

MODELISATION DES TRANSFERTS DE MASSE ET DE CHALEUR DANS UNE TORCHE PLASMA TRIPHASEE FONCTIONNANT SOUS HYDROGENE : INFLUENCE DU RAYONNEMENT ET DE LA TRES HAUTE PRESSION

Maxime GAUTIER⁽¹⁾, Yann CRESSAULT⁽²⁾, Sabri TAKALI⁽¹⁾, Vandad ROHANI⁽¹⁾ et Laurent FULCHERI⁽¹⁾

⁽¹⁾ MINES ParisTech, PSL-Research University, PERSEE Centre procédés, énergies renouvelables et systèmes énergétiques, CS 10207 rue Claude Daunesse 06904 Sophia Antipolis, FRANCE

Email: maxime.gautier@mines-paristech.fr

⁽²⁾ Université de Toulouse, UPS, INPT, LAPLACE (Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie), 118 route de Narbonne, F-31062 Toulouse Cedex 9, France

Tel : +33.561.558.221, Email : cressault@laplace.univ-tlse.fr

Résumé : Cette étude présente une modélisation CFD simplifiée (modèle source), tridimensionnelle, du fonctionnement d'une torche plasma AC triphasée fonctionnant sous hydrogène d'une puissance de 250 kW en attachant une importance toute particulière aux transferts de chaleur par rayonnement et à l'influence de la pression. L'écoulement est considéré turbulent, Les équations de Navier-Stokes sont résolues en utilisant un modèle RNG k-ε. La résolution de l'équation de transfert radiatif est effectuée en utilisant le modèle aux ordonnées discrètes et en utilisant 3 bandes spectrales. Les coefficients d'absorption, utilisés pour cette résolution, proviennent d'un modèle numérique unique et très détaillé générant les propriétés radiatives d'un plasma de manière précise en prenant en compte les spectres atomiques et moléculaires continus, les raies atomiques, et les bandes moléculaires. Ces données ont été intégrées sur les différentes bandes spectrales utilisées dans le modèle aux ordonnées discrètes. Cette étude s'intéresse particulièrement aux effets du rayonnement sur l'écoulement dans le réacteur et aussi sur les flux de chaleur aux parois. Les résultats sont présentés pour deux pressions opérationnelles : 1 bar et 20 bars.

Mots clés : rayonnement, plasma, hydrogène, très haute pression, torche AC triphasée

Introduction

Les procédés de conversion thermochimique d'hydrocarbures par voie plasma ont fait l'objet, depuis de nombreuses années, d'études au sein du groupe PERSEE Mines-ParisTech [1-3]. Ces recherches ont notamment mené au développement d'une technologie plasma triphasée originale [4]. Dans la plupart des études conduites jusqu'à présent, le rayonnement du plasma n'était pas pris en considération ou quasiment négligé [5]. Les mesures expérimentales menées par Pateyron [6], sur des plasmas d'hydrogène, ont montré que la puissance radiative était de l'ordre de 30% de la puissance électrique fournie et ne peut donc être négligée. De plus, ces observations expérimentales sont cohérentes avec les résultats de récentes simulations CFD-MHD relatives à la technologie plasma triphasé [7]. Il apparaît alors évident d'attacher une importance toute particulière aux phénomènes radiatifs et à leur modélisation de manière fine. En partenariat avec le Laboratoire LAPLACE de l'Université Paul Sabatier, spécialisé dans le rayonnement émis par les plasmas [8-10], cette étude cherche à évaluer l'influence du rayonnement sur les transferts de masse et de chaleur dans une torche plasma triphasée d'une puissance

d'environ 250 kW, en cours de développement à PERSEE MINES-ParisTech, fonctionnant sous hydrogène sous des pressions comprises entre 1 et 20 bars.

