



INSTITUT NATIONAL DE L'ENVIRONNEMENT INDUSTRIEL ET DES RISQUES

DRA-01 - Analyse des conditions de dispersion d'un gaz liquéfié en champ proche en présence d'obstacles

Rapport d'étape pour les opérations a et b
Synthèse bibliographique

S. DUPLANTIER

*Unité Phénoménologie
Direction des Risques Accidentels*

Juillet 2001

DRA-01 - Analyse des conditions de dispersion d'un gaz liquéfié en champ proche en présence d'obstacles

Rapport d'étape pour les opérations a et b
Synthèse bibliographique

12 juillet 2001

PERSONNES AYANT PARTICIPE A L'ETUDE

S. DUPLANTIER / R. BOUET / M. PORQUEZ (stagiaire)

Ce document comporte 51 pages (hors couverture et annexes).

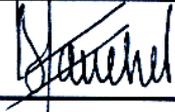
	Rédaction	Vérification	Approbation
NOM	S. DUPLANTIER	Y. MOUILLEAU	D. GASTON
Qualité	Ingénieur de l'unité " Phénoménologie "	Responsable de l'Unité " Phénoménologie "	Délégué Scientifique de la Direction des Risques Accidentels
VISA			pi 

TABLE DES MATIERES

1. RÉSUMÉ	3
2. GLOSSAIRE	4
3. INTRODUCTION	7
4. ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE	8
4.1 Ecoulement à la brèche	9
4.2 Flash thermodynamique	13
4.3 Zone d'expansion	14
4.4 Interactions entre les gouttes et l'obstacle	26
5. DESCRIPTION DU MODÈLE	39
5.1 Conditions à la brèche	39
5.2 Modélisation du flash	40
5.3 Modélisation de l'évolution du jet dans la zone d'expansion	41
5.4 Modélisation de l'interaction entre l'obstacle et le jet	45
6. CONCLUSION	47
7. RÉFÉRENCES	48

1. RESUME

De nombreuses activités industrielles nécessitent la présence sur site de stockages de gaz liquéfiés tels que l'ammoniac, le chlore, le butane, le propane... Ces gaz sont pour la plupart soit toxiques ou soit inflammables. De fait, le risque de rupture des enveloppes de stockage ou des canalisations contenant ces gaz fait l'objet d'études approfondies en raison des conséquences importantes que ces ruptures peuvent avoir sur le site industriel et son environnement proche.

L'objectif du projet est de réaliser un outil permettant de prendre en compte l'interaction entre un obstacle et un rejet consécutif à une rupture de canalisation, cette configuration étant parmi les plus répandues dans l'industrie.

L'étude réalisée a permis dans un premier temps de faire un point sur l'état de l'art dans la modélisation des jets diphasiques d'une part et de l'impact d'une goutte sur une surface solide d'autre part. Dans un deuxième temps, les modèles décrits dans la littérature ont été utilisés pour réaliser une première version d'un modèle capable d'évaluer la quantité de produit capturée par un obstacle placé sur la trajectoire d'un jet diphasique.

La revue bibliographique a mis en évidence le fait que la modélisation d'un tel impact nécessite la connaissance d'un grand nombre de paramètres, les plus importants étant :

- les caractéristiques de l'aérosol (quantité totale de liquide contenu dans l'aérosol, distribution de la taille des gouttelettes et de la masse de liquide) ;
- la vitesse et la température du jet diphasique.

La connaissance de ces paramètres lors de l'impact impose d'être en mesure d'en déterminer l'évolution depuis le point de rejet. La littérature a permis de trouver les modèles permettant de modéliser cette évolution.

Le modèle développé au cours de cette étude présente un caractère original dans la mesure où il couple deux approches distinctes (eulérienne et lagrangienne) en prenant en compte de plus une distribution non uniforme de taille de gouttes.

Toutefois, quelques incertitudes subsistent, notamment concernant le terme source (taille et distribution des gouttes à la brèche) et la zone d'expansion du jet.

Pour affiner le modèle développé, il est prévu dans un premier temps de comparer les valeurs fournies par le modèle avec des valeurs expérimentales disponibles dans la littérature et dans un deuxième temps de réaliser des essais pour compléter la comparaison.

Il est à noter de plus que concernant les résultats relatifs à la quantification de la masse de liquide retenue par l'obstacle, à l'heure actuelle, ils ne sont pas vérifiables à l'heure actuelle du fait d'un manque de données expérimentales. Des essais sont également prévus pour évaluer la pertinence de cette partie du modèle.

2. GLOSSAIRE

- A_b : section de l'orifice (m²)
 C : constante de Clausius-Clapeyron
 C_p : chaleur massique (J/kg.K)
 d_b : diamètre des gouttes après impact (m)
 d_a : diamètre des gouttes avant impact (m)
 D_b : diamètre de l'orifice (m)
 D_{exp} : diamètre du jet à la fin de la zone d'expansion (m)
 D_f : coefficient de diffusion du produit dans l'air (m²/s)
 D_i : diamètre initial des bulles (m)
 $D_j(z)$: diamètre du jet à la position axiale z (m)
 d_p : diamètre de la goutte liquide (m)
 $\overline{d_p}$: diamètre moyen des gouttes
 E_0 : coefficient d'entraînement
 f : fréquence des gouttes impactantes (Hz)
 $f_{dep}(t)$: fraction massique de liquide déposée sur l'obstacle
 $f_{dep}^*(t)$: fraction massique corrigée de liquide déposée sur l'obstacle
 F_{dil} : facteur de dilatation
 $f_{evap}(t)$: fraction massique de liquide évaporé
 $G(z)$: débit masse total du jet à la position axiale (z)
 G_b : débit masse à l'orifice (kg/s)
 H : humidité relative
 h_d : coefficient d'échange thermique par convection entre la goutte et le gaz environnant (W/m².K)
 h_{int} : hauteur entre la brèche et le niveau de liquide dans le réservoir (m)
 Ja : nombre de Jacob
 Ke : nombre de Kelvin
 $L_v(T)$: chaleur latente de vaporisation à la température T (J/kg)
 M : masse molaire (kg/mol)
 $\dot{m}(z)$: débit masse total du jet à la position axiale z (kg/s)
 $\dot{m}_a(z)$: débit masse d'air humide entraîné dans le jet à la position axiale z (kg/s)
 $\dot{m}_{as}(z)$: débit masse d'air sec entraîné dans le jet à la position axiale z (kg/s)
 m_d : masse d'une goutte (kg)
 $\overline{m_d}$: masse d'une goutte de diamètre moyen (kg)

- $\dot{m}_{\text{eau}}(z)$: débit masse d'eau entraîné dans le jet à la position axiale z (kg/s)
- \dot{m}_{exp} : débit masse total du jet à la fin de la zone d'expansion (kg/s)
- m_{liq} : masse de liquide contenue dans l'aérosol (kg)
- m_{jet} : masse totale de matériau (liquide + gaz) contenue dans le jet (kg)
- $m_{\text{vap}}(t)$: taux de vaporisation (kg/s)
- M_{vaptot} : masse totale vaporisée au contact de l'obstacle (kg)
- n_a : nombre de gouttes après impact
- n_b : nombre de gouttes avant impact
- n_d : nombre total de gouttes
- N_d : densité des sites de nucléation (m^{-3})
- Nu : nombre de Nusselt
- Oh : nombre d'Ohnesorge
- P : pression (Pa)
- q_m : débit masse moyen mesuré (kg/s)
- Re : nombre de Reynolds
- R_t : rugosité moyenne de la surface impactée (m)
- $S(T,P)$: entropie (J/kg.K)
- Sh : nombre de Sherwood
- St : rugosité adimensionnée de la surface impactée
- T : température (K)
- t : variable définie par : $t = \frac{d_p}{\dot{d}_p}$
- t_r : temps (s)
- t_{rejet} : durée totale du rejet (s)
- u : vitesse relative entre les phases liquide et gazeuse (m/s)
- $U(z)$: vitesse du jet à la position axiale z (m/s)
- U_b : vitesse de l'écoulement à l'orifice (m/s)
- U_{exp} : vitesse du jet à la fin de la zone d'expansion (m/s)
- V_{acc} : accélération du jet dans la zone d'expansion (m/s)
- V_{exp} : accroissement des gouttes (m/s)
- V_{rel} : vitesse relative des gouttes (m/s)
- v : volume massique (m^3/kg)
- w : composante normale de la vitesse de la goutte (m/s)
- We : nombre de Weber
- We_c : nombre de Weber critique
- x : fraction massique de la phase gazeuse (qualité, %massique)

Y : fraction molaire dans la phase gazeuse (%molaire)

z : distance parcourue par le jet (m)

α_l : diffusivité thermique du liquide (m²/s)

λ_{air} : conductivité thermique de l'air (W/m.K)

λ : longueur d'onde des oscillations (m)

λ_g : longueur d'onde moyenne (m)

ν_{liq} : viscosité cinématique du liquide (m²/s)

Θ : facteur correctif

ρ : masse volumique (kg/m³)

σ : tension de surface du liquide (N/m)

σ_g : variance géométrique des diamètres et des longueurs d'onde

θ : angle de contact entre le film liquide et la surface (°)

Indices :

a : air humide

as : air sec

atm : conditions atmosphériques

b : orifice/brèche

d : goutte

eau : eau

eb : ébullition

exp : conditions à la fin de la zone d'expansion

f, NH₃ : polluant, ammoniac

g : phase gazeuse du jet

gaz : phase gazeuse

imp : conditions à l'impact

int : conditions de réservoir

liq : phase liquide

s : conditions à la surface des gouttes

sat : saturation

3. INTRODUCTION

De nombreuses activités industrielles nécessitent la présence sur site de stockages de gaz liquéfiés tels que l'ammoniac, le chlore, le butane, le propane... Ces gaz sont pour la plupart soit toxiques ou soit inflammables. De fait, le risque de rupture des enveloppes de stockage ou des canalisations contenant ces gaz fait l'objet d'études approfondies en raison des conséquences importantes que ces ruptures peuvent avoir sur le site industriel et son environnement proche.

Dans les stockages de gaz liquéfiés, généralement, une phase vapeur coexiste avec le liquide sous pression. Deux types de situation peuvent entraîner la formation d'un jet diphasique :

- l'apparition d'une brèche dans l'enveloppe de stockage ;
- la rupture d'une conduite.

Ensuite, en fonction de l'environnement où se produit le rejet, deux configurations peuvent être observées dans le champ proche qui se caractérise par les premières dizaines de mètres situées en aval de la brèche :

- les rejets en champ libre : le jet ne rencontre aucun obstacle ;
- les rejets en présence d'obstacle(s): un ou plusieurs obstacles viennent perturber l'écoulement du jet. Cette configuration qui est la plus probable en milieu industriel, conduit à des jets impactants.

L'objectif général de l'étude est d'étudier l'influence que peut avoir un obstacle placé sur la trajectoire du jet dans le champ proche. En effet, cette présence entraîne a priori au moins deux perturbations notables :

- l'écoulement en aval de la brèche est modifié, des tourbillons et des phénomènes de recirculation apparaissent.
- l'interaction entre le jet et l'obstacle peut, en fonction de la température de l'obstacle, soit favoriser ou soit limiter l'évaporation d'une fraction de la phase liquide encore présente dans le jet au moment de l'impact.

Ces deux perturbations sont susceptibles de modifier considérablement la quantité de produit rejeté à l'atmosphère.

L'objet de ce document qui constitue un rapport intermédiaire est de présenter une synthèse bibliographique des modèles disponibles pour les écoulements diphasiques en présence d'obstacles et plus particulièrement de la capacité de rétention des solides.

Ce document s'organise autour de deux chapitres. Le chapitre 4 consiste à présenter une synthèse des travaux réalisés dans ce domaine. Une description du modèle que l'INERIS envisage de développer est fournie au chapitre 5.

4. ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE

Généralement, les études réalisées sur les rejets diphasiques en champ libre (Ianello,89 ; Papadourakis, 93) décomposent le jet en trois zones comme le présente la Figure 1 suivante :

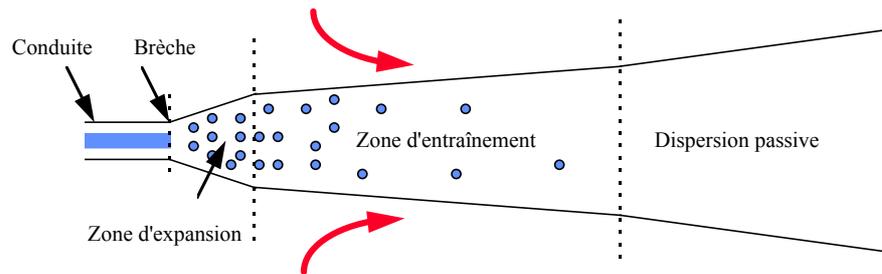


Figure 1 : représentation schématique des différentes zones d'un jet diphasique

Ces trois zones sont respectivement :

- **la zone d'expansion** : c'est dans cette zone, de longueur très faible (entre 0,5 et 4 fois le diamètre de la brèche, Ianello, 89), que se produit la détente du fluide depuis la pression à la brèche à la pression atmosphérique. Du fait de cette brusque dépressurisation, la phase liquide du rejet se trouve dans un état surchauffé et il se produit presque instantanément une vaporisation d'une fraction de cette phase liquide. Ce phénomène est appelé le "*flash thermique*". La phase gazeuse créée par ce phénomène de flash aura, à cause de sa plus faible densité, une vitesse plus élevée que celle du liquide. Cette différence de vitesse entre les deux phases provoque l'entraînement de la phase liquide et sa fragmentation en fines gouttelettes. Ces gouttelettes sont entraînées par la phase gazeuse à grande vitesse et constituent un aérosol.

Ainsi, à la fin de cette zone, le jet est constitué d'une phase gazeuse et d'une phase liquide sous forme d'aérosol et il est communément admis que l'ensemble du jet (phases liquide et gazeuse) se trouve à la température d'ébullition du matériau rejeté.
- **la zone d'entraînement** : dans cette zone, le jet turbulent provoque l'entraînement de l'air ambiant au sein du jet. L'énergie apportée par cet air qui est généralement plus chaud que le jet sert dans un premier temps à vaporiser les gouttelettes de liquide présentes dans le jet. Cette vaporisation provoque le refroidissement du jet qui se comporte alors comme un jet de gaz lourd dans l'atmosphère.

Dans un deuxième temps, lorsque la phase liquide contenue dans le jet est entièrement vaporisée, l'énergie apportée par l'air réchauffe alors le jet qui ne comporte plus que du gaz.

- **la zone de dispersion passive** : du fait de l'entraînement de l'air, la vitesse du jet va progressivement décroître jusqu'à atteindre la vitesse du vent. A partir de ce moment, la dispersion du jet sera alors de type " passive " dans l'atmosphère. Comme l'étude se limite au champ proche, la zone de dispersion passive n'est pas traitée dans cette étude bibliographique.

En outre, cette étude porte sur la compréhension des phénomènes mis en jeu lors de l'impact des gouttelettes sur un obstacle. Ce problème d'interaction entre un aérosol et une surface plane a déjà été étudié par ailleurs, le plus souvent dans le cadre des moteurs à combustion interne (impact d'un carburant pulvérisé sur la paroi du cylindre) et dans le cadre de l'utilisation des aérosols pour refroidir une surface chaude. Cependant ces travaux portent sur des conditions d'impact souvent fort différentes de celles rencontrées dans cette étude. En effet, concernant les rejets considérés dans le cadre de l'étude, la température de l'obstacle sur lequel ils vont impacter est proche de la température ambiante contrairement au cas des impacts de gouttes dans un moteur à combustion interne.

Lors de ce travail, il est très vite apparu que l'étude de l'interaction entre un aérosol et un obstacle lors d'un rejet diphasique nécessite une bonne connaissance de certains paramètres, en particulier :

- l'écoulement à la brèche : le débit masse et la qualité (c'est à dire la fraction massique de la phase vapeur) ;
- la masse de liquide encore présente dans le jet sous forme de gouttelettes au moment de l'impact sur l'obstacle (i.e. sa qualité à l'impact) ;
- la taille et la vitesse des gouttelettes qui viendront impacter la surface ;
- la température du jet diphasique au moment de l'impact afin de pouvoir étudier les interactions thermiques entre le fluide impactant et l'obstacle.

