

Modélisation du changement de phase d'une goutte liquide entourée d'un gaz multi-constituant

D. FURFARO^a, R. SAUREL^b

M2P2, 38 rue Joliot-Curie, 13451 Marseille

a. damien.furfaro@rs2n.eu

Résumé :

Les écoulements constitués de gouttelettes liquides dispersées au sein d'un gaz multi-constituant en présence d'évaporation et de condensation apparaissent dans de nombreuses applications liées aux écoulements diphasiques. Cependant, les modèles existants traitent essentiellement le cas de l'évaporation dans le cadre de la combustion de sprays. Cela signifie que l'énergie est transférée du gaz chaud au liquide pour produire son changement de phase. Cette approche est non-symétrique car dans certaines situations, l'énergie est déjà stockée dans la phase liquide et une évaporation explosive (flashing) se produit comme conséquence de la goutte en surpression.

Dans notre approche, un modèle de transfert de masse dans le cadre de gouttelettes est présenté et validé dans chacune des situations : évaporation, flashing et condensation. Il tient compte :

- *du couplage des diffusions de masse et de chaleur dans la phase gazeuse,*
- *de la thermodynamique du gaz multi-constituant.*
- *de la diffusion de chaleur à l'intérieur de la gouttelette liquide, permettant la considération du chauffage et du refroidissement de la goutte. Ces effets sont importants dans des situations telles que l'évaporation et le flashing.*

Le modèle résultant est un système non-linéaire algébrique constitué de trois équations. Il fournit ainsi la température d'interface, le débit massique de gaz et la fraction massique de vapeur d'eau dans le gaz déterminée à l'interface. Ces variables d'interface permettent le calcul des taux de transfert de masse des espèces, de mouvement et d'énergie apparaissant dans les modèles d'écoulements diphasiques moyennés en volume.

Le couplage est réalisé entre le sous-modèle algébrique de transfert de masse et un modèle d'écoulement diphasique moyenné de type Baer et Nunziato (1986). Des résultats numériques sont présentés.

Abstract :

Dispersed liquid droplet flows with evaporation and condensation in multi-component gas mixture made of vapor and other gas phase chemical species such as air occur in many engineering applications dealing with two-phase flows. However, existing models are essentially derived for vaporization occurring in sprays combustion. It means that the energy is transferred from a hot gas to the liquid to produce its phase change. This is thus a non-symmetric approach as in some situations the energy is already stored in the liquid phase and flashing occurs as a consequence of pressure drop.

In our approach, a droplet mass transfer model is derived and is valid in any situation: evaporation, flashing and condensation. It accounts for:

- *coupled heat and mass diffusion in the gas phase,*
 - *thermodynamics of the multi-component gas mixture,*
 - *heat diffusion inside the liquid droplet, enabling consideration of both droplet heating and cooling.*
- These effects are important in evaporating and flashing situations respectively.*

The resulting model consists in an algebraic non-linear system of three equations giving the interface temperature, the mass flow rate and vapor species concentration at the interface. These interfacial variables enable computation of the mass species, momentum and energy transfer rates appearing in volume averaged two-phase flow models.

Computational examples are shown with this mass transfer model embedded in a compressible two-phase flow model of Baer and Nunziato (1986) type.

Mots clefs : Transferts de chaleur et de masse; Lois de Fick et de Fourier; Modèle local et modèle moyenné en volume; Ecoulements diphasiques; Systèmes hyperboliques.

Résumé étendu

Les écoulements constitués de gouttelettes liquides dispersées au sein d'un gaz multi-constituant en présence d'évaporation et de condensation apparaissent dans de nombreuses applications liées aux écoulements diphasiques (combustion dans les moteurs d'automobiles ou de fusées, combustion cryogénique,...). Le gaz peut par exemple être composé de vapeur d'eau et d'autres espèces chimiques telles que l'air.

L'objectif de la présente approche est de modéliser les échanges de chaleur et de masse dans le cadre du mécanisme d'évaporation/condensation sur la base d'une variante symétrique du modèle diphasique de Baer & Nunziato [1] proposée par Saurel et al. [2]. Le terme « symétrique » signifie que les indices des phases peuvent être inversés sans pour autant modifier la formulation finale du modèle.