1. Modèle numérique

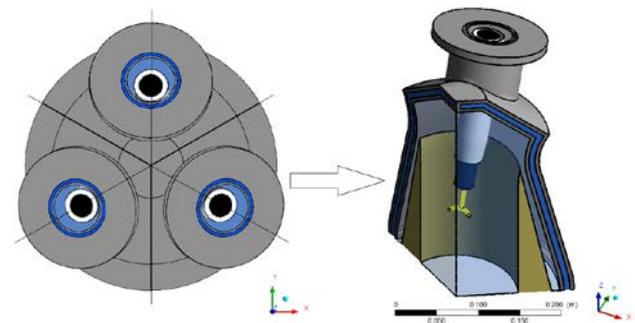


Figure 1 : Vue du dessus et vue 3D du tiers de la torche modélisée

La torche plasma triphasée peut être décrite par une enceinte de confinement en acier réfrigéré par un circuit interne d'eau froide, de trois électrodes en graphite et de leur support respectif en nitrure de bore, et d'une couche protectrice en céramique à

l'intérieur de l'enceinte pour limiter les pertes et les contraintes thermiques sur les parois en acier. La géométrie possède trois plans de symétrie, ce qui permet de réduire le domaine à modéliser à un tiers du réacteur. La figure 1 montre une vue du dessus de la torche rendant visible les trois plans de symétrie et le découpage en tiers. La figure 2 présente un schéma du plan de coupe vertical du réacteur qui rend compte des matériaux utilisés et très succinctement du sens des écoulements. Pour un tiers de réacteur, il y a deux entrées fluides ; une autour du support de l'électrode (entrée principale) et une à plus faible section autour de l'électrode (entrée secondaire). Les débits dans les conditions normales de pression et de température (1 atm, 300 K) sont de $92.3 \text{ Nm}^3\text{h}^{-1}$ pour l'entrée principale et de $230 \text{ Nm}^3\text{h}^{-1}$ pour l'entrée secondaire. Le débit d'eau est de $4.32 \text{ Nm}^3\text{h}^{-1}$ et a été calculé de manière à ce que la variation en température de l'eau entre l'entrée et la sortie ne dépasse pas une vingtaine de degrés.

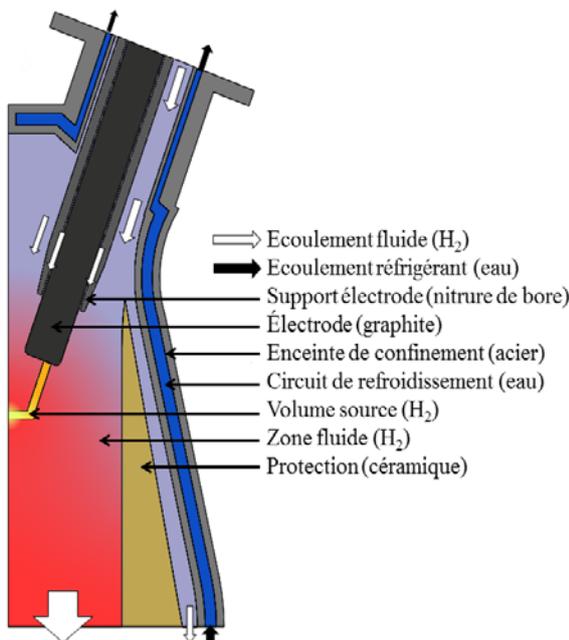


Figure 2 : Schéma plan de coupe du réacteur

Le logiciel FLUENT 14.5 a été utilisé pour la résolution en régime stationnaire du système d'équations couplées résultant des lois de conservation en masse, en quantité de mouvement et en énergie, du modèle de turbulence RNG $k-\epsilon$ et enfin de l'équation de transfert radiatif. Le traitement de la turbulence à proximité des parties solides prend en compte un modèle à deux couches pour améliorer le traitement en parois. Le modèle DO (Discret Ordinates) est utilisé pour la résolution de l'équation de transfert radiatif. La densité, la capacité calorifique, la conduction thermique et la viscosité de l'hydrogène ont été calculées avec le code de calcul T&Twiner [11] sur une plage de température allant de 300 K à 20 000 K. Le calcul de l'absorption

radiative de l'hydrogène est détaillé dans la section suivante. Les propriétés thermiques de l'eau et des matériaux solides sont considérés comme constantes et égales aux valeurs tabulées par la littérature à température ambiante.