La connaissance de ces paramètres au moment de l'impact implique l'étude de l'évolution du jet depuis la brèche jusqu'à l'impact.

4.1 ECOULEMENT A LA BRECHE

Il existe de nombreux modèles permettant de décrire le rejet dans le cas d'un rejet par une conduite (May, 1996). Ces modèles peuvent être classés en trois catégories par ordre de complexité croissante:

- les modèles homogènes à l'équilibre dits HEM pour Homogenous Equilibrium Model ;
- les modèles avec écart de vitesse (entre la phase gazeuse et la phase liquide) ;
- et les modèles hors équilibre.

Dans les modèles homogènes à l'équilibre, les phases gaz et liquide sont supposées :

- avoir la même vitesse ;
- être réparties de façon homogène et uniforme ;
- être à la température de saturation traduisant l'équilibre thermodynamique entre les phases.

Ces hypothèses impliquent que :

- l'écoulement diphasique est considéré comme un fluide homogène de propriétés moyennes comprises entre celles du gaz et du liquide ;
- l'écoulement tend rapidement l'équilibre thermodynamique (aucun échange de chaleur ou de masse ne s'effectue entre les phases), de sorte que l'équilibre est supposé à tout instant dans l'écoulement.

De plus, l'écoulement est supposé stationnaire et monodimensionnel.

Il existe deux grandes catégories de modèles à l'équilibre:

- *les modèles à détente isentropique* : dans ce cas, l'entropie du fluide diphasique subissant la détente reste constante alors que son enthalpie diminue, ce qui traduit concrètement par une chute de la température du fluide. La perte d'enthalpie est alors supposée équilibrée par le gain en énergie cinétique de l'écoulement.
- *les modèles à détente isenthalpique* : dans ce cas, l'enthalpie du fluide diphasique reste constante tandis que son entropie diminue. Cette perte est équilibrée par l'énergie de friction mise en jeu par l'écoulement.

Van den Akker et al (1983) ont montré que ces deux hypothèses sont aussi irréalistes l'une que l'autre mais que l'erreur engendrée dans l'hypothèse "enthalpie constante" est moindre.

Dans le cadre de cette étude, le recours à ce type de modèle présente le double avantage d'estimer le débit mais également la qualité à la brèche. Cette approche peut également s'avérer utile lors de l'exploitation des données expérimentales, en effet, le débit est plus facilement accessible expérimentalement que la qualité à la brèche.

C'est pourquoi un modèle complet, appartenant à la catégorie des modèles HEM, sera présenté.

4.1.1 Modèle détente isentropique

La qualité à la brèche est calculée par l'intermédiaire d'un bilan entropique entre le réservoir et la sortie de la conduite (Nyren et al, 1983) :

$$S_{liq}(T_{int}, P_{int}) = (1-x_b).S_{liq}(T_b, P_b) + x_b.S_{gaz}(T_b, P_b) \quad (1)$$

avec

$$S_{liq}(T_{int}, P_{int}) = S_{liq, sat}(P_{int}) + C_{p_{liq}} \cdot \ln\left(\frac{T_{int}}{T_{sat}(P_{int})}\right)$$

$$S_{liq}(T_b, P_b) = S_{liq, sat}(P_b) + C_{p_{liq}} \cdot \ln\left(\frac{T_b}{T_{sat}(P_b)}\right)$$

$$S_{gaz}(T_b, P_b) = S_{liq, sat}(P_{int}) + C_{p_{liq}} \cdot \ln\left(\frac{T_b}{T_{sat}(P_b)}\right) + \frac{L_V}{T_b}$$

$$d'où, x_b = \frac{T_b}{L_V} \left[S_{liq, sat}(P_{int}) - S_{liq, sat}(P_b) + C_{p_{liq}} \cdot \ln\left(\frac{T_{int} \cdot T_{sat}(P_b)}{T_b \cdot T_{sat}(P_{int})}\right) \right] \quad (2)$$

4.1.2 Modèle HEM à détente isenthalpique

La qualité à la brèche est calculée par l'intermédiaire du bilan enthalpique :

$$(1-x).C_{p_{liq}}(-dT) = L_v dx \quad (3)$$

En intégrant ce bilan entre le réservoir et la brèche, la relation précédente s'écrit:

$$x_b = 1 - \exp\left[-\frac{C_{p_{liq}}}{L_v}(T_{int} - T_b)\right] \quad (4)$$

Si $C_{p_{liq}}\Delta T \ll L_v$, ce qui est souvent observé, cette relation s'écrit alors sous la forme suivante :

$$x_b \approx \frac{C_{p_{liq}}(T_{int} - T_b)}{L_v} \quad (5)$$

Dans cette étude, nous avons choisi d'utiliser un modèle HEM. C'est pourquoi ne seront pas exposés ici les autres modèles cités précédemment. Le choix d'un modèle HEM s'est imposé de part sa simplicité de mise en œuvre. De plus, nous avons vérifié expérimentalement (Bouet, 99) que le fluide à l'orifice se trouvait bien dans les conditions de saturation c'est à dire que les couples (T_b, P_b) mesurés correspondent aux couples $(T_b, P_{sat}(T_b))$, hypothèse de base des modèles HEM.

De part la plus faible erreur engendrée (Van den Akker et al, 83), nous avons choisi le modèle HEM à détente isenthalpique.

4.1.3 Modélisation de Wheatley

La modélisation proposée par Wheatley (87) a pour but de déterminer, à partir des conditions de réservoir (P_{int}, T_{int}) :

- les conditions de pression-température à la brèche ;
- le débit masse du rejet ;

Les hypothèses de base de ce modèle sont que :

- la détente du fluide est considérée isentropique et stationnaire ;
- le fluide diphasique est considéré homogène et à l'équilibre liquide-vapeur ;

Vu ces hypothèses, ce modèle fait partie des modèles HEM isentropiques.

Le modèle repose en outre sur les équations suivantes :

- équation de conservation de l'entropie :

$$C_{p_{liq}} \cdot \ln(T_{int}) = C_{p_{liq}} \cdot \ln(T_b) + \frac{x \cdot L_v(T_b)}{T_b} \quad (6)$$

- équation de conservation de la quantité de mouvement :

- équation d'Euler :
$$\frac{U_b^2}{2} = \alpha_p^2 \left(\int_{P_b}^{P_{int}} v \cdot dP + g \cdot h_{int} \right) \quad (7)$$

- équation de la pression interne en fonction de la température et de la hauteur de liquide :

$$P_{int} = P_{sat}(T) + \rho_{liq} \cdot g \cdot h_{int} = \exp\left(B_0 - \frac{A_0}{T}\right) + \rho_{liq} \cdot g \cdot h_{int} \quad (8)$$

- Equation du volume spécifique : $v = (1 - x).v_{liq} + x.v_{gaz}$ (9)
- Equation de Clausius-Clapeyron : $L_v(T) = T(v_{gaz} - v_{liq}) \frac{dP_{sat}}{dT}$ (10)

Après intégration, l'équation d'Euler s'écrit :

$$\frac{U_b^2}{2} = \alpha_p^2 \left(\frac{P_{int} - P_b}{\rho_{liq}} + C_{p_{liq}}(T_{int} - T_b) - C_{p_{liq}} T_b \cdot \ln\left(\frac{T_{int}}{T_b}\right) + g \cdot h_{int} \right) \quad (11)$$

Cette expression permet de déterminer la vitesse du fluide à la brèche en fonction de la différence de pression entre le réservoir et la sortie. Le fluide étant supposé à l'équilibre thermodynamique, les températures sont connues dès lors que les pressions le sont.

Le coefficient α_p est un facteur correctif empirique qui permet de tenir compte des effets de la friction ; il est en général pris égal à 0,6 dans le cas d'une brèche directe et égal à 0,8 ou 0,9 dans le cas d'une rupture de canalisation.

Le problème revient alors à déterminer la pression du fluide à la brèche. L'existence d'un gradient de pression entre le réservoir et la brèche provoque une accélération importante du fluide c'est-à-dire qu'il y a transformation d'énergie potentielle en énergie cinétique. La vitesse du fluide à la sortie sera limitée par la vitesse de propagation des ondes de pression dans le fluide (vitesse du son).

Il est admis que si le gradient de pression est suffisamment important, le fluide atteindra la vitesse du son en sortie (May, 1996), l'écoulement est alors critique.

Pour mémoire, un écoulement critique (ou sonique, ou encore "choqué") monophasique se caractérise par le fait qu'une diminution de pression en aval, en dessous d'un certain seuil, n'a aucune influence sur l'écoulement. Ce seuil de pression est appelé "pression critique". Elle est atteinte dans une section bien définie de la conduite, généralement à la sortie. Dans cette section, la vitesse de l'écoulement est égale à la vitesse du son dans le fluide si bien que les perturbations générées en aval ne sont pas ressenties par l'écoulement en amont.

L'expérience fait apparaître un phénomène analogue pour les écoulements diphasiques. Il est par contre moins facile de déterminer avec précision la valeur de la vitesse de propagation des ondes de pression dans un fluide diphasique dans la mesure où ces ondes ne se déplacent pas avec la même célérité dans chacune des deux phases. Les expériences menées pour l'étude des écoulements diphasiques ont néanmoins mis en évidence que la célérité du son peut être nettement plus faible que dans le cas d'un écoulement monophasique gazeux. Il en résulte que l'écoulement critique est plus facilement atteint dans le cas d'un écoulement diphasique (May, 1996).

La modélisation du débit à la brèche par la méthode de Wheathley suppose que l'écoulement diphasique est critique ce qui revient à considérer que la vitesse du fluide à la sortie, U_b , est égale à la vitesse du son dans le fluide diphasique de qualité x_b .

Du fait de l'hypothèse d'isentropie de l'écoulement, la vitesse du son peut être obtenue à partir de la relation :

$$U_{son} = \sqrt{\left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_{S=cte}} \quad (12)$$

Dans le cas d'un fluide diphasique, l'intégration à entropie constante est relativement complexe. Il a été montré que l'expression de la vitesse du son est finalement :

$$U_{son} = \frac{P_b \cdot A_0}{\rho_b \cdot T_b \sqrt{C_{p_{liq. T_b}} \left(1 + \left(\frac{A_0}{T_b} - 1 \right) \cdot \text{Ln} \left(\frac{T_{int}}{T_b} \right) \right)}} \quad (13)$$

La masse volumique du fluide à la brèche, ρ_b , est obtenue à partir de l'équation suivante :

$$\frac{1}{\rho_b} = \frac{1}{\rho_{liq}} + \frac{\text{Ln} \left(\frac{T_{int}}{T_b} \right) C_{p_{liq. T_b}^2}}{A_0 \cdot P_b} \quad (14)$$

On recherche alors, par un processus itératif la pression P_b telle que $U_b = U_{son}$ (équations 11 et 13). Une fois cette pression obtenue, comme la phase liquide est supposée en équilibre avec la phase vapeur, la température du rejet est connue et il en est de même avec la qualité à la brèche qui est déterminée à l'aide de l'équation 9 :

$$x_b = \frac{\frac{1}{\rho_b} + \frac{1}{\rho_{liq}}}{\frac{1}{\rho_{gaz}} + \frac{1}{\rho_{liq}}} \quad (15)$$

La détermination du débit masse, G_b se fait ensuite par la relation classique :

$$G_b = \rho_b \cdot A_b \cdot U_b \quad (16)$$

où A_b est la surface de la brèche

La valeur de la pression de rejet trouvée par itération en testant l'égalité entre la vitesse de rejet et la vitesse du son va déterminer la nature du rejet. En effet, si cette valeur est supérieure à la pression atmosphérique, l'écoulement sera critique et le jet s'accélérera encore après la brèche du fait de sa détente jusqu'à la pression atmosphérique.

En revanche, si la pression obtenue est inférieure à la pression atmosphérique, ce qui n'a pas de sens physique, l'écoulement ne sera pas critique. Dans ce cas, le fluide à la brèche n'atteint pas la vitesse du son et la pression considérée à la brèche est égale à la pression atmosphérique.

4.2 FLASH THERMODYNAMIQUE

La brusque détente du fluide diphasique de la pression à la brèche jusqu'à la pression atmosphérique entraîne le flash thermodynamique. Le flash consiste en une vaporisation instantanée d'une fraction du liquide rejeté qui se retrouve à un état surchauffé du fait de la détente subie. La qualité¹ du fluide à la fin de la zone d'expansion sera donc supérieure à celle de la brèche.

La nouvelle qualité peut être déterminée à l'aide d'un bilan enthalpique similaire à celui effectué dans le cadre du modèle HEM à détente isenthalpique (équation 3), ce qui revient à utiliser la relation suivante :

¹ Pour mémoire, la qualité à la brèche est la fraction massique de la phase vapeur dans l'écoulement diphasique.

$$x_{exp} = x_b + \frac{C_{p_{liq}}(T_b - T_{eb})}{L_V} \quad (17)$$

A la fin de la zone d'expansion, le rejet est constitué d'un mélange diphasique (de qualité x_{exp}) à sa température d'ébullition (T_{eb}).

La vitesse du jet à la fin de cette zone, U_{exp} peut être calculée en effectuant un bilan de quantité de mouvement entre la brèche et la fin de la zone d'expansion :

$$U_{exp} = U_b + \frac{(P_b - F_{dil}^2 \cdot P_{atm}) \cdot \pi \cdot D_b^2}{4 \cdot \dot{m}_{exp}} \quad (18)$$

avec F_{dil} : facteur de dilatation du jet entre la brèche et la fin de la zone d'expansion défini par :

$$F_{dil} = \frac{D_{exp}}{D_b} \quad (19)$$

La valeur du coefficient de dilatation F_{dil} n'est pas connue avec certitude. L'accélération du fluide sera maximale dans le cas où $F_{dil} = 1$ (cela revient à une détente à section constante).

A l'opposé, l'accélération du fluide sera nulle si $F_{dil} = \sqrt{\frac{P_b}{P_{atm}}}$. Il faudra donc, en fonction des différents cas étudiés, prendre une valeur de F_{dil} telle que :

$$1 \leq F_{dil} \leq \sqrt{\frac{P_b}{P_{atm}}} \quad (20)$$

Cette valeur pourra également faire l'objet d'une détermination expérimentale.

4.3 ZONE D'EXPANSION

Pour connaître la qualité du fluide diphasique au moment de l'impact sur l'obstacle, il faut être capable d'en modéliser l'évolution depuis la fin de la zone d'expansion (où elle vaut x_{exp}).

Pour ce faire, deux modèles, aux approches différentes, ont été trouvés dans la littérature :

- le modèle dit de Ianello (89) qui considère une approche eulérienne du jet ;
- le modèle de Papadourakis (93) qui considère une approche lagrangienne en isolant chaque goutte.

Il est toutefois nécessaire de préciser auparavant quels sont les mécanismes de formation des gouttes.

4.3.1 Mécanismes de formation des gouttes

Trois types de fragmentation d'un jet liquide en gouttelettes lors de son intrusion dans une atmosphère gazeuse au repos sont répertoriés dans la littérature :

- la fragmentation capillaire ;
- la fragmentation mécanique ;
- la fragmentation thermique.

Les travaux effectués sur ces trois types de fragmentation ainsi que les relations permettant de déterminer la répartition de la taille des gouttes dans chacun des cas sont présentés dans cette partie.

Par la suite, la formation de goutte binaire est également évoquée, cette formation résultant de l'interaction entre l'eau présente dans l'atmosphère et le produit rejeté.

4.3.1.1 La fragmentation capillaire

Dans ce régime de fragmentation, le diamètre moyen des gouttes formées, d_p , est proportionnel au diamètre de l'orifice. Lienhard et Day (1970) ont établi la relation suivante: $d_p = 1.9 D$

Le régime de fragmentation n'a pas été considéré dans le cadre de cette étude car il n'est susceptible de survenir que pour des diamètres de brèche inférieurs à 2 mm; il n'est cité ici que pour information.

