements 3D paraboliques, Patankar & Spalding [8], ont proposé d'utiliser une procédure similaire en considérant les mêmes hypothèses de manière à ne résoudre que des systèmes tri-diagonaux.

Nous venons d'indiquer la façon de procéder au sein de PHOENICS, concernant la formulation générale des équations traitées et l'introduction des conditions aux limites ou des termes sources. Nous avons vu que la façon de traiter ces termes étaient en fait la même (l'introduction des conditions aux limites se faisant toujours par le biais de termes sources ajoutés aux équations.

10. Fonctions de paroi

Nous avons indiqué les expressions des coefficients et valeurs à utiliser pour représenter l'effet d'une paroi si les cellules au voisinage de cette paroi font partie de la sous-couche laminaire.

Néanmoins, pour un écoulement turbulent tangentiel à une paroi, il est possible d'éviter un raffinement trop important et de diminuer ainsi le nombre de cellules par utilisation de fonctions de paroi (cette façon de faire est même souvent nécessaire dans la mesure où les modèles de turbulence les plus utilisés ne sont pas valides dans la sous-couche visqueuse). Bien que les fonctions de paroi traditionnelles soient très souvent développées dans la littérature [12, 13, 14, 15], il est tout de même utile d'en rappeler la teneur. La fonction de paroi la plus utilisée est de loin la loi logarithmique pour laquelle le facteur de frottement

$$s = \frac{\tau}{\rho v^2}$$

est donné par la résolution (suivant une méthode itérative) de

$$s^{1/2} = 2.5 \ln\left(9.0 \mathrm{Re}_w \, s^{1/2}\right) \qquad /1$$

où

$$\mathrm{Re}_w = \frac{vn}{\nu_l}$$

où v est la composante de vitesse tangentielle à la paroi,

n la distance du centre de la cellule à la paroi,

ν_l la viscosité cinématique laminaire

et τ la contrainte de cisaillement à la paroi.

Dans la littérature, on trouve plus souvent cette expression sous la forme

$$s^{1/2} = 2.5 \ln\left(y^+\right) + 5.5$$

où $y^+ = \mathrm{Re}_w \, s^{1/2}$.

Au sein de PHOENICS, par précaution, une constante de 1.01 est ajoutée à l'intérieur du logarithme dans l'**équation 1**. Cet ajout n'a aucun effet si l'on reste dans le domaine de validité de la loi ($y^+ > 30$) [12] mais permet d'éviter d'éventuels arguments négatifs du logarithme si un utilisateur s'en éloigne trop par négligence.

Dans la mesure où pour un écoulement laminaire, on a

$$\tau = \mu_l \frac{v}{n} \quad \text{et} \quad s = \frac{1}{\mathrm{Re}_w},$$

le facteur de frottement considéré est le maximum de celui obtenu lors de la résolution de l'**équation 1** et $1/\mathrm{Re}_w$.

Concernant la transition loi log / loi laminaire, elle s'effectue pour $y^+ = 0.35$ ou $s = 8.22$, c'est à dire bien en dehors du domaine de validité de la loi logarithmique.

A EDF [16, 17], la loi de frottement généralement utilisée est la loi de Reichard qui présente l'avantage d'être utilisable quelle que soit la gamme du Reynolds local. Suivant cette loi, le facteur

de frottement calculé est similaire à celui obtenu par résolution de l'**équation 1** lorsque $y^+ > 30$ mais tend vers $1/\mathrm{Re}_w$ lorsque Re_w tend vers 0. Comme, nous l'avons montré en traçant $s(\mathrm{Re}_w)$ [18], l'évolution obtenue ne présente alors aucune cassure.

Concernant le terme source à utiliser pour représenter la fonction de paroi, le coefficient prend la valeur $s\rho v$ (ou τ / v) alors que la valeur correspond à la vitesse de la paroi (0 le plus souvent).

Les conditions à la paroi pour l'énergie cinétique de turbulence *k* et son taux de dissipation ε sont alors

$$k_w = \left|v^*\right|^2 / \sqrt{C_\mu} \quad \text{et} \quad \varepsilon_w = C_\mu^{3/4} k_w^{3/2} / \kappa n = \left|v^*\right|^3 / \kappa n$$

où $v^* = \sqrt{\tau/\rho} = \sqrt{s}v$ est la vitesse de frottement à la paroi.