Le mélange considéré est constitué d'un gaz multi-constituant (g) et d'une phase liquide dispersée (L). Le gaz est composé d'air et de vapeur d'eau dont les fractions massiques sont respectivement définies par les variables $Y_{g,air}$ et $Y_{g,wat}$.

Le modèle considéré est un système d'EDPs hyperbolique, chaque phase possédant ses propres équations de bilan de masse ($\alpha_g \rho_g Y_{g,air}$, $\alpha_g \rho_g Y_{g,wat}$ et $\alpha_L \rho_L$), quantité de mouvement ($\alpha_g \rho_g u_g$, $\alpha_L \rho_L u_L$) et d'énergie ($\alpha_g \rho_g E_g$, $\alpha_L \rho_L E_L$). Une équation sur la fraction volumique (α_g) assure le transport de celle-ci. Par ailleurs, l'ajout d'une équation sur le nombre de gouttelettes d'eau liquide par unité de masse permet la connaissance de l'aire interfaciale A_I entre les phases liquide et gazeuse.

Les termes de transfert de chaleur et de masse sont implémentés en tant que termes sources. Les inconnues relatives à ces transferts sont les suivantes:

- le débit massique de gaz \dot{m}_g ,
- la température d'interface T_I ,
- la fraction massique $Y_{g,wat,I}$ de vapeur d'eau dans le gaz déterminée à l'interface,

- le coefficient d'échange de chaleur au sein de la phase liquide H_{TL} .

Le modèle moyenné général prend donc la forme suivante :

Phase gazeuse (g)

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u_I \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} &= \mu (P_g - P_L) + \frac{A_I \dot{m}_g}{\rho_I} \\
 \frac{\partial \alpha_g \rho_g Y_{g,air}}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g Y_{g,air} u_g}{\partial x} &= A_I \dot{m}_g (1 - Y_{g,wat,I}) \\
 \frac{\partial \alpha_g \rho_g Y_{g,wat}}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g Y_{g,wat} u_g}{\partial x} &= A_I \dot{m}_g Y_{g,wat,I} \\
 \frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g^2 + \alpha_g P_g}{\partial x} &= P_I \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + \lambda (u_L - u_g) + A_I \dot{m}_g u_I \\
 \frac{\partial \alpha_g \rho_g E_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g (\rho_g E_g + P_g) u_g}{\partial x} &= P_I u_I \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + \lambda \bar{u}_I (u_L - u_g) - \mu \bar{P}_I (P_g - P_L) \\
 &\quad - \frac{A_I \dot{m}_g P_I}{\rho_I} + A_I \dot{m}_g [Y_{g,wat,I} H_{g,wat,I} + (1 - Y_{g,wat,I}) H_{g,air,I}] \\
 &\quad + A_I H_{Tg} (T_I - T_g)
 \end{aligned} \tag{1}$$

Phase liquide (L)

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_L}{\partial t} + u_I \frac{\partial \alpha_L}{\partial x} &= -\mu (P_g - P_L) - \frac{A_I \dot{m}_g}{\rho_I} \\
 \frac{\partial \alpha_L \rho_L}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_L \rho_L u_L}{\partial x} &= -A_I \dot{m}_g \\
 \frac{\partial \alpha_L \rho_L u_L}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_L \rho_L u_L^2 + \alpha_L P_L}{\partial x} &= P_I \frac{\partial \alpha_L}{\partial x} - \lambda (u_L - u_g) - A_I \dot{m}_g u_I \\
 \frac{\partial \alpha_L \rho_L E_L}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_L (\rho_L E_L + P_L) u_L}{\partial x} &= P_I u_I \frac{\partial \alpha_L}{\partial x} - \lambda \bar{u}_I (u_L - u_g) + \mu \bar{P}_I (P_g - P_L) \\
 &\quad + \frac{A_I \dot{m}_g P_I}{\rho_I} - A_I \dot{m}_g H_{L,I} + A_I H_{TL} (T_I - T_c) \\
 \frac{\partial \alpha_L \rho_L n_L}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_L \rho_L u_L n_L}{\partial x} &= 0
 \end{aligned} \tag{2}$$

Notons qu'une loi d'état de type 'Stiffened-gas' est utilisée pour la phase liquide, tandis que la phase gazeuse multi-constituante est gouvernée par celle du gaz parfait avec prise en compte de la loi de Dalton.