4.3.1.2 La fragmentation mécanique (ou aérodynamique)

La fragmentation mécanique peut être observée lorsqu'une phase liquide se déplace à vitesse élevée dans une phase gazeuse au repos, la vitesse relative entre les deux phases entraîne d'importantes forces de cisaillement à la surface du liquide. Ces forces créent des oscillations (supposée aléatoire) à la surface du liquide. En se basant sur le principe de Bernoulli, la pression au sommet de l'oscillation est plus faible que la pression à sa base: les forces de pression ainsi créées vont augmenter l'amplitude de l'oscillation jusqu'à détachement de la partie du liquide appartenant à l'oscillation. La masse de liquide détachée prendra ensuite la forme d'une goutte sphérique. La tension de surface du liquide est également un paramètre important de la fragmentation. Par exemple, un long cylindre de liquide sera facilement fragmenté alors qu'une grosse goutte aura d'abord tendance à s'aplatir et ne sera fragmentée qu'en cas de vitesse relative suffisamment importante.

Un nombre adimensionnel traduit l'importance relative des forces de cisaillement et de tension de surface: c'est le nombre de Weber défini par :

$$We = \frac{\rho_g \cdot u^2 \cdot d_p}{\sigma} \quad (21)$$

La première méthode employée pour déterminer le diamètre moyen des gouttes est la méthode dite de "l'instabilité de Weber" [3]. Pour cela, un nombre de Weber critique (We_c) est défini. We_c peut prendre une valeur comprise entre 4 et 34 suivant la nature du fluide étudié².

La vitesse relative est prise égale à la vitesse du jet à la fin de la zone d'expansion et la masse volumique utilisée est celle de l'air. Cette hypothèse conduit à négliger la présence d'une phase gazeuse de polluant dans l'air à proximité de la surface de la goutte.

Le diamètre moyen des gouttes est alors :

$$\overline{d_p} = \frac{We_c \cdot \sigma}{\rho_{air} \cdot U_{exp}^2} \quad (22)$$

² Dans le cas de l'ammoniac, la valeur conseillée est 12 (Hodin 96, Johnson et al 98, Razzaghi 88).

La seconde méthode fut proposée par Levich (62). Celui-ci a montré que les oscillations créées par les forces de cisaillement ont une longueur d'onde λ , satisfaisant le critère :

$$\lambda \geq \frac{\sigma}{\rho_g \cdot U_b^2} \quad (23)$$

Les oscillations se produisent de façon aléatoire à la surface du liquide, la variable aléatoire associée à ce phénomène est la longueur d'onde des oscillations λ . Il a été montré (Williams, 1962) que ces longueurs d'onde suivent une loi log-normale. La distribution de la variable aléatoire λ est décrite par la loi :

$$f(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \sigma_g^2}} \frac{1}{\lambda} \text{Exp} \left[-\frac{1}{2 \cdot \sigma_g} \text{Ln}^2 \left(\frac{\lambda}{\lambda_g} \right) \right] \quad (24)$$

Levich (62) a montré que les gouttes créées par les oscillations ont un diamètre sensiblement égal à leurs longueurs d'onde ce qui permet d'écrire: $d_p = \lambda$. Ainsi, la connaissance de λ_g (longueur d'onde moyenne) et de σ_g (variance géométrique des longueurs d'onde) permet de déterminer la distribution des diamètres des gouttes.

Ces paramètres sont obtenus à l'aide des relations :

$$\sigma_g = We_c^{1/6} \quad (25)$$

$$\lambda_g = We_c^{1/2} \frac{\sigma}{\rho_g \cdot U_b^2} \quad (26)$$

Nous retrouvons dans ces relations le nombre de Weber critique défini précédemment mais Levich propose une plage de valeurs possibles plus restreinte : We_c doit prendre une valeur comprise entre 12 et 22.

Les différences entre les deux méthodes sont importantes et il est impossible, a priori, de déterminer laquelle donne les résultats les plus proches de la réalité. Johnson et Woodward (98) disposant de données expérimentales sur des rejets diphasiques de chlore, CFC-11, cyclohexane et d'eau utilisent la méthode de Levich. Hodin (96) dans sa note technique sur les rejets d'ammoniac utilise quant à lui la méthode de "l'instabilité de Weber".

4.3.1.3 La fragmentation thermique

Si la température du liquide rejeté est suffisamment élevée, la fragmentation s'effectue de façon mécanique mais aussi de façon thermique.

Dans la littérature, deux scénarios sont envisagés:

- le premier suppose que les deux fragmentations s'effectuent en parallèle (Johnson et al, 98) ;
- le second estime que la fragmentation mécanique crée des gouttelettes "primaires" qui seront ensuite fragmentées en gouttelettes "secondaires" sous l'action d'une ébullition interne (Razzaghi, 88), dans ce cas, les mécanismes de fragmentation se font en série.

Dans l'hypothèse d'une fragmentation en parallèle la méthode employée est proche de celle de celle de "l'instabilité de Weber"(Johnson et al, 98). Le terme relatif à la vitesse est modifié en introduisant la vitesse relative des gouttes par rapport à la phase gaz, V_{rel} qui peut être calculée à partir de sa composante axiale, V_{acc} et de sa composante radiale, V_{exp} à l'aide de la relation suivante :

$$V_{rel} = \sqrt{V_{acc}^2 + V_{exp}^2} \quad (27)$$

où :

- la vitesse V_{acc} traduit l'accélération du jet dans la zone d'expansion est définie par :

$$V_{acc} = U_{exp} - U_b \quad (28)$$

- La vitesse V_{exp} traduit l'accroissement des gouttes est définie par :

$$V_{exp} = \Theta^2 Ja^2 \pi \frac{\alpha_t}{D_i} \quad (29)$$

avec :

- Θ : facteur correctif (la valeur conseillée est $\Theta = 1$ (Ianello 89, Johnson 98))
- D_i : diamètre initial des bulles (m); avec $D_i = N_d^{-1/3}$
- N_d : densité des sites de nucléation (m^{-3}); valeur conseillée : $10^{10} m^{-3}$ (Ianello 89, Johnson 98)

- Ja : nombre de Jacob défini par: $Ja = \frac{C_{p_{liq}} \cdot (T_b - T_{eb}) \cdot \rho_{liq}}{L_v \cdot \rho_g} \quad (30)$

Comme dans le cas de la fragmentation mécanique, le diamètre moyen des gouttes est obtenu par :

$$\bar{d}_p = \frac{We_c \cdot \sigma}{\rho_{air} \cdot V_{rel}^2} \quad (31)$$

Dans l'hypothèse d'une fragmentation en série, la répartition des diamètres des gouttes primaires est obtenue avec la méthode de Levich. Razzaghi (88) en a proposé une modélisation.

La Figure 2 présente les différents stades de la fragmentation.

Dans un premier temps, des gouttes primaires sont formées par fragmentation mécanique. Si le liquide est suffisamment surchauffé, une ébullition interne apparaît et conduit à l'apparition de gouttes d'un diamètre plus élevé, les gouttes secondaires. Dans un deuxième temps, si la bulle de vapeur grossit suffisamment, elle va entraîner l'éclatement de la goutte secondaire ce qui aura pour conséquence de fragmenter le film liquide en gouttes tertiaires, gouttes de diamètre inférieur à celui des gouttes primaires. Razzaghi (88) émet l'hypothèse que le nombre de gouttes tertiaires produites par l'éclatement d'une goutte secondaire est une variable aléatoire uniformément répartie entre 1 et 10.

Une modélisation du phénomène d'ébullition interne au sein des gouttes primaires est proposée. Basée sur des bilans de masse et d'énergie entre les deux phases de la goutte secondaire, elle permet de déterminer l'évolution temporelle de la taille des bulles au sein des gouttes primaires et de déterminer la distribution des diamètres des gouttes tertiaires. Cependant, en particulier en raison de l'aspect instationnaire des phénomènes mis en jeu, l'utilisation de cette méthode est très coûteuse en temps de calcul.

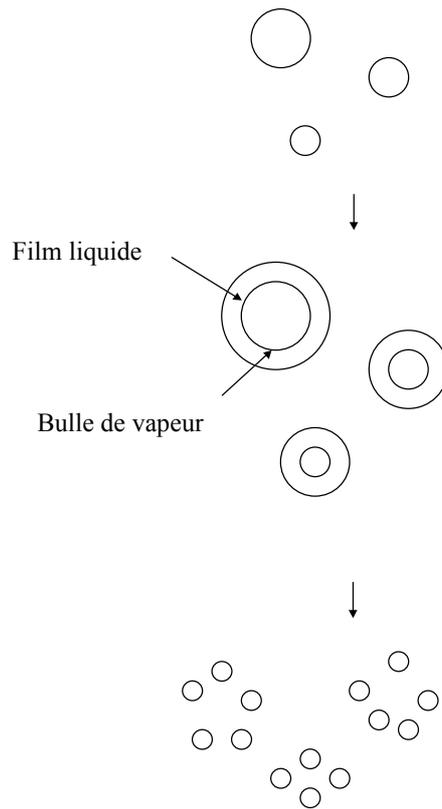


Figure 2 : principe de la fragmentation thermodynamique selon Razzaghi

Comme cela a déjà été évoqué précédemment, la fragmentation thermodynamique ne pourra se produire que si le liquide constituant le jet est suffisamment surchauffé. Il a été proposé une température minimale de liquide, T_L au-dessous de laquelle la fragmentation sera exclusivement mécanique.

Razzaghi (88) a montré que cette température est obtenue par la relation :

$$T_L = \frac{T_{atm}}{0.9} \left[1 + \frac{1}{C} \left(1 + Ke \frac{\rho_{liq}}{\rho_{air}} \right) \right] \quad (32)$$

où C est la constante adimensionnelle de Clausius-Clapeyron définie par :

$$\frac{1}{C} = \frac{R \cdot T_{atm}}{L_v(T_{atm}) M} \quad (33)$$

Ke est le nombre adimensionnel de Kelvin défini par :

$$Ke = \frac{4\sigma(T_{atm}) M}{d_p \cdot \rho_{liq} \cdot R \cdot T_{atm}} \quad (34)$$

Le Tableau 1 présente des valeurs de T_L calculées pour quelques uns des essais réalisés par l'INERIS :

ESSAI	Température à la brèche (K)	T_L (K)
5	253	359,49
9	257,3	357,62
10	251,1	374,23
11	246,9	376,21
12	240,6	359,49

Tableau 1 : comparaison des températures à la brèche avec T_L

Dans le cadre des essais réalisés par l'INERIS, en considérant l'approche de Razzaghi, il apparaît que la fragmentation n'a qu'une origine mécanique. La fragmentation thermique n'apparaît que lorsque la surchauffe du fluide rejeté est plus importante. A titre indicatif, dans ses applications, Razzaghi (88) a utilisé un rejet d'eau à 550 K.

Dans le champ d'étude présent, nous considérerons que seule la fragmentation mécanique intervient dans la formation d'aérosols. La méthode de détermination proposée par Levich semble d'après la littérature n'être utilisée que pour calculer le diamètre des gouttes primaires dans le cas d'une fragmentation "mixte". Dans la suite de l'étude, une distribution de la taille (et de la masse) des gouttes déterminée par la méthode de "l'instabilité de Weber" sera utilisée.

4.3.1.4 Formation d'une goutte binaire

Si les transferts thermiques sont tels que la température de l'écoulement est suffisamment faible, il peut y avoir condensation de l'eau contenue dans l'air à la surface de la goutte. Ceci entraîne la présence de gouttes liquides dites "binaires", composées d'un mélange eau/produit. Vesala et Kukkonen (1992) ont montré que la condensation d'eau à la surface d'une goutte d'ammoniac a deux effets antagonistes :

- un effet thermique : dans un premier temps, la chaleur latente de l'eau libérée par la condensation a tendance à accélérer la vaporisation de l'ammoniac ;
- un effet de dilution : dans un second temps, l'accumulation d'eau condensée à la surface de la goutte va faire diminuer la fraction molaire d'ammoniac et ainsi avoir tendance à limiter sa vaporisation.

Dans le cas d'une humidité relative élevée et avec un temps de vol suffisamment important, les calculs de Vesala et Kukkonen montrent qu'il est même possible d'obtenir des gouttes d'eau pure (l'ammoniac s'étant totalement vaporisé). Dans le cas d'une étude du champ proche du rejet, il paraît peu probable que l'effet de dilution puisse influencer la vaporisation des gouttes d'ammoniac. Cependant, il paraît possible que l'effet thermique de la condensation de l'eau intervienne et qu'en le négligeant, la vaporisation de l'ammoniac soit légèrement sous-estimée.

Concernant les modèles qui seront décrits par la suite, aucun des deux modèles (Ianello et Papadourakis) ne tient compte de la formation d'un mélange binaire eau/produit. Seule l'influence de la condensation de l'eau est prise en compte dans le bilan thermique effectué dans le modèle de Ianello.

4.3.1.5 Distributions des gouttes

Dans le cas d'une fragmentation mécanique, comme l'ont montré expérimentalement Kitamura (1986) et Bettis (1987) (cité dans Johnson 98) et dans le cas d'une fragmentation thermique (Ianello 89, Johnson 98), les différents auteurs s'accordent pour admettre que la distribution des diamètres suit une loi log-normale de paramètres \bar{d}_p et σ_g ($\sigma_g=1,3$). La densité de probabilité pour un diamètre s'écrit donc :

$$p(d_p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \text{Ln}(\sigma_g)} \text{Exp} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\text{Ln}(d_p) - \text{Ln}(\bar{d}_p)}{\text{Ln}(\sigma_g)} \right)^2 \right] \quad (35)$$

où σ_g est la variance géométrique des diamètres et peut prendre des valeurs comprises entre 1 et 2. La valeur couramment suggérée dans le cas de l'ammoniac est 1,3 (Johnson 98).

En effectuant le changement de variable : $t = \frac{d_p}{\bar{d}_p}$, la distribution s'écrit :

$$p(t) = \frac{\exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{\text{Ln}(t)}{\text{Ln}(\sigma_g)} \right)^2 \right)}{2\pi^{1/2} \text{Ln}(\sigma_g)} \quad (36)$$

La fonction cumulative $F(t)$ s'obtient par intégration de $p(t)$:

$$F(t) = \int_0^t p(\lambda) \frac{d\lambda}{\lambda} \quad (37)$$

La Figure 3 montre un exemple de distribution $p(t)$ et de fonction cumulative $F(t)$ de diamètres de gouttes.

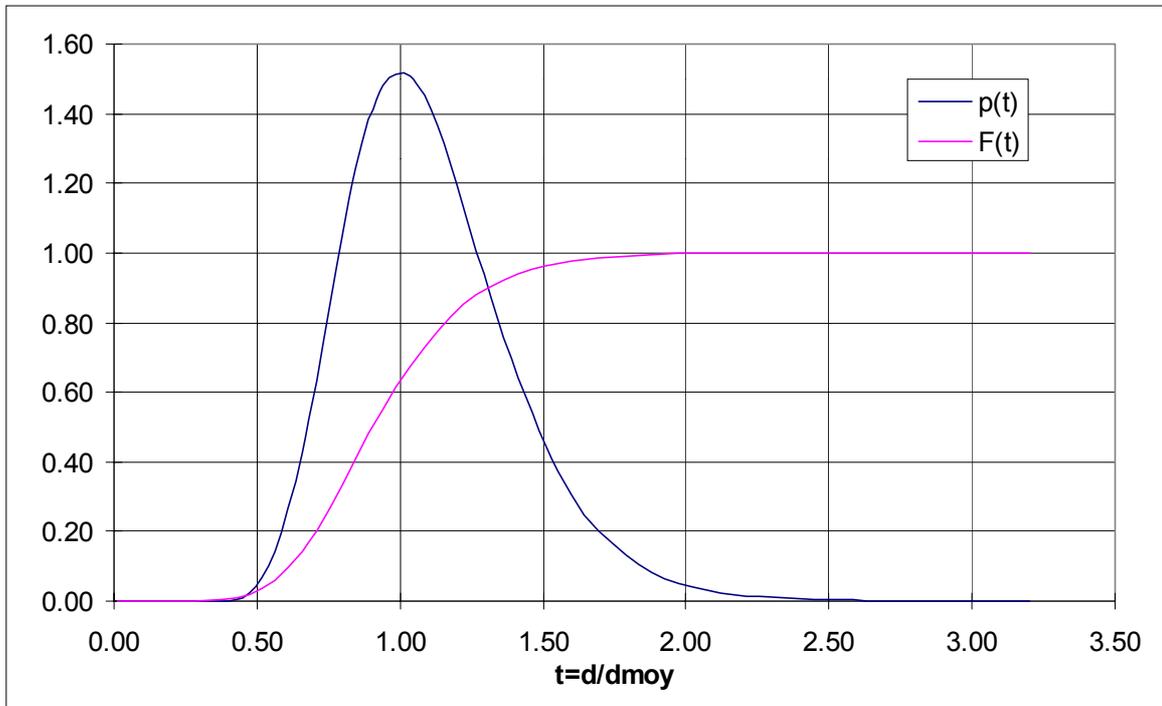


Figure 3 : Distribution de la taille des gouttes.