Concernant le nombre de Stanton (qui équivaut au coefficient de frottement pour l'équation d'énergie), la façon la plus simple de procéder est d'utiliser

$$St = s/\mathrm{Pr}$$

pour un écoulement laminaire et

$$St = s/\mathrm{Pr}_t$$

pour un écoulement turbulent.

Le flux thermique transmis à la paroi s'exprime alors

$$\frac{\alpha}{Cp}(h - h_w) = St\rho v(h - h_w)$$

d'où un coefficient égal à $St\rho v$ et une valeur égale à h_w, l'enthalpie du fluide à la température de la paroi.

Au sein de PHOENICS [12], le nombre de Stanton est calculé suivant la formule de Launder et Spalding basée elle même sur la corrélation plus complexe de Jayatillaka. Ainsi

$$St = \frac{s}{\mathrm{Pr}_t\left[1 + 9.0\left(\frac{\mathrm{Pr}}{\mathrm{Pr}_t} - 1\right)\left(\frac{\mathrm{Pr}_t}{\mathrm{Pr}}\right)^{1/4} s^{1/2}\right]}$$

Néanmoins, dans les versions 2.x et antérieures, aucune précaution n'était prise concernant cette équation. Ainsi, en ne respectant pas la gamme de validité des fonctions de paroi, il était possible d'arriver à un cas tel que

$$9.0\left(\frac{\mathrm{Pr}}{\mathrm{Pr}_t} - 1\right)\left(\frac{\mathrm{Pr}_t}{\mathrm{Pr}}\right)^{1/4} s^{1/2} < -1$$

et d'aboutir donc à un coefficient d'échange négatif. Dans notre cas, la présence d'hydrogène dans le plasma fait que le terme $\mathrm{Pr}/\mathrm{Pr}_t - 1$ peut parfois être significativement inférieur à 0 (suivant la température) et par conséquent cette limite peut être atteinte plus facilement. Nous avons donc été confronté à ce problème en testant l'utilisation des fonctions de paroi dans le cas de jets de plasma

impactant. Les points les plus à risque sont ceux les plus proches du point d'arrêt pour lesquels le facteur de frottement *s* devient très grand. Le “User Support” de CHAM a été prévenu, dès vérification, de ce petit problème et nous avons proposé une solution simple permettant d'y remédier [18].

1 S.V. Patankar, “Numerical Heat transfer and Fluid Flow”, Hemisphere Publishing Corporation (1980).

2 M. Zijlema, P. Wesseling, “Higher-Order Flux-Limiting Schemes for the Finite Volume Computation of Incompressible Flow”, *International Journal of Computational Fluid Dynamic*, **9**, 89-109 (1998).

3 P. Wesseling, M. Zijlema, A. Segal, C.G.M. Kassels, “Computation of turbulent flow in general domains”, *Mathematics ans Computers in Simulation*, **44**, 369-385 (1997).

4 M. Zijlema, “On the Construction of a Third-Order Accurate Monotone Convection Scheme with Application to Turbulent Flows in General Domains”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **22**, 619-641 (1996).

5 CHAM, “TR 100 - The PHOENICS Beginner's Guide”.

6 CHAM, “TR 200 - The PHOENICS Reference Manual”.

7 CHAM, “POLIS - PHOENICS On-Line Information System”.

8 S.V. Patankar, B. Spalding, “A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows”, *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, **15**, 1787-1806 (1972).

9 S.A. Al-sanea, W.M. Pun, D.B. Spalding, “Computation of two-dimensional elliptic flows, including heat transfer”, Imperial College, London, Mechanical Engineering Department, Report HTS/78/5 (1978).

10 D.B. Spalding, “Four Lectures on the PHOENICS Code”, Imperial College, London, Mechanical Engineering Department, Report CFD/82/5 (1982).

11 D.A. Anderson, J.C. Tannehill, R.H. Pletcher, “Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer”, Hemisphere Publishing Corporation, p 517 (1984).

12 M.R. Malin, D.B. Spalding, “Turbulence Modelling for the prediction of turbulent jets, wakes and plumes”, Imperial College, London, Mechanical Engineering Department, Report CFD/84/5 (1984).

13 V. Maupu, D. Laurence, “Non-orthogonal calculation procedures using second moment closure”, *EDF - Direction des Etudes et Recherches*, Internal Note N°93NB00037, (1993).