Enfin, un solveur de relaxation instantané des pressions est utilisé à chaque instant. D'autre part, la relaxation à taux fini des vitesses se base sur le coefficient de frottement proposé par Clift et al. [3].

Les termes de transfert de masse et de chaleur font donc intervenir 4 inconnues ($\dot{m}_g, T_I, Y_{g,wat,I}$ et H_{TL}) dont la détermination va être le fruit de la construction d'un modèle algébrique (0D) de transfert de masse et de chaleur entre une gouttelette liquide et le gaz environnant.

De nombreux efforts ont été réalisés dans cette direction, principalement dans le cadre de la combustion de sprays diphasiques (Spalding [4], Williams [5], Law [6], Abramzon et Sirignano [7], Abramzon et Sazhin [8], Sirignano [9],...).

Notre contribution suit les lignes directrices d'Abramzon et Sirignano [7] (AS89) dans le sens où :

- la méthode permet le calcul des effets de diffusion de chaleur et de masse à l'interface,
- le chauffage de la gouttelette est considéré au-travers d'un coefficient d'échange de chaleur entre l'interface liquide-gaz et le cœur de la gouttelette.

Cependant, le modèle AS89 cherche en particulier à traiter la combustion de sprays. Dans de telles situations, le changement de phase se produit comme le résultat d'un échange de chaleur entre le gaz chaud et la gouttelette initialement froide. Mais dans des situations différentes de la combustion de sprays, un taux de transfert de masse non nul peut provenir de l'énergie déjà emmagasinée au sein de la gouttelette liquide.

Dans notre approche, les contraintes de saturation, la masse et l'énergie à l'interface étant liées de manière non-linéaire, le flashing est désormais possible alors que seule l'évaporation l'était dans les modèles cités précédemment (Figure 1). De plus, les équations à l'échelle locale (celle de la goutte) sont en parfait accord avec le système diphasique d'EDPs (1)+(2).

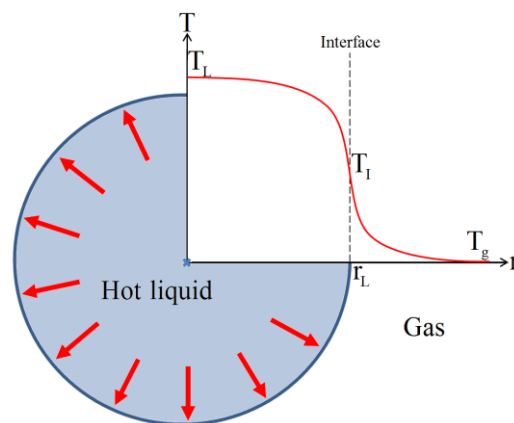


Figure 1: Représentation d'une goutte liquide dont la température est plus grande que celle du gaz environnant. Le modèle proposé est symétrique et permet l'apparition de flashing.

Rappelons que le modèle local présenté ici se base sur la configuration d'une goutte de liquide pur entourée d'un gaz multi-constituant composé d'air et de vapeur d'eau. La construction du modèle passe par la considération d'équations de bilan locales :

- l'équation de conservation de la masse de chaque espèce $i \in \{\text{air, wat}\}$ dans une phase donnée $k \in \{\text{L, g}\}$:

$$\frac{\partial \rho_k Y_{k,i}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k Y_{k,i} \vec{u}_k - \rho_k D_k \vec{\nabla} (Y_{k,i})) = 0,$$

avec D_k le coefficient de diffusion de la phase k .

- l'équation de conservation de l'énergie pour chaque phase k , la dissipation visqueuse étant négligée :

$$\frac{\partial \rho_k E_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k E_k \vec{u}_k + p_k \vec{u}_k + \vec{q}_k) = 0$$

avec le flux de chaleur $\vec{q}_k = -\lambda_{T,k} \vec{\nabla} T_k - \rho_k D_k \sum_i h_{k,i} \vec{\nabla} Y_{k,i}$

De plus, l'écoulement est supposé localement isobare. Cette supposition est réaliste car les fronts d'évaporation se propagent à une vitesse beaucoup plus faible que celle du son. En particulier, cela permet de remplacer l'équation du mouvement par une condition de pression uniforme.