Dans ce cas, il peut être affirmé qu'environ 65% du nombre total des gouttes ont un diamètre inférieur au diamètre moyen. Ceci ne signifie pas pour autant que 65% de la masse des gouttes est contenue dans les gouttes d'un diamètre inférieur ou égal au diamètre moyen. En effet, il existe des différences entre les distributions de la taille et de la masse des gouttes.

La masse de liquide contenue dans l'aerosol, m_{liq} est obtenue par la relation :

$$m_{liq} = (1 - x) \cdot m_{jet} = n_d \cdot F_m(\infty) \quad (38)$$

où $F_m(t)$ est la fonction cumulative de masse

La masse d'une goutte est donnée par la relation : $m_d = \frac{\pi}{6} d_p^3 \cdot \rho_{liq} \quad (39)$

La fonction cumulative de masse est alors définie par :

$$F_m(d_p) = \frac{\pi}{6} \rho_{liq} \int_0^{d_p} d_p^3 \cdot p(d_p) \frac{d d_p}{d_p} \quad (40)$$

Ou également, en utilisant la variable t : $F_m(t) = \left(\frac{\pi}{6} \rho_{liq} \cdot \overline{d_p}^3 \right) \int_0^t t^2 \cdot p(t) \cdot dt \quad (41)$

En remarquant que le facteur dans l'équation précédente représente la masse d'une goutte de diamètre moyen, la distribution de la masse, $p_m(t)$ peut finalement s'écrire :

$$p_m(t) = \overline{m_d} \cdot t^2 \cdot p(t) \quad (42)$$

Dans les mêmes conditions que l'exemple précédent, la Figure 4 montre la distribution $p_m(t)$ et la fonction cumulative de masse $F_m(t)$:

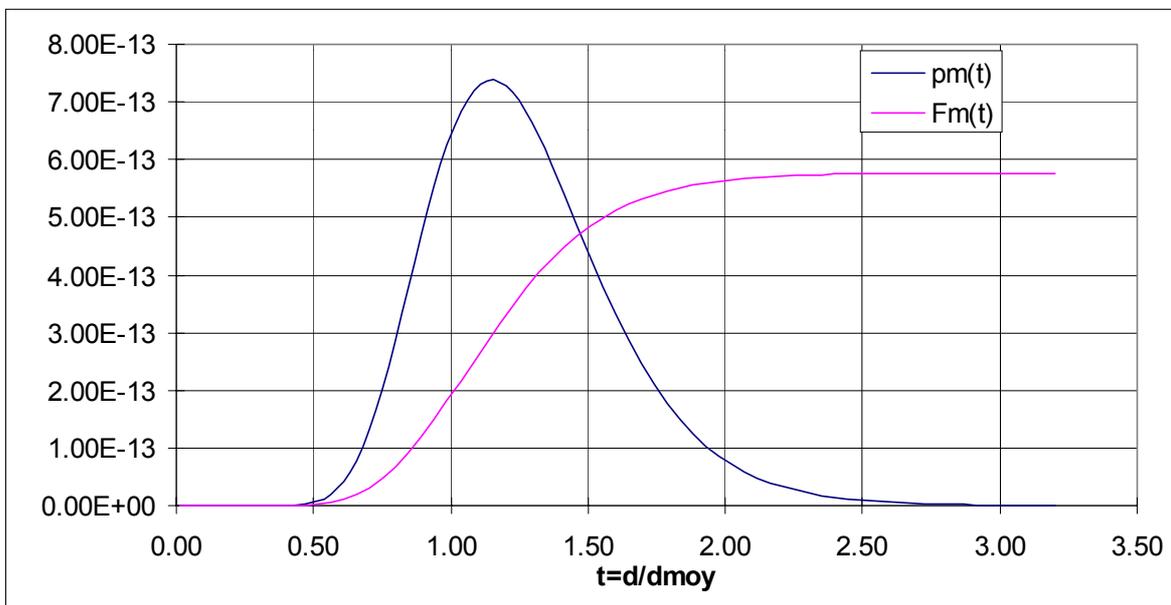


Figure 4 : fonction cumulative de la masse en fonction de la taille des gouttes.

En comparant les deux figures, il apparaît que la distribution de masse atteint son maximum pour une valeur de t supérieure à 1 alors que la distribution des diamètres atteint sa valeur maximale pour $t=1$. Ceci montre que la masse de liquide se trouve essentiellement répartie dans les gouttes de plus grands diamètres.

Le nombre total de gouttes n_d constituant l'aérosol peut être déterminé en utilisant (38) :

$$n_d = \frac{(1 - x) m_{\text{jet}}}{F_m(\infty)} \quad (43)$$

4.3.2 Modélisation de Ianello

Le modèle de Ianello (89) est du type eulérien. Il propose une relation permettant de calculer l'entraînement d'air au sein du jet en fonction de la distance parcourue depuis la fin de la zone d'expansion. Ce modèle est basé sur un bilan thermique réalisé sur un volume de contrôle du jet et permet de déterminer l'évolution de la qualité du fluide ainsi que la température du jet (supposée homogène dans une section du jet) avec la distance parcourue depuis la fin de la zone d'expansion.

La modélisation de l'entraînement d'air est basée sur les travaux de Ricou et Spalding (1961) au cours desquels ont été déterminés expérimentalement les coefficients d'entraînement d'air pour différents types de jets pénétrant dans un milieu de densité différente.

La relation liant le débit masse total du jet à la distance parcourue par le jet est :

$$\dot{m}(z) = E_0 \cdot \dot{m}_{\text{exp}} \cdot \frac{z}{D_{\text{exp}}} \cdot \left(\frac{\rho_{\text{air}}}{\rho_{\text{exp}}} \right)^{0.5} \quad (44)$$

où E_0 est un coefficient d'entraînement pris égal à 0,32, valeur conseillée par Ricou et Spalding (53).

D'après les auteurs, cette formule n'est valable qu'à partir de la fin de la zone d'expansion, l'entraînement d'air est considéré comme nul dans cette zone. Il convient cependant de noter que cette formule ne peut s'appliquer qu'à partir d'une distance nettement supérieure à

la longueur de la zone d'expansion. En effet, si $z < \frac{D_{\text{exp}}}{E_0} \left(\frac{\rho_{\text{exp}}}{\rho_{\text{air}}} \right)^{0.5}$ alors le débit masse total calculé est plus faible que le débit masse du produit rejeté.

La connaissance du débit massique total à la position axiale z permet alors de déterminer le

$$\text{débit masse d'air entraîné } \dot{m}_a(z) \text{ en } z : \dot{m}_a(z) = \dot{m}(z) - \dot{m}_{\text{exp}} \quad (45)$$

En effectuant l'hypothèse que la quantité de mouvement apportée par l'air entraîné est négligeable, la conservation de la quantité de mouvement permet de déterminer la vitesse du jet $U(z)$:

$$U(z) = \left(\frac{\dot{m}_{\text{exp}}}{\dot{m}(z)} \right) \cdot U_{\text{exp}} \quad (46)$$

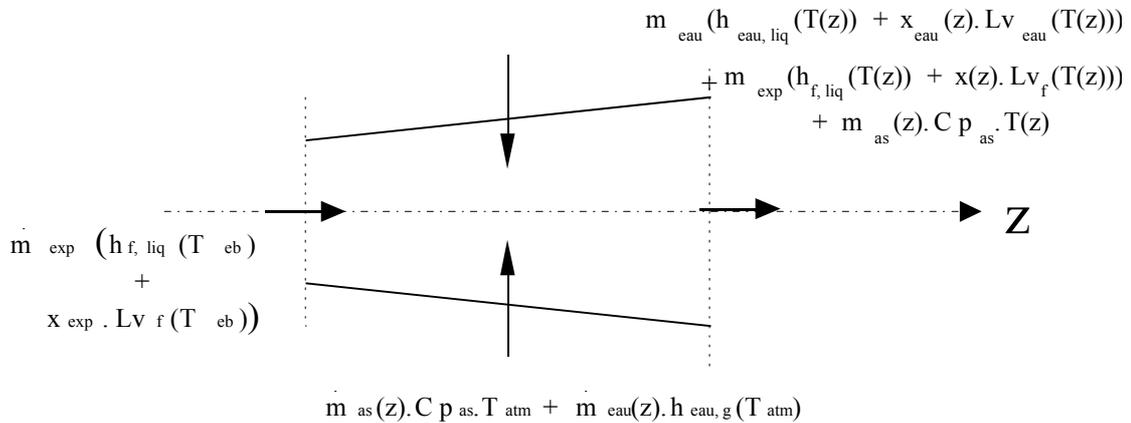
L'air atmosphérique étant de l'air humide, il est utile de calculer le débit massique d'eau entraîné dans le jet, $\dot{m}_{\text{eau}}(z)$:

$$\dot{m}_{\text{eau}}(z) = H \frac{P_{\text{sat}}^{\text{eau}}(T_{\text{atm}})}{P_{\text{atm}}} \cdot \frac{M_{\text{eau}}}{M_{\text{air}}} \cdot \dot{m}_a(z) \quad (47)$$

La masse d'air sec entraînée, $\dot{m}_{as}(z)$ est alors obtenue par la relation :

$$\dot{m}_{as}(z) = \dot{m}_a(z) - \dot{m}_{eau}(z) \quad (48)$$

L'évolution de la température du jet est obtenue en effectuant un bilan d'énergie sur le volume de contrôle présenté sur la Figure 5 :



- avec les indices :
- f : pour le produit
 - eau : pour l'eau
 - as : pour l'air sec
 - liq : propriétés physiques à l'état liquide
 - g : propriétés physiques à l'état gazeux

Figure 5 : principe du modèle de Ianello

Le bilan d'énergie sur le volume de contrôle s'écrit : $Q_f + Q_{eau} + Q_{as} = 0$ (49)

avec

- $Q_f = \dot{m}_{exp} [h_{f, liq}(T_{eb}) + X_{exp} \cdot LV_f(T_{eb}) - (h_{f, liq}(T(z)) + x(z) \cdot LV_f(T(z)))]$ (50)

- $Q_{eau} = \dot{m}_{eau}(z) [h_{eau, g}(T_{atm}) - (h_{eau, liq}(T(z)) + x_{eau}(z) \cdot LV_{eau}(T(z)))]$ (51)

- $Q_{as} = \dot{m}_{as}(z) [C_{p_{as}}(T_{atm} - T(z))]$ (52)

Ce bilan est basé sur l'hypothèse qu'au sein du jet, le produit, l'eau et l'air sont à l'équilibre thermodynamique.

Le modèle de Ianello postule également que tant que du produit ou de l'eau sont encore présents sous forme liquide dans le jet, leurs phases gazeuses respectives sont à une pression partielle égale à la pression de saturation correspondant à la température du jet, $T(z)$.

En supposant que les phases gazeuses du produit et de l'eau se comportent comme des gaz parfaits, la loi de Dalton permet de calculer les fractions molaires de ces deux constituants :

$$P^{\text{eau}}(T(z)) = Y_{\text{eau}} \cdot P_{\text{atm}} = P_{\text{sat}}^{\text{eau}} \quad (53)$$

$$P^f(T(z)) = Y_g \cdot P_{\text{atm}} = P_{\text{sat}}^f \quad (54)$$

Les fractions molaires du polluant et de l'eau peuvent aussi s'écrire comme étant le rapport entre le nombre de moles du constituant à l'état gazeux et le nombre total de moles dans le jet :

$$Y_g = \frac{\frac{x_f(z) \cdot \dot{m}_{\text{exp}}}{M_f}}{\frac{x_f(z) \cdot \dot{m}_{\text{exp}}}{M_f} + \frac{x_{\text{eau}}(z) \cdot \dot{m}_{\text{eau}}(z)}{M_{\text{eau}}} + \frac{\dot{m}_{\text{as}}}{M_{\text{as}}}} \quad (55)$$

$$Y_{\text{eau}} = \frac{\frac{x_{\text{eau}}(z) \cdot \dot{m}_{\text{eau}}(z)}{M_{\text{eau}}}}{\frac{x_f(z) \cdot \dot{m}_{\text{exp}}}{M_f} + \frac{x_{\text{eau}}(z) \cdot \dot{m}_{\text{eau}}(z)}{M_{\text{eau}}} + \frac{\dot{m}_{\text{as}}}{M_{\text{as}}}} \quad (56)$$

L'obtention de la température d'équilibre $T(z)$ nécessite un processus itératif simple :

- une valeur de départ à $T(z)$ est fixée, cette valeur est initialement choisie proche de la température d'ébullition du produit considéré car le calcul est réalisé à la fin de la zone d'expansion
- les équations (53) et (54) permettent d'obtenir les fractions molaires Y_g et Y_{eau}
- la résolution du système formé par les équations (55) et (56) permet de calculer x_f et x_{eau}
- les qualités sont introduites dans le bilan énergie (équations 50 à 52); si le bilan (49) est satisfait, la température correspond à la température d'équilibre $T(z)$ recherchée; si le bilan n'est pas satisfait, il faut choisir une nouvelle valeur de $T(z)$ et répéter la procédure jusqu'à obtention de la température d'équilibre.

La modélisation de Ianello permet donc de connaître la vitesse du jet (et donc des gouttes) ainsi que sa température en tout point du jet et, en particulier, lors de l'impact sur un obstacle placé à une distance connue du point de rejet.

4.3.3 Modélisation de Papadourakis

Un modèle permettant de calculer l'évaporation des gouttes dans un jet diphasique fut proposé par Papadourakis et al (1993). Ce modèle se distingue de celui proposé par Ianello, notamment, de par son approche lagrangienne. Il est à noter que Papadourakis a également proposé un modèle du même type que celui de Ianello. Dans la mesure où l'approche est voisine de celle décrite dans le paragraphe précédent, il n'a pas été décrit dans ce rapport.

Le modèle établi permet de modéliser l'évaporation de gouttes de liquide se déplaçant dans une atmosphère au repos (et ne contenant pas de vapeur du produit) ; ce cas représente la limite supérieure d'évaporation .