14 F. Baron, A. Caruso, J. Dupleix, L. Lefevre, “Extension to incompressible algorithms to compressible flows: Validation of a governing valve mock up”, *EDF - Direction des Etudes et Recherches*, Internal Note N°95NB00017, (1995).

15 D. Thaivan, J.P. Minier, O. Simonin, P. Freydier, J. Olive, “Multidimentional two-fluid model computation of turbulent dispersed two-phase flows”, *EDF - Direction des Etudes et Recherches*, Internal Note N°95NB00089, (1995).

16 A. Caruso, N. Mechitoua “Use of the finite element method to solve variable density Navier-Stokes equations taking turbulence into account”, *EDF - Direction des Etudes et Recherches*, Internal Note N°93NB00057, (1993).

17 A. Caruso, N. Mechitoua “Finite element computation of a turbulent diffusion flame”, *EDF - Direction des Etudes et Recherches*, Internal Note N°93NB00074, (1993).

18 R. Bolot, V. Monin, M. Imbert, C. Coddet, “Mathematical Modeling of a Plasma Jet Impinging on a Flat Structure”, in *Thermal Spray : Meeting the Challenges of the 21th Century*, (Proceedings of the International Thermal Spray Conference, Nice, 1998), Vol. 1, pp. 439-444, Ed. C. Coddet, Pub. ASM Int., Materials Park, OH-USA (1998).

Résumé

Cette étude s'inscrit dans le cadre de l'amélioration de la maîtrise du procédé de projection thermique à la torche à plasma d'arc soufflé.
Le développement d'un code de calcul des propriétés thermodynamiques et des coefficients de transport des plasmas thermiques est réalisé dans un premier temps : les méthodes de calcul utilisées sont décrites et des résultats numériques sont présentés.
Les données calculées sont utilisées dans un second temps pour permettre la détermination des champs de température et de vitesse dans les jets de plasma d'arc soufflé : l'influence de différents éléments tels que le modèle de turbulence ou la nature du gaz environnant sont mis en évidence.
Le cas des jets de plasma impactants sur une surface plane est abordé dans un troisième temps : un modèle permettant la prédiction des échanges thermiques est suggéré et les flux thermiques calculés sont comparés à des résultats expérimentaux.
La dernière partie est consacrée à l'étude de la projection de matériaux pulvérulents. Une approche Lagrangienne est utilisée pour simuler les interactions jet/particules. Un couplage avec l'équation de conduction de la chaleur au sein d'une particule isolée est notamment réalisé et les caractéristiques de particules en vol sont comparées à des mesures expérimentales obtenues avec un système optique.
Le code de calcul PHOENICS™ est utilisé pour les calculs des écoulements de plasma.

Mots clés : Projection thermique, modélisation, propriétés thermodynamiques, coefficients de transport, plasmas d'arc soufflé, turbulence, jets ronds, transferts thermiques, interactions jets/particules.

Abstract

The present study is devoted to the modeling of thermal spray processes.
Firstly, a Gibbs free energy minimization method is used in order to determine thermodynamic properties of thermal plasmas. Transport coefficients are then deduced from kinetic theory of gases. Some numerical results are proposed.
In a second step, calculated data are used in order to determine temperature and velocity fields in plasma jets and the influence of different parameters such as the turbulence model or the surrounding gas nature is shown.
In a third step, the case of a plasma jet impinging on a flat plate is studied. In view of the comparison between thermal exchanges predictions and measurements taken from the literature, the proposed model seems to be able to describe impinging plasma jets successfully.
The last part of the study deals with the spray of powder materials. A Lagrangian model is used for the simulation of jet/particles interactions. In the model, allowance is made for non-continuum effect, vaporization effect, internal heat conduction within particles as well as the effect of highly variable properties in the boundary layer around particles. Predictions of in-flight particles characteristics are compared with measurements obtained using an optical sensing device.
The PHOENICS™ computational fluid dynamic code is used for plasma flows calculations.

Key words: Thermal spray, modeling, thermodynamic properties, transport coefficients, burning arcs, turbulence, round jets, thermal exchanges, plasma/particles interactions.

***L**aboratoire d'**E**tudes et de **R**echerches sur les **M**atériaux et les **P**ropriétés de **S**urface*
***U**niversité de **T**echnologie de **B**elfort-**M**ontbéliard*
Site de Sévenans - 90010 Belfort Cedex