Nous ajoutons deux hypothèses :

- Le système composé des équations de masse et d'énergie précédentes reste le même lorsqu'il est exprimé dans le repère de l'interface.
- De plus, l'accélération de l'interface locale est négligée : la configuration de l'écoulement est alors figée à un instant donné et les dérivées en temps s'annulent.

La Figure 2 représente un volume de contrôle situé au voisinage de la surface de la goutte. Les équations locales de masse et d'énergie sont intégrées sur ce volume de contrôle.

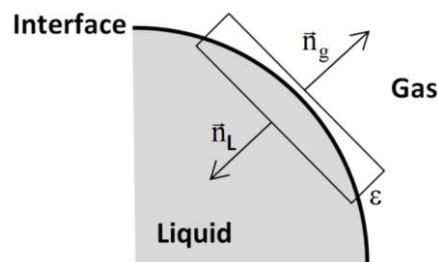


Figure 2: Représentation schématique d'un petit volume de contrôle contenant l'interface.

Une forme algébrique exprimant la condition d'interface pour la masse s'en déduit en premier lieu :

$$\dot{m}_g = \frac{\rho_g H_{Mg} (Y_{g,wat,I} - Y_{g,wat,\infty})}{1 - Y_{g,wat,I}}, \quad (3)$$

où $Y_{g,wat,\infty}$ représente la concentration de vapeur d'eau dans la phase gazeuse loin de l'interface et où H_{Mg} est le coefficient d'échange de masse dans la phase gazeuse déterminé à l'aide de la définition du nombre de Sherwood.

Cette équation exprime le débit massique de gaz émis par une surface liquide sous le seul effet de la diffusion massique moléculaire.

Lorsqu'un déséquilibre thermique est présent, les effets énergétiques doivent être considérés. La forme algébrique exprimant la condition d'interface pour l'énergie offre une seconde expression pour le débit massique de gaz :

$$\dot{m}_g = \frac{H_{Tg} (T_{g,\infty} - T_I) + H_{TL} (T_c - T_I)}{L_{v,wat} (T_I)}, \quad (4)$$

où :

- H_{Tg} est le coefficient d'échange de chaleur dans la phase gazeuse H_{Tg} obtenu à l'aide de corrélations d'échange de chaleur
- $L_{v,wat} (T_I)$ représente la chaleur latente de vaporisation.
- $T_{k,\infty}$ représente la température de la phase k loin de l'interface. En particulier, $T_{L,\infty} = T_c$, la température du cœur de la goutte.

Cette relation peut être utilisée pour déterminer le débit massique de gaz lorsque la diffusion massique moléculaire est absente.

Lorsque les effets de diffusion de chaleur et moléculaire sont simultanément présents, les relations (3) et (4) doivent être considérées.

Par ailleurs, l'interface I est supposée à l'équilibre thermodynamique local, c'est-à-dire à :

- l'équilibre local thermique ($T_{g,I} = T_{L,I} = T_I$),
- l'équilibre local mécanique ($P_{g,I} = P_{L,I} = P_I = P$),
- l'équilibre local chimique ($g_{g,I} = g_{L,I}$), avec g_k l'énergie libre de Gibbs de la phase k.

Dans notre approche, la pression partielle de vapeur d'eau à l'interface est donc égale à la pression de saturation à la température locale :

$$P_{g,wat,I} = P_{sat,wat}(T_I)$$

Nous pouvons en déduire une expression pour la fraction massique de vapeur d'eau à l'interface :

$$Y_{g,wat,I} = \frac{M_{g,wat}}{\hat{M}_g(Y_{g,wat,I})} \frac{P_{sat,wat}(T_I)}{P} \quad (5)$$

$$\text{où } \frac{1}{\hat{M}_g} = \frac{Y_{g,wat,I}}{M_{g,wat}} + \frac{1 - Y_{g,wat,I}}{M_{g,air}}, \text{ avec } \begin{cases} M_{g,air} = 29 \times 10^{-3} \text{ kg.mol}^{-1} \\ M_{g,wat} = 18 \times 10^{-3} \text{ kg.mol}^{-1} \end{cases}$$

Le modèle algébrique local d'échange de chaleur et de masse est ainsi constitué des équations (3), (4) et (5). Il reste à déterminer le coefficient d'échange de chaleur au sein de la phase liquide H_{TL} qui apparaît dans (4).