Le modèle est décrit par les équations suivantes pour une goutte projetée dans de l'air :

- la conservation de la masse de chaque goutte de liquide ; elle est établie en effectuant l'hypothèse que la quantité de liquide vaporisée est égale à la quantité de vapeur diffusant de la surface de la goutte vers la phase gazeuse environnante :

$$\bullet \frac{\partial m_d}{\partial t_r} = -\pi \cdot d_p \cdot Sh \cdot D_f \cdot \text{Ln}\left(\frac{1 - Y_g}{1 - Y_s}\right) \quad (57)$$

- la conservation de l'énergie.

$$\bullet \frac{\partial T_d}{\partial t_r} = \frac{\pi \cdot d_p^2 \cdot h_d (T_g - T_d) + \frac{\partial m_d}{\partial t_r} [(C_{p_g} - C_{p_{liq}})(T_d - T_g) + L_v]}{m_d \cdot C_{p_{liq}}} \quad (58)$$

- la conservation de la quantité de mouvement projetée dans chaque direction d'un repère cartésien :

$$\bullet m_d \frac{\partial u_x}{\partial t_r} = -\frac{1}{2} \rho_g \cdot C_D \cdot S_{\text{frontale}} \cdot u \cdot u_x \quad (59)$$

$$\bullet m_d \frac{\partial u_y}{\partial t_r} = -\frac{1}{2} \rho_g \cdot C_D \cdot S_{\text{frontale}} \cdot u \cdot u_y \quad (60)$$

$$\bullet m_d \frac{\partial u_z}{\partial t_r} = \frac{1}{2} m_d \cdot g \cdot \rho_g \cdot C_D \cdot S_{\text{frontale}} \cdot u \cdot u_z \quad (61)$$

Les équations précédentes s'entendent avec :

- S_{frontale} la surface projetée, en m^2 , d'une goutte, supposé sphérique
- $u = \sqrt{(u_x - u_w \cos \alpha)^2 + (u_y - u_w \sin \alpha)^2 + u_z^2}$ (62), vitesse relative de la goutte (en m/s) par rapport au gaz ambiant qui est généralement de l'air ; dans ce cas u_w est la vitesse du vent et α l'angle entre le vent et le jet (0° vent dans le dos) ; par la suite, le nombre de Reynolds, Re , est toujours calculé à partir de cette vitesse et du diamètre de la goutte à l'instant considéré.
- $C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687})$ (63) pour $Re < 989$ et $C_D = 0.44$ pour $Re > 989$; le coefficient C_D n'a pas de dimension ;
- h_d coefficient d'échange thermique par convection en $J/m^2 K$: $h_d = \frac{Nu \cdot \lambda_{\text{air}}}{d_p}$
avec Nu , le nombre de Nusselt donné par $Nu = 2 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3}$ (64)
- Sh est le nombre de Sherwood donné par $Sh = 2 + 0.6 Re^{1/2} Sc^{1/3}$ (65)

Ce modèle de Papadourakis permet la valeur supérieure de la masse évaporée en considérant une goutte se déplaçant sans mouvement relatif dans l'air environnant. En effet, dans ce cas, les échanges convectifs sont favorisés par une vitesse relative non nulle de la goutte par rapport à l'air. Il permet également de déterminer l'évolution temporelle de la température et de la taille de chaque goutte. Ce point est très important car il est incontournable de connaître la taille et la vitesse des gouttes au moment de l'impact pour savoir si ces dernières formeront un film liquide ou si elles seront « renvoyées » par l'obstacle. Ce point fait l'objet du paragraphe suivant.

4.4 INTERACTIONS ENTRE LES GOUTTES ET L'OBSTACLE

Dans le champ proche, toutes les gouttes de liquide constituant l'aérosol ne sont pas encore complètement vaporisées (sauf les plus petites). La présence d'un obstacle sur la trajectoire du jet provoque donc l'impact de ces gouttes sur une surface rigide. L'objectif de cette partie de l'étude est de synthétiser les différents travaux qui ont déjà été effectués sur ce phénomène.

Les études d'impact de gouttes sur une surface plane ont mis en évidence différents régimes d'impact régis par les paramètres suivants :

- les caractéristiques cinématiques des gouttes impactantes (essentiellement leurs vitesses et leurs quantités de mouvement) ;
- les propriétés physiques du liquide (masse volumique, viscosité et particulièrement sa tension de surface) ;
- la rugosité de la surface impactée ;
- les températures du liquide et de la surface de l'obstacle.

Les principaux groupements adimensionnels utilisés pour étudier l'impact des gouttes sont (Mundo et al (95)) :

- le nombre de Reynolds : $Re = \frac{\rho_{liq} d_p W}{\mu_{liq}}$ (66)

- le nombre d'Ohnesorge : $Oh = \frac{\mu_{liq}}{\sqrt{\rho_{liq} \cdot \sigma \cdot d_p}}$ (67)

- la rugosité de la surface : $St = \frac{R_t}{d_p}$ (68)

Le nombre de Weber est également employé : $We = (Oh Re)^2 = \frac{\rho_{liq} \cdot d_p W^2}{\sigma}$ (69)

Trois types de surface d'impact peuvent être considérées :

- une surface chauffée ;
- une surface sèche ;
- une surface recouverte par un film liquide (lui même formé par déposition préalable de gouttes).

Ces trois types d'impact sont décrits par la suite.

4.4.1 Aérosol impactant une surface chauffée

Si la température de la surface impactée est élevée et supérieure ou égale à la température dite de "*Leidenfrost*" correspondante au liquide contenu dans l'aérosol, un film de vapeur se crée instantanément autour des gouttes (Zhang et al 91, Gottfried et al 66). Ce film empêche tout contact entre l'obstacle et la goutte qui ne fait alors que rebondir sur la surface (Wachters et al 66, Gottfried et al 66), ce phénomène est plus connu sous le nom de califaction.

Des travaux récents ont abouti à une modélisation de l'impact dans cette configuration (Xu et al 98). Ce modèle, baptisé TAR (Taylor Analogy Rebound) utilise l'analogie de Taylor qui consiste à assimiler la goutte impactante à un système masse/ressort.

Les températures de "*Leidenfrost*" sont de l'ordre de quelques centaines de degrés. Dans la mesure où la température initiale de l'obstacle est généralement voisine de la température atmosphérique, ce type d'interaction ne sera pas pris en compte. Il faudra cependant garder en mémoire que ce scénario ne peut pas être exclu dans certaines configurations industrielles (rejet de produit dont la température d'ébullition est très basse, hydrogène ; impact du rejet sur une surface chaude d'un procédé).

4.4.2 Impact sur une surface sèche

Lorsqu'une goutte de liquide vient impacter une surface sèche, deux phénomènes peuvent se produire :

- La déposition ;
- Le splash.

4.4.2.1 Le régime de déposition

La **déposition** survient lorsque les conditions énergétiques de l'impact sont faibles, la goutte va se répandre totalement sur le mur. Ce phénomène est à la base de la formation d'un film liquide sur la surface illustré sur la Figure 6 :

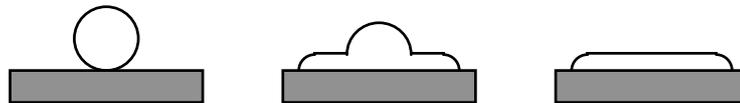


Figure 6 :représentation schématique de la déposition d'une goutte.

Rein (93) a décrit l'évolution du film liquide résultant de ce régime d'impact :

- dans un premier temps, le film liquide se répand radialement et atteint très rapidement un rayon maximal. Les énergies cinétiques et de surface de la goutte sont dissipées par des processus visqueux et transformées en énergie de surface supplémentaire du film liquide. Pour mémoire, l'énergie de surface représente les forces qui assurent la cohésion de la surface de la goutte, elle est égale au produit de la surface de la goutte par la tension superficielle du liquide.

- dans un second temps, le film liquide subit une contraction. Dans certains cas, cette contraction peut être à l'origine du décollement du film qui reforme une goutte et entraîne le rebond de la goutte. La durée de la phase de contraction est supérieure d'environ deux ordres de grandeur à celle de la phase d'expansion. La contraction du film sera fortement influencée par les propriétés de la surface, surtout par sa rugosité.

Bien que l'épaisseur du film soit difficile à estimer, des observations ont mis en évidence le fait qu'elle ne soit pas constante sur toute sa surface. Il semble que le film soit moins épais à sa périphérie qu'en son centre.

4.4.2.2 Le régime de splash

Le **splash** survient lorsque l'impact est plus énergétique, le processus de déformation, illustré sur la Figure 7, suit alors les étapes suivantes :

- quand la goutte touche la surface, un film liquide se répand (b, c) ;
- une couronne de liquide se crée au-dessus du film (d) ;
- le débit de liquide alimentant le film diminue ce qui amincit la couronne qui poursuit son expansion (d) ;
- cet amincissement entraîne une instabilité dans la couronne qui se traduit par sa fragmentation en petites gouttes, appelées "gouttes secondaires" (e).

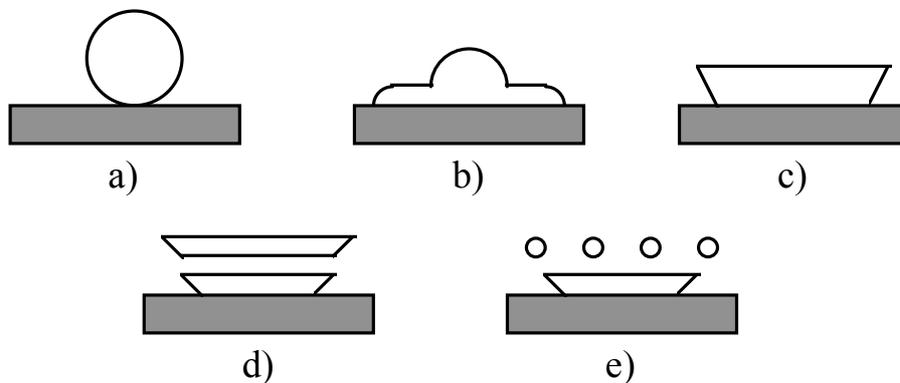


Figure 7 : représentation schématique du " splash "

Ces conditions d'impact entraînent la création d'un nuage de gouttes secondaires mais également l'apparition d'un film liquide sur l'obstacle qui reste cependant moins important que dans le cas d'une déposition totale.

Lors de ses travaux, Mundo (98) a déterminé la frontière entre les deux régimes en fonction des nombres d'Ohnesorge et de Reynolds de la goutte impactante.

4.4.2.3 Détermination de la frontière "splash/déposition"

4.4.2.3.1 Approche théorique

Pour modéliser l'impact des gouttes, les deux équations suivantes doivent être résolues :

- conservation de la masse : $m = m'$
- conservation de l'énergie : $E_k + E_p + E_s = E'_k + E'_p + E'_s + E'_d$ (70)

avec E_k : énergie cinétique

E_p : énergie potentielle

E_s : énergie de surface

E_d : énergie dissipée

Le symbole « ' » associée à une grandeur représente la valeur de cette grandeur après l'impact

Dans le cas où $E_d \approx E_k + E_p + E_s$, il n'y a pas de splash mais une déposition.

Avant l'impact, les énergies cinétique et de surface sont définies par :

- $E_k = \frac{\rho_{liq} \cdot w^2 \cdot \pi \cdot d_p^3}{12}$ (71)

- $E_s = \pi \cdot d_p^2 \cdot \sigma$ (72)

L'énergie cinétique avant l'impact est dissipée par la déformation de la goutte et dans le cas d'une déposition devient nulle quand le film liquide formé a atteint son expansion maximale (surface couverte maximale). Quand le film a atteint son diamètre maximal, d_{max} , l'énergie de surface s'écrit :

$$E'_s = \frac{\pi}{4} d_{max}^2 \cdot \sigma(1 - \cos\theta)$$
 (73)

avec θ , angle de contact entre le film liquide et la surface (cf. Figure 8).

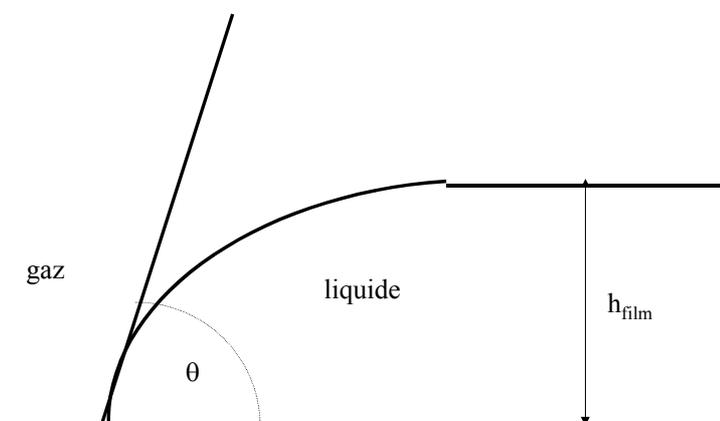


Figure 8 : définition de l'angle θ

L'énergie dissipée est difficile à déterminer. Elle est estimée à l'aide de la relation :

$$E_d' = \int_0^{t_e} \int_V \Phi \cdot dV \cdot dt \approx \Phi \cdot V \cdot t_e \quad (74)$$

avec t_e : temps de déformation défini par : $t_e = \frac{d_p}{w}$ (75)

V : volume du film liquide donné par :

$$V = \frac{\pi}{4} d_{max}^2 \cdot h_{film} \quad (76)$$

en supposant que le film est un disque de diamètre d_{max} et de hauteur h_{film}

Φ est la dissipation par unité de masse définie par :

$$\Phi = \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \frac{\partial u_x}{\partial y} \approx \mu \left(\frac{w}{h_{film}} \right)^2 \quad (77)$$

Ainsi, en définissant un facteur géométrique $\beta_{max} = \frac{d_{max}}{d_p}$ et en faisant l'hypothèse que

$E_p' = E_p$, l'équation de conservation de l'énergie permet d'aboutir à l'équation de la frontière entre les deux régimes :

$$\frac{3 We}{2 Re} \beta_{max}^4 + (1 - \cos\theta) \beta_{max}^2 - \left(\frac{We}{3} + 4 \right) = 0 \quad (78)$$

En introduisant le nombre d'Ohnesorge, cette relation peut également s'écrire :

$$Oh = \sqrt{\frac{3(1 - \cos\theta) \beta_{max}^2 - 12}{Re^2 - 4.5 \beta_{max}^4 Re}} \quad (79)$$

Ainsi, si le nombre d'Ohnesorge de la goutte impactante est supérieur à la valeur déterminée par la relation ci-dessus, le phénomène de splash se produit lors de l'impact.

Cette étude théorique a permis de mettre en évidence que les deux paramètres qui fixent la frontière déposition/splash sont les nombres de Reynolds et d'Ohnesorge de la goutte.

Le facteur géométrique β_{max} et l'angle de contact θ sont constants pour un même matériau.

4.4.2.3.2 Approche expérimentale

Mundo (98) a déterminé expérimentalement cette frontière en étudiant l'impact de gouttes sur un cylindre métallique rotatif non chauffé. La vitesse de rotation du cylindre détermine l'angle effectif et la vitesse d'impact. Afin de tester l'influence des propriétés physiques du liquide impactant (notamment la viscosité et la tension de surface), plusieurs liquides ont été employés : de l'éthanol, de l'eau et un mélange eau-éthanol-saccharose. Le générateur de gouttes utilisé produisait des gouttes dont le diamètre était compris entre 60 et 150 μm . La vitesse circonférentielle du cylindre était comprise entre 1,3 et 39,3 m/s.