Le volume source est soumis à une puissance volumique qui intervient comme terme source dans l'équation de l'énergie, et une force volumique qui intervient comme terme source dans l'équation de la quantité de mouvement. La puissance volumique représente la puissance libérée par effet Joule par unité de volume, elle est égale au tiers de 250 kW divisé par le volume de la source. Le terme source en quantité de mouvement représente la force due aux forces de Lorentz sur le fluide [12-14]. La résolution du système d'équations en régime stationnaire repose sur un *moyennage* des phénomènes instationnaires liés au courant alternatif (50 Hz) dans un volume source estimé à partir des résultats des simulations MHD instationnaires faites sur une géométrie triphasée [13]. La forme qui en résulte est proche d'un tore reliant chaque électrode par un pied d'arc colinéaires avec les axes des électrodes [12]. Le volume source considéré ici est de 4 cm^3 .

Suite à une étude de sensibilité sur la finesse de maillage à adopter, le maillage du réacteur choisi comporte 375 000 nœuds. Une étude de sensibilité a aussi été faite sur le nombre de rayons à utiliser pour la discrétisation angulaire du modèle radiatif. Il en résulte qu'une discrétisation angulaire de neuf rayons (trois selon l'azimute et trois selon l'altitude) est suffisante pour réduire l'erreur commise sur le champ de température à moins de 1%. Selon cette configuration, le temps de calcul pour que le système converge vers une solution est d'environ 1 heure sans modèle radiatif et 4 heures avec modèle radiatif. La station de calcul utilisée comporte sept processeurs fonctionnant en parallèle avec une cadence de 2.4 GHz.

2. Données spectrales de l'hydrogène

L'équation de transfert radiatif résolue dans cette modélisation est visible équation (1). Elle néglige la diffusion. L'indice de réfraction, n , est gardé unitaire.

$$\nabla \cdot (I_{\lambda} \cdot \mathbf{s}) = \kappa_{a,\lambda} \left(n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} - I_{\lambda} \right) \quad (1)$$

Plusieurs bases de données spectrales des coefficients d'absorption, notés $\kappa_{a,\lambda}$, ont été développées depuis les années 1970 sur l'hydrogène [15-17]. Dans les simulations présentées, les coefficients d'absorption utilisés découlent des travaux récents de T. Billoux [14] qui considère à la

fois les contributions atomiques et moléculaires. Cette base de données est définie pour des températures comprises entre 300 et 30 000 K et des longueurs d'ondes allant de 0,209 μm jusqu'à l'infrarouge lointain. Elle prend en compte le rayonnement provenant du continuum moléculaire (H_2), des continums atomiques (H , H^- , H^+), des bandes moléculaires diatomiques (H_2), et des raies atomiques (74 pour l'hydrogène). Des Coefficients Moyens d'Absorption (CMA) ont été calculés en intégrant cette base de donnée sur les 3 bandes spectrales suivantes : $[3,33\text{E}-2 - 1,67\text{E}-1]$, $[1,67\text{E}-1 - 3,33]$ et $[3,33 - 1,00\text{E}+2]$ μm . Une moyenne de Planck a été utilisée pour moyenner les coefficients d'absorption à pression atmosphérique alors qu'une moyenne de Rosseland a été préféré pour le calcul des CMA à 20 bars, ceci afin de respecter au mieux les domaines de validité des moyennes opérés. Une comparaison satisfaisante des CMA ici calculés a été faite en comparant avec la littérature existante [12]. Dans cette étude, aucun traitement particulier sur les raies n'est fait ce qui peut amener à surestimer légèrement les CMA moyens, notamment en ce qui concerne la moyenne de Planck [9]. La Figure 3 montre les CMA pour les deux valeurs en pression et pour les trois bandes spectrales considérées. On peut observer que les valeurs des coefficients d'absorption à 20 bars ont en moyenne deux ordres de grandeur de plus que celles à pression atmosphérique. Ainsi les transferts radiatifs à 20 bars sont attendus d'être plus importants.