Pour cela, nous examinons une approche qui consiste à considérer une couche limite entre l'interface et une certaine distance notée δ (Figure 3). Les effets liés au chauffage de la goutte (ou à son refroidissement en cas de flashing) sont en effet d'une importance capitale.

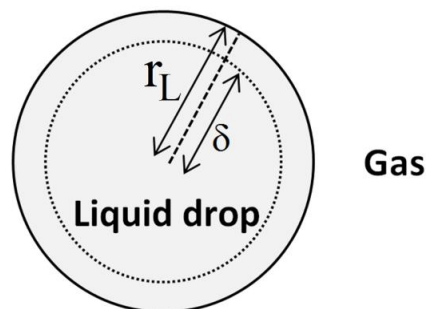


Figure 3 : Représentation schématique d'une goutte liquide divisée en 2 zones, une couche limite d'épaisseur $r_L - \delta$ et une zone de cœur de rayon δ . Dans la couche limite, la température varie fortement tandis qu'elle est supposée uniforme dans le cœur.

Cette représentation tient compte de temps courts durant lesquels la goutte commence à chauffer (ou à refroidir). Un profil de température associé aux temps courts est d'ailleurs proposé.

Lorsque la couche limite atteint le centre de la goutte, une autre représentation est utilisée, préservant ainsi la continuité entre les deux profils de température.

Cette représentation a pour avantage de ne pas résoudre d'EDPs et de n'utiliser aucun maillage à l'intérieur de la goutte. Elle a été validée par rapport à des solutions exactes de l'équation de la chaleur.

Une fois la détermination du coefficient H_{TL} effectuée, un algorithme permet la résolution du système local d'échange de chaleur et de masse (3)+(4)+(5) en s'assurant de respecter les différentes contraintes mathématiques et physiques qui nous sont imposées. Nous sommes ainsi en possession des variables \dot{m}_g , T_I et $Y_{g,wat,I}$ qui sont injectées dans le système diphasique d'EDPs moyennées en volume (1)+(2).

Divers cas-tests ont été effectués, la partie hyperbolique du modèle d'écoulement diphasique (1)+(2) ayant été résolue à l'aide de la méthode proposée dans Furfaro et Saurel [10]. En particulier, un test 0D d'évaporation simple permet de vérifier la relaxation des variables de l'écoulement vers leur propre valeur d'équilibre. Enfin, les capacités du modèle à traiter la propagation d'ondes de chocs et de détente ont été confirmées et dévoilent des résultats intéressants. Ce travail est présenté en détails dans Furfaro et Saurel [11].

Références

- [1] M. R. Baer and J.W. Nunziato, A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials, *J. Multiphase Flow* 12 (1986) 861–889
- [2] R. Saurel, S. Gavriluk and F. Renaud, A multiphase model with internal degrees of freedom: application to shock–bubble interaction. *Journal of Fluid Mechanics* (2003), 495, pp 283-321
- [3] R. Clift, J.R. Grace and M.E. Weber, *Bubbles, drops, and particles*. Academic Press (1978)
- [4] D.B. Spalding, The combustion of liquid fuels. In *Symposium (Int.) on combustion* 4(1) (1953) 847-864
- [5] F.A. Williams, Spray combustion and atomization. *Physics of Fluids* 1(6) (1958) 541-545
- [6] C. K. Law, Recent advances in droplet vaporization and combustion. *Progress in energy and combustion science*, 8(3) (1982) 171-201
- [7] B. Abramzon and W. A. Sirignano, Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International journal of heat and mass transfer*, 32(9) (1989) 1605-1618
- [8] B. Abramzon and S. Sazhin, Droplet vaporization model in the presence of thermal radiation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48(9) (2005) 1868-1873
- [9] W.A. Sirignano, Advances in droplet array combustion theory and modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 42 (2014) 54-86
- [10] D. Furfaro, and R. Saurel, A simple HLLC-type Riemann solver for compressible non-equilibrium two-phase flows. *Computers and Fluids*, 111 (2015) 159-178
- [11] D. Furfaro, and R. Saurel, R. Modeling droplet phase change in the presence of a multi-component gas mixture, *Appl. Math. Comput.*, (2015) in press