Mundo a introduit le paramètre adimensionnel K défini par :

$$K = Oh \cdot Re^{1.25} \quad (80)$$

Les travaux ont mis en évidence qu'il existe une valeur critique de K marquant la frontière entre les régimes de déposition et de splash. Mundo (98) a montré que cette valeur critique dépend des conditions de surface, c'est à dire essentiellement de sa rugosité. Ces conditions de surface sont traduites par le nombre adimensionnel γ défini par :

$$\gamma = \frac{2 \cdot R_t}{d_p} \quad (81)$$

L'évolution de la valeur critique de K en fonction du nombre adimensionnel est représentée par la Figure 9:

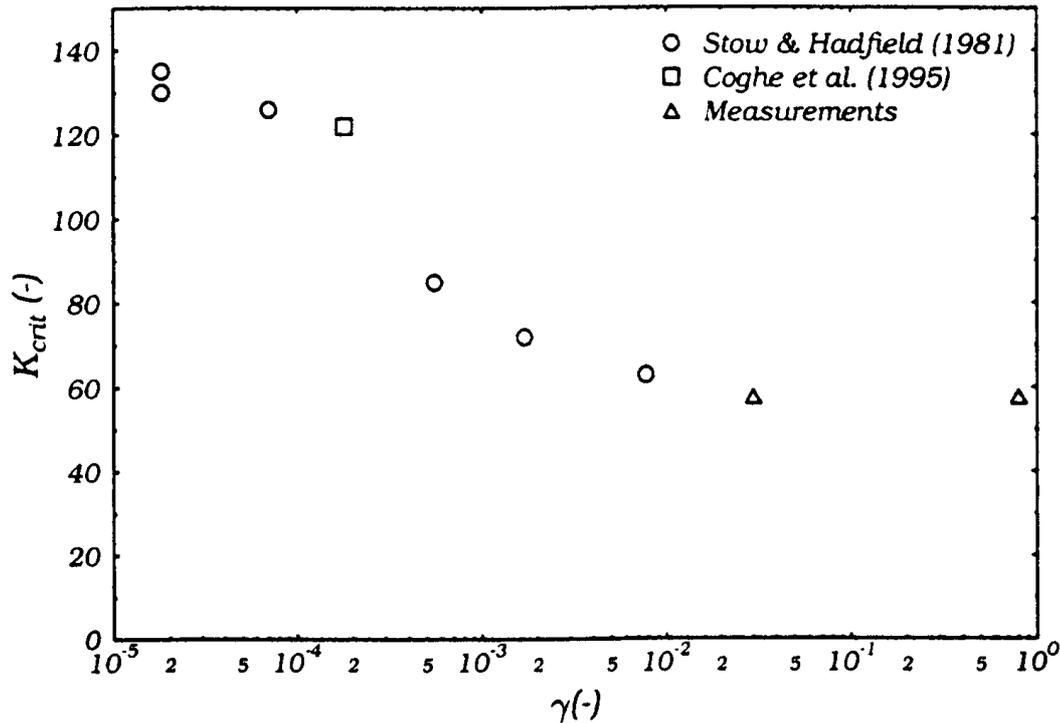


Figure 9 : Evolution de K en fonction de γ

Il est à noter que, dans le cas des essais que l'INERIS se propose de réaliser, la valeur de γ est bien plus importante que la valeur maximale du graphique de la Figure 9. En effet, la rugosité moyenne estimée de l'obstacle est de l'ordre du millimètre. En estimant que les gouttes impactantes ont un diamètre compris dans la plage 5-40 μm , la plage de valeurs de γ balayée est $50 < \gamma < 400$. Cependant, Mundo en a déduit que la valeur critique de K tend vers une limite qu'il a estimée à $K = 57,7$. C'est cette valeur qui sera retenue dans le cadre de cette étude.

Ainsi, une goutte dont les nombres Oh et Re aboutissent à une valeur de K inférieure à 57,7 se dépose sur l'obstacle et dans le cas contraire un phénomène de splash se produit.

La Figure 10 donne la représentation de cette frontière dans le plan Re, Oh .

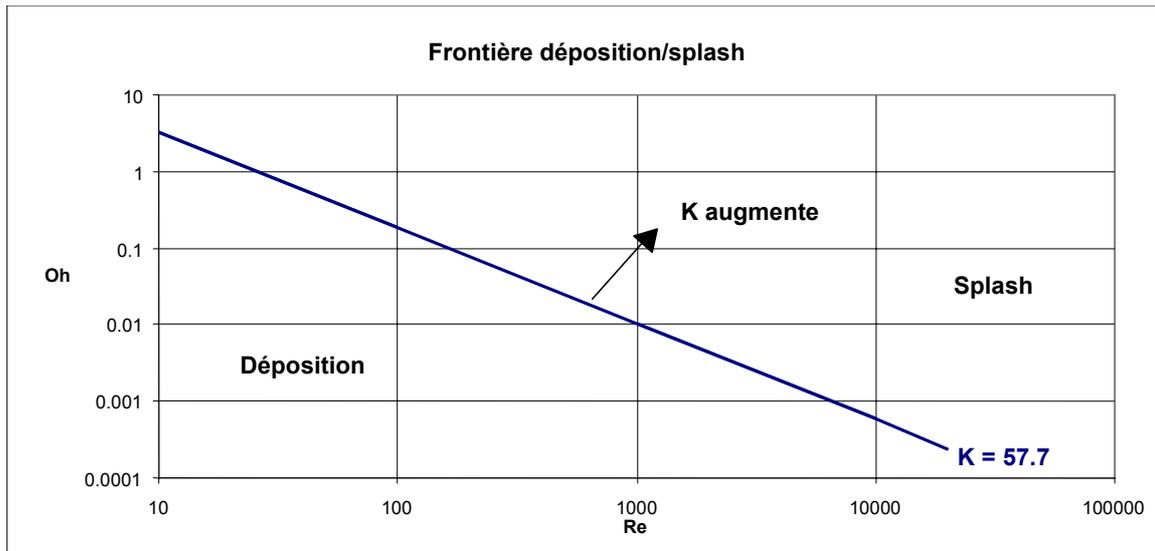


Figure 10 : Définition de la frontière entre les deux régimes.

En conclusion, il faut noter que l'approche théorique et l'approche expérimentale aboutissent à la détermination de frontière entre les régimes de déposition et de splash sensiblement voisines. En effet, l'approche théorique donne une variation du nombre d'Ohnesorge en $Re^{-1,5}$ et l'approche expérimentale une variation en $Re^{-1,25}$.

4.4.2.4 Influence de la rugosité

Lors de ses travaux, Mundo a également mis en évidence l'influence de la rugosité de l'obstacle en utilisant deux types de surface lors de ses expériences :

- surface de rugosité moyenne de l'ordre du μm : $R_t = 2,8 \mu m$;
- surface de rugosité moyenne de l'ordre du diamètre des gouttes impactantes : $R_t = 78 \mu m$.

Dans le cas où les gouttes impactantes ont un faible nombre de Reynolds (de l'ordre de 200), la rugosité de l'obstacle n'a que peu d'influence : elle ne perturbe ni ne favorise la déposition. En effet, dans ce cas, il faut un nombre d'Ohnesorge grand pour ne plus se situer dans le régime de déposition.

Dans la zone de splash, la rugosité intervient de façon significative. Si la rugosité est importante, une désintégration brutale de la goutte primaire en gouttes secondaires est observée. Les différentes phases de la désintégration (formation d'un film, d'une couronne puis sa désintégration) ne sont plus distinguées. Ceci peut être interprété comme la transformation directe de la quantité de mouvement associée aux composantes normale et tangentielle de la goutte primaire en énergie de surface.

Compte tenu de la nature des obstacles qui seront rencontrés dans le milieu industriel et de l'obstacle qui a, par exemple, été utilisé lors des essais ammoniac³, il peut être considéré qu'en pratique, c'est ce dernier régime qui est le plus probable. Néanmoins, la rugosité de l'obstacle étant nettement supérieure à celle de la surface rugueuse utilisée par Mundo (plus de 10 fois supérieure), il ne faut pas exclure que cela ait une influence plus importante ou d'une nature différente que celle mise en évidence lors de ces travaux.

De façon générale, que ce soit avec une rugosité faible ou importante :

- les propriétés physiques du fluide n'influencent que très peu la vitesse et la direction des gouttes secondaires.
- à l'opposé, l'angle d'impact joue un rôle important. Il a été mis en évidence le fait qu'un angle d'impact élevé (c'est-à-dire une quantité de mouvement tangentielle importante) provoque une distribution plus étroite des vitesses (composantes tangentielle et normale) des gouttes secondaires. De plus, les vitesses tangentielles des gouttes secondaires mesurées sont proches ou légèrement supérieures à celle des gouttes primaires. Cette observation semble prouver qu'une partie de la quantité de mouvement normale serait transformée en quantité de mouvement tangentielle lors de l'impact.

L'étude menée par Mundo a également montré l'influence de la rugosité sur les distributions des tailles et des vitesses des gouttes secondaires.

- **Dans le cas d'une surface lisse**, quand la valeur du paramètre K augmente (pour un même liquide), la distribution des tailles des gouttes secondaires est plus étroite et le diamètre moyen diminue.

Si la tension de surface ou la viscosité du liquide impactant augmente, la valeur de K diminue mais cela conduit également à une distribution des tailles plus étroite.

Si l'angle d'impact des gouttes primaires est faible, l'angle de réflexion des gouttes secondaires est également faible (ces deux angles sont mesurés à partir de la normale à la surface impactée). Le même phénomène est observé dans le cas d'un angle d'impact important. Ceci s'explique par le fait que la quantité de mouvement des gouttes primaires est partiellement conservée et détermine la trajectoire des gouttes secondaires.

Il a été également constaté que la taille des gouttes primaires n'a pas d'influence sur l'angle de réflexion, les expériences ayant été effectuées avec différentes classes de gouttes.

³ Dans le cadre des essais effectués par l'INERIS, l'obstacle utilisé était en béton dont la rugosité moyenne peut être estimée voisine du millimètre, c'est à dire bien plus importante que la taille moyenne des gouttes impactantes.

- Dans le cas d'une surface rugueuse**, l'influence de la valeur de K sur la distribution des tailles est minime. Cette observation prouve qu'au-dessus d'une certaine rugosité, le paramètre important n'est pas les propriétés physiques ou cinématiques des gouttes primaires mais la rugosité de l'obstacle impacté.

Pour un même angle d'impact, les angles de réflexion mesurés sont bien plus faibles que ceux mesurés sur une surface lisse. Cette différence peut s'expliquer par la transformation d'une partie de la quantité de mouvement tangentielle en quantité de mouvement normale du fait de l'impact sur les rugosités. Ce phénomène est illustré par la Figure 11.

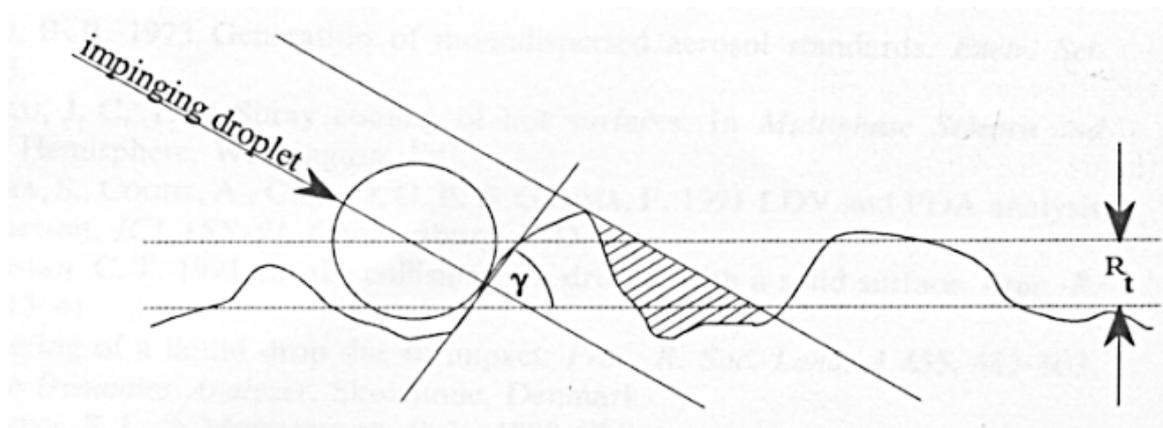


Figure 11 : impact d'une goutte sur une surface dont la rugosité est du même ordre de grandeur que le diamètre de la goutte

4.4.3 Impact sur un film liquide

Lors de l'impact d'un aérosol sur une surface, un film liquide peut se créer. Ainsi au bout d'un certain temps, l'aérosol n'impacte plus directement la surface solide mais ce film liquide. Cette situation modifie donc les conditions d'impact. Ce scénario est particulièrement étudié dans le cadre des moteurs à combustion interne afin de modéliser les interactions entre le combustible injecté et les parois du cylindre.

Lors de l'impact de gouttes sur un film liquide, quatre régimes d'impact peuvent être distingués (Stanton 98, Rein 93) en fonction de la valeur du nombre de Weber de la goutte :

- $We < 5$: la goutte est " capturée "**

Si l'énergie d'impact est très faible, la goutte "colle" à la surface du film liquide en gardant sa forme sphérique. Il a été déterminé expérimentalement que ce régime se produit pour des nombres de Weber très faibles. Dans les modélisations, il est considéré que les gouttes impactant le film dans ce régime se répandent totalement dans le film liquide.
- $5 < We < 10$: régime de coalescence partielle.**

Avec une énergie d'impact plus importante, la goutte peut rebondir sur le film du fait de la présence d'une couche d'air prise entre la goutte et le film. Cet intervalle a été déterminé expérimentalement au cours de différentes études. Quand la goutte rebondit sur la surface, il existe une surface de contact temporaire si bien que l'échange de matière est possible. Dans certains cas, la goutte réfléchie est plus petite que la goutte impactante.

- $10 \leq We \leq 18^2 d_p \left(\frac{\rho_{liq}}{\sigma} \right) v_{liq}^{1/4} \cdot f^{3/4}$: régime de coalescence

Le troisième régime est assez ressemblant au premier mais comme il intervient pour des nombres de Weber plus élevés, la goutte se répand à la surface du film.

- $We \geq 18^2 d_p \left(\frac{\rho_{liq}}{\sigma} \right) v_{liq}^{1/4} \cdot f^{3/4}$: régime de splash

Le dernier régime est celui où un phénomène de splash se produit du fait d'une énergie d'impact élevée. Après l'impact de la goutte, un cratère est formé ce qui crée une couronne de liquide à sa périphérie. Le liquide contenu dans cette couronne devient instable et se fragmente en nombreuses gouttes secondaires.

L'impact du jet diphasique sur un film liquide a été étudié par Ozdemir (93). Il a mesuré la taille des gouttes secondaires créées par le phénomène de splash. Ses mesures montrent que les gouttes secondaires créées sont de tailles plus élevées que les gouttes primaires. Ces gouttes forment un nuage qui reste à proximité du film du fait de la faible valeur de la composante normale de la vitesse. Ce phénomène a pu être observé car Ozdemir s'est placé dans le cas de rejets discontinus de fréquences 8,4 et 16,7 MHz.

En ayant travaillé avec différentes températures de surface, Ozdemir est arrivé à la conclusion que l'évaporation n'a que peu d'influence sur le comportement du film liquide en comparaison avec l'influence des caractéristiques des gouttes impactantes.

4.4.4 Modélisation de l'impact d'un aérosol sur une surface plane

L'impact d'un aérosol sur une surface rigide plane a fait l'objet de nombreuses études, surtout dans le cadre des moteurs à combustion interne.

La plupart des modèles existants prennent en compte les conditions énergétiques de l'impact afin de déterminer le devenir des gouttes impactantes. Cependant, dans le cas du splash, les modèles sont établis avec l'hypothèse qu'il y a conservation de la masse entre les gouttes primaires et les gouttes secondaires. Ceci impose que la goutte primaire est fractionnée en gouttes secondaires contenant l'intégralité de la masse de liquide et que par conséquent il n'y a aucune déposition de liquide sur l'obstacle. Or, les différentes expériences qui ont été réalisées ont mis en évidence qu'il y a, même dans le cas du splash, déposition d'une fraction de liquide sur l'obstacle. Partant de ce constat, Mundo (97) a élaboré un nouveau modèle permettant de déterminer la fraction de liquide déposée sur l'obstacle pour chaque régime.

Le paramètre gouvernant ce modèle est le nombre adimensionnel K (77). Le modèle considère deux types de régimes (cf 4.4.2.3) :

- $K \leq 57,7$: régime de déposition : l'intégralité de la masse de liquide impactante se dépose sur l'obstacle ;
- $K > 57,7$: régime de splash : seule une fraction de la masse de liquide impactant se dépose sur l'obstacle.