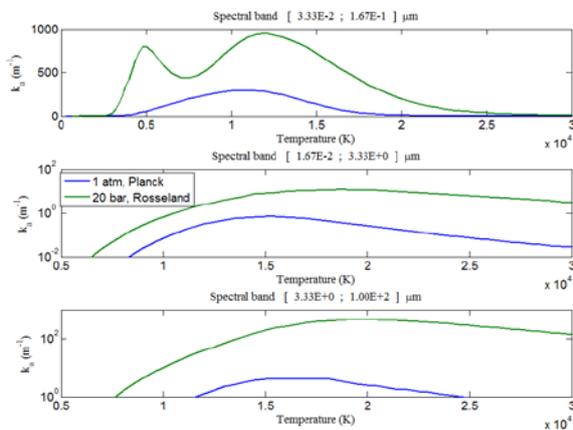


Figure 3 : Coefficients Moyens d'Absorption à pression atmosphérique et à 20 bars en fonction de la température pour 3 bandes spectrales

3. Résultats

3.1. Influence du modèle radiatif

En comparant les résultats sur le champ de température avec et sans modéliser les transferts radiatifs à pression atmosphérique, on observe que l'enceinte en acier et la protection en céramique sont plus chaudes avec la prise en compte du rayonnement. Les résultats en température pour les

différentes pièces de la géométrie sont résumés Tableau 1. Notons que les pertes de chaleur aux parois sont de seulement 0.86% de la puissance totale injectée sans prendre en compte le rayonnement ce qui démontre l'extrême efficacité de l'isolation interne en céramique et l'effet de gainage/isolation de l'écoulement de gaz froid dans l'espace compris entre l'isolant céramique et la paroi refroidie par eau. Ces pertes atteignent 30% lorsque le rayonnement est considéré. Les bilans des flux radiatifs sont cohérents avec les données expérimentales de Pateyron [6]. Le calcul avec rayonnement montre l'apparition d'une zone chaude sur la céramique, l'eau et l'acier sur un plan horizontal passant par la zone d'arc.

Tableau 1 : Données en température et en puissance perdue aux parois sans et avec la prise en compte des transferts radiatifs

	T° moy (K)		Tmax - Tmin	
	Sans ray	Avec ray	Sans ray	Avec ray
Electrode	8,90E+02	1,21E+03	2,89E+03	2,61E+03
Fluide	1,61E+03	1,66E+03	1,56E+04	1,15E+04
Arc	1,33E+04	1,16E+04	1,25E+04	9,12E+03
Eau	3,00E+02	3,10E+02	3,21E+00	8,04E+01
Acier	3,02E+02	3,84E+02	3,95E+01	6,43E+02
Céramique	1,22E+03	1,66E+03	2,86E+03	7,58E+02

	Sans ray	Avec ray
P_out parois	0,86%	30,0%

*ray : prise en compte ou non des transferts radiatifs

3.2. Influence de la pression

La pression opérationnelle est fixée à 20 bars. Les données thermodynamiques ainsi que les propriétés spectrales ont été recalculées à cette nouvelle pression. Les vitesses d'entrées de l'hydrogène ont été divisées par un facteur 20 de manière à conserver le même débit massique qu'à pression atmosphérique. L'analyse et le calcul du nombre de Froude appliqué aux forces électromagnétiques montre que les effets des forces Lorentziennes sur l'écoulement du fluide est proportionnel à l'inverse de la vitesse. Réduire la vitesse du fluide revient à augmenter l'effet des forces de Lorentz sur le fluide. Les valeurs des forces Lorentziennes volumiques ont donc été divisées par un facteur 20 afin de garder la même déviation du fluide par ces forces. Le Tableau 2 montre une étude comparative sur les champs moyens en température des différents constituants de la torche plasma pour le cas à 1 atm et pour le cas à 20 bar. En première observation il apparaît, de manière assez surprenante, que les résultats ne diffèrent que très peu en

comparaison avec les fortes différences des coefficients d'absorption. Les puissances perdues aux parois sont d'ailleurs sensiblement égales. Ces résultats s'expliquent là encore par les très faibles pertes convectives dans la torche plasma. Néanmoins, l'analyse plus précise des champs en température montre une zone très chaude du fluide (>5000 K) plus étalé dans le cas à 20 bar que dans le cas à pression atmosphérique.