Le diamètre des gouttes secondaires est déterminé à partir de la relation :

$$d_b = \min[8.72 \exp(-0.0281K), 1.0] d_a \quad (82)$$

avec les indices : a : avant impact (gouttes secondaires)

b : après impact (gouttes primaires)

Le nombre de gouttes secondaires est déterminé à partir de la relation :

$$n_b = \min[1.676 \cdot 10^{-5} K^{2.539}, 1000] n_a \quad (83)$$

La détermination du diamètre et du nombre de gouttes secondaires permet de calculer la fraction massique de liquide déposée, f_{dep} , par la relation :

$$f_{dep} = 1 - \frac{n_b}{n_a} \left(\frac{d_b}{d_a} \right)^3 \quad (84)$$

Le modèle proposé par Mundo (97) permet également de calculer les vitesses normales et radiales des gouttes secondaires à partir des vitesses de gouttes primaires. Pour ce faire, il faut donc déterminer le champ de vitesse des gouttes primaires. La méthode présentée consiste à déterminer le champ de vitesse de la phase gazeuse par la résolution des équations de Navier-Stokes selon un modèle $k-\epsilon$ puis le champ de vitesse des gouttes primaires par une méthode lagrangienne consistant à suivre dans l'écoulement un ensemble de gouttes ayant les mêmes tailles, températures, vitesses et les mêmes propriétés physiques.

Pour valider ce modèle, Mundo compara ses résultats avec les résultats expérimentaux obtenus dans le cas de l'impact de gouttes d'eau distillée sur une surface plane inclinée de 60° par rapport à l'horizontale. Cette comparaison met en évidence que les diamètres des gouttes secondaires calculés par le modèle sont légèrement plus faibles que ceux mesurés expérimentalement. Ceci entraîne une surestimation de la fraction de liquide déposée sur l'obstacle.

Mundo a également comparé les résultats d'autres modèles existants (Naber et Reitz, 1988 ; Wang et Watkins, 1993) à ses mesures expérimentales et il a montré que ce nouveau modèle donnait des résultats plus proches de la réalité.

Il existe cependant une limitation importante à ce modèle. En effet, il n'est valable que pour des conditions d'impact (taille des gouttes, vitesse du jet au moment de l'impact) conduisant à des valeurs du paramètre K inférieures à 180. Au dessus de cette valeur, les résultats fournis par le modèle ne sont plus cohérents : les diamètres de gouttes secondaires, d_b , calculés à partir de la relation (82) deviennent très faibles (de l'ordre de 10^{-2} μm). Ceci a pour conséquence d'aboutir à une fraction massique déposée, f_{dep} , très proche de 1 ce qui reviendrait à considérer, qu'à partir d'une certaine énergie d'impact, il y aurait déposition totale du liquide (régime de déposition). Or, les différentes expériences réalisées ont montré que ce n'est pas le cas.

4.4.5 Transferts thermiques entre un jet diphasique et une surface solide

Lors de l'impact d'un jet diphasique sur un obstacle plan placé sur sa trajectoire, une fraction de la phase liquide dispersée dans le jet est retenue par déposition. En parallèle, l'impact donnera lieu à des échanges thermiques entre l'obstacle et le jet. En effet, dans la plupart des cas, la température initiale de l'obstacle est plus élevée que celle du jet impactant. Le plus souvent, la température initiale de l'obstacle est prise égale à la température ambiante.

La chaleur cédée par l'obstacle au jet entraîne la vaporisation d'une fraction du liquide retenu. La quantification de cette vaporisation est importante car elle sera entraînée dans l'atmosphère et contribuera au terme source.

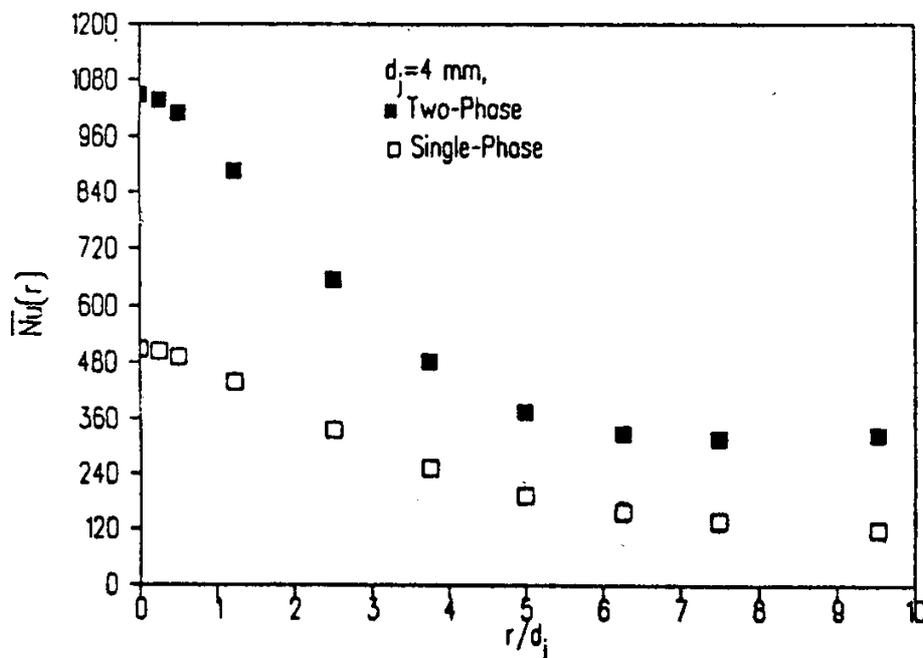
Le transfert de chaleur entre l'obstacle et le jet diphasique s'effectue par convection forcée. La plupart des études effectuées sur ce sujet ont été réalisées dans le cadre du refroidissement de composants ou de pièces de petite taille, cas dans lesquels la densité de flux à évacuer est très élevée. Ces conditions ne sont pas celles qui seront rencontrées dans le cas d'un rejet accidentel sur un site industriel qui correspond plutôt au cas d'une plaque ou d'un mur de grande taille et qui ne bénéficie pas d'un apport important d'énergie en continu.

L'étude de la littérature n'a pas permis, contrairement aux configurations d'écoulement simples (jet monophasique, écoulement parallèle à une surface plane), de trouver une ou plusieurs corrélations s'appliquant à ce type d'écoulement.

Les études menées ont néanmoins permis de mettre en évidence que l'échange convectif entre une surface solide et un jet diphasique est bien plus important que dans le cas d'un jet monophasique (Mazur 95, Zumbrunnen 95). Les travaux menés par Zumbrunnen (95) ont montré une augmentation du coefficient d'échange local pouvant atteindre 120% par rapport à un jet monophasique gazeux. Ces travaux ont abouti à la détermination de corrélations permettant de calculer le nombre de Nusselt local. Cependant, la configuration utilisée est très différente de celle de cette étude : les expériences ont été réalisées avec un jet d'eau plan rendu diphasique par injection de bulles d'air au niveau de l'orifice de sortie.

Des différentes études trouvées dans la littérature, il ressort également que le nombre de Nusselt local est maximal au point d'impact et diminue de façon monotone avec la distance par rapport au point d'impact. Cette évolution du nombre de Nusselt est similaire à celle observée lorsque les échanges thermiques se font entre un jet monophasique et une surface solide (Behnia 99).

La Figure 12 présentée ci-dessous, tirée des travaux de Chang et al (93), illustre les propos précédents.



d_j : diamètre du jet impactant

r : distance par rapport au point d'impact

Figure 12 : Influence d'un écoulement diphasique sur le nombre de Nusselt.

Ces travaux ont été réalisés avec du Fréon (R-113). Le graphique présenté ci-dessus illustre également le fait que le transfert de chaleur est bien plus important dans le cas d'un jet diphasique que dans le cas d'un jet monophasique.

Dans leur étude Chang et al (93) ont également montré que lors de l'impact d'un jet diphasique sur une surface dont la température est supérieure à la température d'ébullition du fluide constituant le jet, le transfert de chaleur a deux origines :

- un échange convectif induit par l'écoulement du jet à la surface du solide ;
- un échange dû à l'ébullition de la phase liquide.

Les connaissances actuelles sur les transferts de chaleur entre un solide et un jet diphasique impactant sont encore limitées. La complexité de l'écoulement (présence de plusieurs phases, turbulence) rend sa modélisation délicate. De nombreuses études seront nécessaires afin de mieux appréhender cette configuration d'écoulement et de déterminer les corrélations permettant de calculer le transfert de chaleur (nombre de Nusselt local).

5. DESCRIPTION DU MODELE

Un modèle a été développé à partir des équations trouvées dans la littérature et présentées dans l'étude bibliographique reportée dans la chapitre précédent. Le but de ce modèle est de déterminer la fraction de liquide retenue par un obstacle plan placé perpendiculairement à un jet diphasique. Ce modèle, permettant de calculer la masse de liquide retenue par l'obstacle placé dans le champ proche nécessite la détermination successive de :

- l'écoulement à la brèche ;
- l'écoulement à la fin de la zone d'expansion ;
- la distribution de la taille et de la masse des gouttes ;
- l'évolution thermodynamique du jet diphasique ;
- la masse de liquide retenue lors de l'impact sur l'obstacle ;
- la surface occupée par la flaque de liquide.

Le langage choisi pour développer le modèle est le Visual Basic pour Application (VBA). Le choix de ce langage a principalement été motivé par la performance de l'interface que constitue le logiciel Microsoft Excel pour l'affichage des résultats par rapport aux autres langages du type Fortran ou C qui imposent la création de fichiers de résultats.

5.1 CONDITIONS A LA BRECHE

Le modèle retenu est une méthode HEM à détente isenthalpique pour les raisons explicitées précédemment au paragraphe 4.1, afin de calculer la qualité de l'écoulement à la brèche, x_b , ainsi que sa vitesse, U_b . Les entrées nécessaires à ce calcul sont :

- les conditions dans le réservoir (P_{int} , T_{int}) ;
- les conditions à la brèche (P_b , T_b), ces valeurs peuvent toutefois être calculées ;
- le débit moyen qui peut être soit calculé à l'aide de relations disponibles dans le logiciel ou soit introduit dans la logiciel comme un paramètre d'entrée, cette possibilité étant surtout intéressante dans le cas d'une comparaison avec des essais ;
- le diamètre de l'orifice, D_b .

La qualité, déterminée à partir de la relation (4) permet de calculer la masse volumique moyenne du fluide à la brèche ρ_b à partir de l'équation (9). La vitesse de l'écoulement est alors obtenue par l'équation (11).

$$x_b = 1 - \exp\left[-\frac{C_{p_{liq}}}{L_v}(T_{int} - T_b)\right] \quad (4)$$

$$v = (1 - x) \cdot v_{liq} + x \cdot v_{gaz} \quad (9)$$

$$\frac{U_b^2}{2} = \alpha_p^2 \left(\frac{P_{int} - P_b}{\rho_{liq}} + C_{p_{liq}}(T_{int} - T_b) - C_{p_{liq}, T_b} \cdot \ln\left(\frac{T_{int}}{T_b}\right) + g \cdot h_{int} \right) \quad (11)$$

5.2 MODELISATION DU FLASH

C'est dans cette zone que se produit la détente du fluide de la pression à la brèche à la pression atmosphérique. Cette détente entraîne :

- l'occurrence du flash thermodynamique ;
- l'accélération du fluide ;
- l'augmentation du diamètre du jet.

La nouvelle qualité, x_{exp} , est également obtenue à partir d'une méthode HEM en utilisant l'équation (17).

$$x_{exp} = x_b + \frac{Cp_{liq}(T_b - T_{eb})}{L_V} \quad (17)$$

La densité du jet, ρ_{exp} , est alors recalculée avec la qualité x_{exp} . Le débit masse de liquide à la fin de la zone d'expansion est obtenu à partir de la relation simple :

$$\dot{m}_{exp} = (1 - x_{exp}) \cdot q_m \quad (85)$$

Un bilan de quantité de mouvement fait en supposant l'écoulement orienté dans une seule direction (18) permet alors de déterminer la vitesse du jet après expansion, U_{exp} .

$$U_{exp} = U_b + \frac{(P_b - F_{dil}^2 \cdot P_{atm}) \cdot \pi \cdot D_b^2}{4 \cdot \dot{m}_{exp}} \quad (18)$$

La relation utilisée contient un paramètre pouvant être modifié par l'utilisateur : le facteur de dilatation, F_{dil} dont la valeur exacte n'est pas connue. Le choix d'une valeur de F_{dil} conditionne également la valeur du diamètre du jet car celui-ci est lié au diamètre de la brèche par la relation (19).

$$F_{dil} = \frac{D_{exp}}{D_b} \quad (19)$$

Lors de la saisie de ce paramètre, le modèle contrôle que la valeur fournie par l'utilisateur respecte le critère fourni par la relation (20).

$$1 \leq F_{dil} \leq \sqrt{\frac{P_b}{P_{atm}}} \quad (20)$$

La longueur de la zone d'expansion est également un point d'incertitude. L'utilisateur doit fixer ce paramètre avant de lancer le calcul. Comme dans le cas du facteur de dilatation, le modèle vérifie que la valeur saisie est bien comprise dans l'intervalle $0,5-4 D_b$.

5.3 MODELISATION DE L'EVOLUTION DU JET DANS LA ZONE D'EXPANSION

5.3.1 Distributions des tailles de gouttes

La taille des gouttes est déterminée à partir de la méthode de l'instabilité de Weber. Le diamètre moyen des gouttes est calculé à partir de la relation (22).

$$\bar{d}_p = \frac{We_c \cdot \sigma}{\rho_{air} \cdot U_{exp}^2} \quad (22)$$

La détermination de la masse volumique de l'air, ρ_{air} , nécessite la connaissance de la pression et de la température atmosphériques lors de l'essai (P_{atm} , T_{atm}). La valeur du nombre de Weber critique, We_c , est un paramètre à fournir au modèle. La valeur conseillée pour l'ammoniac est $We_c = 12$.

La distribution de tailles, $p(t)$, est ensuite calculée à partir d'une loi log-normale (36).

$$p(t) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln(t)}{\ln(\sigma_g)}\right)^2\right)}{2\pi^{1/2} \ln(\sigma_g)} \quad (36)$$

La variance géométrique est également un paramètre à fournir au modèle, la valeur conseillée étant de 1,3. Par intégration (37), le modèle calcule la fonction cumulative $F(t)$.

$$F(t) = \int_0^t p(\lambda) \frac{d\lambda}{\lambda} \quad (37)$$

A partir de la distribution de la taille des gouttes, le modèle détermine la distribution de la masse des gouttes, $pm(t)$, ainsi que la fonction cumulative associée, $Fm(t)$, à partir des relations (41) et (42).

$$F_m(t) = \left(\frac{\pi}{6} \rho_{liq} \cdot \bar{d}_p^3\right) \int_0^t t^2 \cdot p(t) \cdot dt \quad (41)$$

$$p_m(t) = \bar{m}_d \cdot t^2 \cdot p(t) \quad (42)$$

Le nombre total de gouttes de liquide contenues dans le jet est ensuite calculé à partir de la relation (43).

$$n_d = \frac{(1-x) m_{jet}}{F_m(\infty)} \quad (43)$$

La connaissance de la distribution de la masse des gouttes a permis de déterminer la distribution de la masse totale de liquide, $M(t)$, et de la fraction massique, $f(t)$, en fonction de la taille des gouttes.

Ces distributions sont obtenues à partir des relations :

- $M(t) = n_d \cdot F_m(t)$ avec $0 \leq M(t) \leq \dot{m}_{exp}$
- $f(t) = \frac{n_d \cdot F_m(t)}{\dot{m}_{exp}}$ avec $0 \leq f(t) \leq 1$

La connaissance de cette répartition a une importance certaine pour la modélisation. Elle permet en effet de déterminer la plage de diamètres sur lesquels il est judicieux d'effectuer les calculs afin d'optimiser le couple (temps de calcul/précision des résultats). Les deux bornes de cette plage sont appelées d_{min} et d_{max} .

5.3.2 Evolution du jet

Pour modéliser l'évolution du jet entre la fin de la zone d'expansion et le point d'impact, le modèle créé utilise la modélisation de Ianello et la modélisation de Papadourakis de façon couplée. Le logigramme de cette partie du modèle est présenté ci-dessous.