Tableau 2 : Données en température et en puissance perdue aux parois avec prise en compte des transferts radiatifs à 1 atm et à 20 bars

	T° moy (K)		Tmax - Tmin	
	1 atm	20 bars	1 atm	20 bars
Electrode	1,21E+03	1,17E+03	2,61E+03	2,96E+03
Fluide	1,66E+03	1,79E+03	1,15E+04	1,17E+04
Arc	1,16E+04	1,22E+04	9,12E+03	8,72E+03
Eau	3,10E+02	3,10E+02	8,04E+01	7,12E+01
Acier	3,84E+02	3,83E+02	6,43E+02	5,91E+02
Céramique	1,66E+03	1,67E+03	7,58E+02	7,22E+02

	1 atm	20 bars
P_out parois	29,9%	29,5%

Conclusion

Cette étude a permis de montrer l'importance des échanges radiatifs pour un plasma d'hydrogène à haute température. La base de données des propriétés radiatives utilisées est issue d'important et long travaux aux seins du laboratoire LAPLACE. Son application dans la modélisation du procédé plasma développé au centre PERSEE de Mines-ParisTech et les premiers résultats sont très encourageants. Les simulations produites dans cette étude ont permis notamment de confirmer le rôle clé de la protection en céramique pour réduire les transferts convectifs de chaleur aux parois, que ce soit à pression atmosphérique ou à 20 bars.

Références

- [1] L. Fulcheri, Y. Schwob, G. Flamant, Comparison between new carbon nanostructures produced by plasma with industrial carbon black grades, *Journal De Physique Iii*, 7 (1997) 491-503.
- [2] L. Fulcheri, Y. Schwob, From methane to hydrogen, carbon-black and water, *International Journal of Hydrogen Energy*, 20 (1995) 197-202.
- [3] L. Fulcheri, N. Probst, G. Flamant, F. Fabry, E. Grivei, X. Bourrat, Plasma processing: a step towards the production of new grades of carbon black, *Carbon*, 40 (2002) 169-176.
- [4] F. Fabry, G. Flamant, L. Fulcheri, Carbon black processing by thermal plasma. Analysis of the particle formation mechanism, *Chemical Engineering Science*, 56 (2001) 2123-2132.
- [5] I. Deme, Contribution à la modélisation de l'écoulement dans un réacteur plasma pour la fabrication de noirs de carbone : Influence du rayonnement des particules de carbone, 2002, pp. 1 vol. (229 p.).
- [6] 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, (1987).
- [7] C. Rehmert, Étude théorique et expérimentale d'une torche plasma triphasée à arcs libres associée à un procédé de gazéification de matière organique, 2013.
- [8] Y. Cressault, Propriétés des plasmas thermiques dans des mélanges argon-hydrogène-cuivre, 2001, pp. 219 p.
- [9] H.Z. Randrianandraina, Améliorations des méthodes de calcul du transfert radiatif dans des plasmas thermiques : application au SF6, 2011, pp. 1 vol. (115 p.).
- [10] T. Billoux, Élaboration d'une base de données radiatives pour des plasmas de type CwHxOyNz et application au transfert radiatif pour des mélanges air, CO2 et CO-H2, 2013, pp. 1 vol. (226 p.).
- [11] T&Twinner, Université de Limoges, 2009.
- [12] S. Takali, Y. Cressault, Modélisation CFD de l'écoulement dans une torche plasma triphasée de 100 kW fonctionnant à l'air: influence du rayonnement de l'arc, (2015).
- [13] C. Rehmert, V. Rohani, F. Cauneau, L. Fulcheri, 3D Unsteady State MHD Modeling of a 3-Phase AC Hot Graphite Electrodes Plasma Torch, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 33 (2013) 491-515.
- [14] B. Ravary, L. Fulcheri, J. Bakken, G. Flamant, F. Fabry, Influence of the Electromagnetic Forces on Momentum and Heat Transfer in a 3-Phase ac Plasma Reactor, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 19 (1999) 69-89.
- [15] R.W. Patch, Absorption coefficients for hydrogen .3. calculated pressure-induced h2-h vibrational absorption in fundamental region, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 14 (1974) 101-110.
- [16] C. Park, Calculation of radiative properties of non-equilibrium hydrogen plasma, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 22 (1979) 101-112.
- [17] R. Hassan, Calcul du transfert radiatif dans des arcs et des plasmas thermiques : Application à l'hydrogène et au méthane, (1986).