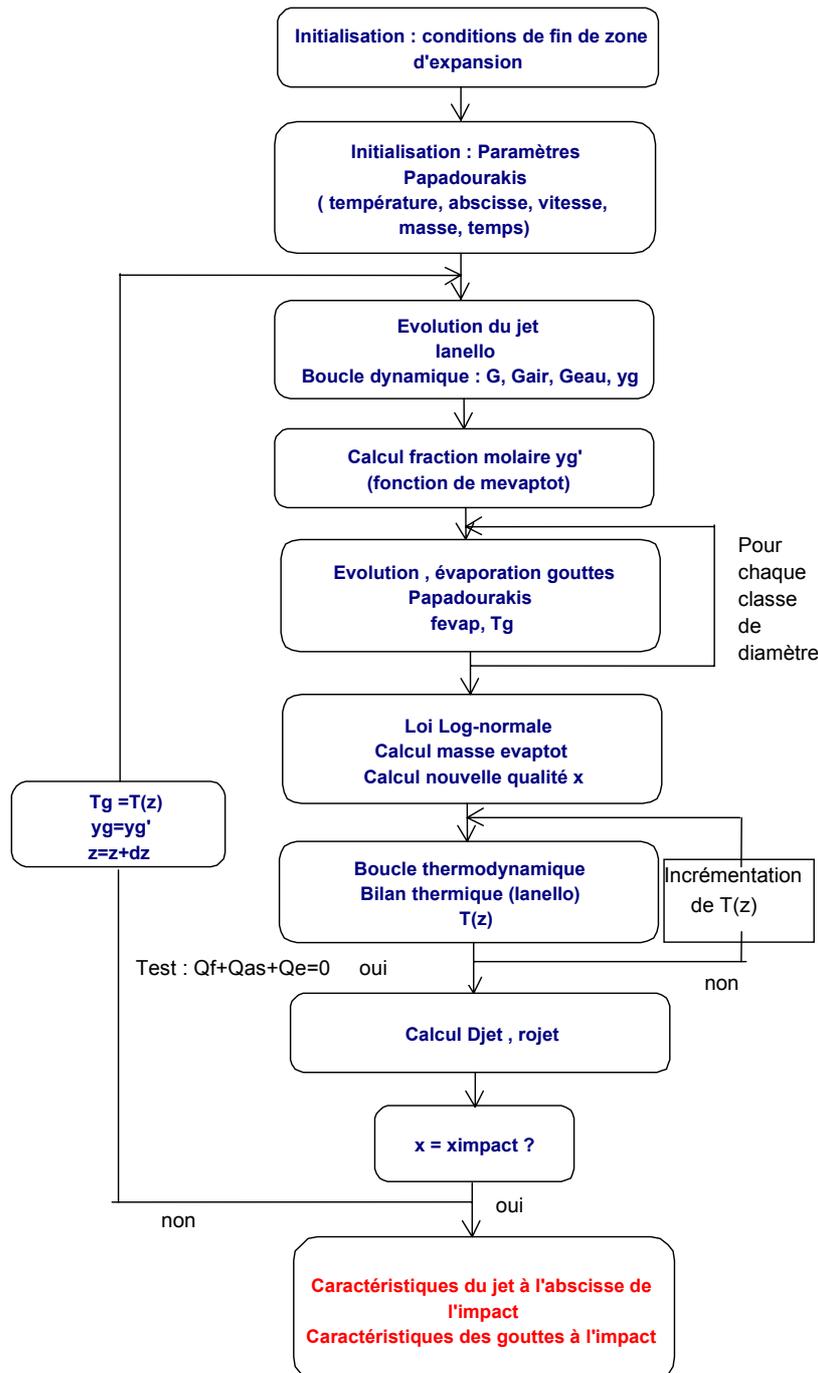


Figure 13 : Logigramme du modèle développé par l'INERIS.

La modélisation de Ianello (cf. 4.3.2) permet de déterminer, en fonction de la distance parcourue depuis la fin de la zone d'expansion (z), l'entraînement d'air du jet à l'aide de la relation (44).

$$\dot{m}(z) = E_0 \cdot \dot{m}_{exp} \cdot \frac{z}{D_{exp}} \cdot \left(\frac{\rho_{air}}{\rho_{exp}} \right)^{0.5} \quad (44)$$

La connaissance du débit total du jet, $G(z)$, permet de déterminer la vitesse du jet, $U(z)$, à partir de la relation 46.

$$U(z) = \left(\frac{\dot{m}_{exp}}{\dot{m}(z)} \right) \cdot U_{exp} \quad (46)$$

Dans sa forme classique, le modèle de Ianello détermine la température du jet, $T(z)$ ainsi que la qualité du polluant, $x(z)$, à l'aide d'un processus itératif constitué par les relations (50) à (56).

- $Q_f = \dot{m}_{exp} [h_{f, liq}(T_{eb}) + x_{exp} \cdot L_{vf}(T_{eb}) - (h_{f, liq}(T(z)) + x(z) \cdot L_{vf}(T(z)))] \quad (50)$

- $Q_{eau} = \dot{m}_{eau}(z) [h_{eau, g}(T_{atm}) - (h_{eau, liq}(T(z)) + x_{eau}(z) \cdot L_{veau}(T(z)))] \quad (51)$

- $Q_{as} = \dot{m}_{as}(z) [C_{pas}(T_{atm} - T(z))] \quad (52)$

$$P^{eau}(T(z)) = Y_{eau} \cdot P_{atm} = P_{sat}^{eau} \quad (53)$$

$$P^f(T(z)) = Y_g \cdot P_{atm} = P_{sat}^f \quad (54)$$

$$Y_g = \frac{\frac{x_f(z) \cdot \dot{m}_{exp}}{M_f}}{\frac{x_f(z) \cdot \dot{m}_{exp}}{M_f} + \frac{x_{eau}(z) \cdot \dot{m}_{eau}(z)}{M_{eau}} + \frac{\dot{m}_{as}}{M_{as}}} \quad (55)$$

$$Y_{eau} = \frac{\frac{x_{eau}(z) \cdot \dot{m}_{eau}(z)}{M_{eau}}}{\frac{x_f(z) \cdot \dot{m}_{exp}}{M_f} + \frac{x_{eau}(z) \cdot \dot{m}_{eau}(z)}{M_{eau}} + \frac{\dot{m}_{as}}{M_{as}}} \quad (56)$$

Dans le modèle élaboré, la qualité du produit ne sera pas déterminée par ce processus itératif mais à l'aide de la modélisation de Papadourakis (cf. 4.3.3). Le cas retenu est celui d'une goutte contenue dans un jet diphasique c'est à dire le cas où la vitesse relative entre la phase gazeuse et la goutte est nulle. Cette modélisation s'appuie alors sur les équations (57) et (58) et avec $Nu = Sh = 2$.

- $\frac{\partial m_d}{\partial t_r} = -\pi \cdot d_p \cdot Sh \cdot D_f \cdot \text{Ln} \left(\frac{1 - Y_g}{1 - Y_s} \right) \quad (57)$

- $\frac{\partial T_d}{\partial t_r} = \frac{\pi \cdot d_p^2 \cdot h_d (T_g - T_d) + \frac{\partial m_d}{\partial t_r} [(C_{pg} - C_{p_{liq}})(T_d - T_g) + L_v]}{m_d \cdot C_{p_{liq}}} \quad (58)$

Les équations (57) et (58) nécessitent la connaissance de la température de la phase gazeuse environnant les gouttes, T_g , ainsi que de la fraction molaire de polluant gazeux, y_g , qu'elle contient. Ces deux grandeurs seront déterminées par la modélisation de Ianello.

Le processus mis en place suit donc les étapes suivantes :

1. initialisation : conditions de la fin de la zone d'expansion ;

- $z = 0$
- $T(0) = T_{\text{exp}} = T_{\text{eb}}$
- $Y_g(0) = 0.999$
- $G(0) = m_{\text{exp}}$

2. calcul du débit d'air entraîné sur le pas d'espace dz : détermination d'une nouvelle valeur de Y_g (la phase gazeuse n'est plus exclusivement composée de produit) ;

3. pour chaque diamètre de goutte de la plage [d_{min} ; d_{max}], la modélisation de Papadourakis permet de calculer la fraction de liquide évaporée, $f_{\text{evap}}(t)$;

Rappel : $t = \frac{dp}{dp}$

4. la masse totale de polluant évaporée sur le pas d'espace est obtenue par intégration de la relation :

$$m_{\text{evap}} = \int_{t_{\text{min}}}^{t_{\text{max}}} f_{\text{evap}}(t) \cdot pm(t) dt$$

5. la connaissance de la masse évaporée permet de :

- calculer la nouvelle qualité du produit ;
- calculer la nouvelle fraction molaire du produit dans la phase gazeuse du jet ;
- déterminer la nouvelle température du jet par le processus itératif de la méthode de Ianello ;
- déterminer la nouvelle masse volumique du jet ainsi que son diamètre.

Le processus (étapes 2 à 5) est répété jusqu'à ce que l'abscisse z soit égale à celle de l'obstacle.

Ce calcul permet d'obtenir, à l'abscisse de l'impact (z_{imp}) :

- la qualité du jet (x_{imp}) ; ceci permet de déterminer la masse de liquide encore présente dans le jet à cet instant ;
- la température $T(z_{\text{imp}})$, la vitesse $U(z_{\text{imp}})$ et le diamètre $D_j(z_{\text{imp}})$ du jet ;
- la tailles des gouttes partiellement vaporisées.

5.4 MODELISATION DE L'INTERACTION ENTRE L'OBSTACLE ET LE JET

5.4.1 Calcul de la masse de liquide retenue

Pour chaque diamètre appartenant à la plage [d_{min} ; d_{max}] :

- la modélisation de Papadourakis a permis de déterminer le diamètre de la goutte après évaporation ainsi que sa température. Si la goutte s'est entièrement vaporisée, alors son diamètre est pris égal à 0. La fraction massique vaporisée, $f_{evap}(t)$ est définie par :

$$f_{evap}(t) = 1 - \frac{\text{Masse impact}}{\text{Masse initiale}}$$

- le paramètre adimensionnel K est calculé. A partir de ce calcul, la fraction massique déposée de la goutte, $f_{dep}(t)$ est déterminée en fonction de la valeur de K :

- si $K < 57,7$ alors $f_{dep}(t) = 1$ (régime de déposition)
- si $K > 57,7$ (régime de splash), sont calculées les grandeurs suivantes :

- d_b , diamètre des gouttes secondaires, à partir de la relation (82)

$$d_b = \min[8.72 \exp(-0.0281K), 1.0] d_a \quad (82)$$

- n_b , nombre de gouttes secondaires, à partir de la relation (83)

$$n_b = \min[1.676 \cdot 10^{-5} K^{2.539}, 1000] n_a \quad (83)$$

- $f_{dep}(t)$ à partir de la relation (84)

$$f_{dep} = 1 - \frac{n_b}{n_a} \left(\frac{d_b}{d_a} \right)^3 \quad (84)$$

- la fraction massique déposée corrigée, $f_{dep}^*(t)$ est ensuite calculée. La correction consiste à tenir compte de la vaporisation d'une fraction de la goutte qui s'est produite entre la zone d'expansion et l'impact sur l'obstacle. $f_{dep}^*(t)$ est calculée à partir de la relation :

$$f_{dep}^*(t) = f_{dep}(t) \cdot (1 - f_{evap}(t))$$

Une fois l'ensemble de ces calculs effectués, le taux de déposition de liquide (en kg/s) est déterminé en intégrant la relation :

$$\dot{m}_{dep} = \int_{t_{min}}^{t_{max}} f_{dep}^*(t) \cdot pm(t) dt$$

Au cours d'un pas de temps, le taux de déposition est supposé constant car la variation de la température de surface de l'obstacle impacté n'est pas suffisamment importante pour affecter la déposition. La masse totale de liquide déposée est obtenue en multipliant ce taux par la durée totale du rejet.

Le résultat de ce calcul est affiché par le modèle sous deux formes :

- affichage de la masse totale retenue par l'obstacle (sur la durée totale de l'essai)
- affichage de la fraction massique retenue définie par :

$$\% \text{ dep} = \frac{\text{Taux de déposition}}{\text{Debit liquide impactant}}$$

Par hypothèse, la masse de liquide déposée est à la température de goutte calculée par la modélisation de Papadourakis ce qui permet d'en déterminer la densité. La hauteur de la flaque formée par le liquide retenu n'est pas connue avec précision et est un paramètre à saisir dans le modèle. La valeur conseillée, dans le cas d'un sol en béton est de 1 cm (Johnson, 98). La connaissance des trois grandeurs masse totale retenue, densité du liquide et hauteur de flaque permet d'en déterminer la surface.

5.4.2 Modélisation de l'échange thermique entre le jet et l'obstacle

Comme cela a été expliqué dans l'étude bibliographique, l'échange thermique entre un jet diphasique impactant et un obstacle est encore mal connu. Dans le cadre de cette étude, il a été choisi de le modéliser de façon simple en supposant que le transfert convectif (convection forcée) s'effectue avec un coefficient d'échange h constant ; c'est à dire de façon uniforme sur toute la surface de l'obstacle exposée à l'impact du jet. Bien entendu, cette méthode induira des erreurs puisqu'il est prouvé que le coefficient d'échange varie avec l'éloignement à la zone d'impact.

Le coefficient h n'étant pas connu, il sera déterminé à l'aide des mesures des températures de surface de l'obstacle obtenues lors d'essais effectués par la suite.

La méthode retenue pour modéliser le transfert thermique est une méthode nodale à une dimension. Cette méthode consiste en une discrétisation de l'obstacle impacté en N parties et en l'élaboration d'un bilan thermique sur chacune d'elles. Elle permet d'obtenir l'évolution temporelle du profil de température au sein de l'obstacle et ainsi de déterminer la quantité de chaleur cédée par celui-ci au jet impactant.

La connaissance de l'évolution temporelle du profil de température au sein de l'obstacle permet de déterminer l'évolution temporelle de la puissance cédée par l'obstacle au jet, $P(t)$ en W , ainsi que celle du taux de vaporisation du polluant liquide retenu, $m_{vap}(t)$ en kg/s . Ces deux termes sont obtenus à partir des relations :

- $P(t) = -\lambda_o \frac{T_2(t) - T_1(t)}{dx}$
- $m_{vap}(t) = \frac{P(t)}{L_V}$

La masse totale de polluant vaporisé, M_{vaptot} en kg , est obtenue à partir de l'intégration suivante :

$$M_{vaptot} = \int_0^{t_{rejet}} m_{vap}(t).dt$$

La masse totale vaporisée est ensuite soustraite à la masse totale de liquide déposé et la surface de flaque correspondante est calculée.

Le modèle trace l'évolution temporelle du taux de vaporisation du produit déposé ainsi que la fonction cumulative correspondante.

6. CONCLUSION

L'étude réalisée a permis dans un premier temps de faire un point sur l'état de l'art dans la modélisation des jets diphasiques d'une part et de l'impact d'une goutte sur une surface solide d'autre part. Dans un deuxième temps, les modèles décrits dans la littérature ont été utilisés pour réaliser une première version d'un modèle capable d'évaluer la quantité de produit capturée par un obstacle placé sur la trajectoire d'un jet diphasique.

La revue bibliographique a mis en évidence le fait que la modélisation d'un tel impact nécessite la connaissance d'un grand nombre de paramètres, les plus importants étant :

- les caractéristiques de l'aérosol (quantité totale de liquide contenu dans l'aérosol, distribution de la taille des gouttelettes et de la masse de liquide) ;
- la vitesse et la température du jet diphasique.

La connaissance de ces paramètres lors de l'impact impose d'être en mesure d'en déterminer l'évolution depuis le point de rejet. La littérature a permis de trouver les modèles permettant de modéliser cette évolution.

Le modèle développé au cours de cette étude présente un caractère original dans la mesure où il couple deux approches distinctes (eulérienne et lagrangienne) en prenant en compte de plus une distribution non uniforme de taille de gouttes.

Toutefois, quelques incertitudes subsistent, notamment concernant le terme source (taille et distribution des gouttes à la brèche) et la zone d'expansion du jet.

Pour affiner le modèle développé, il est prévu dans un premier temps de comparer les valeurs fournies par le modèle avec des valeurs expérimentales disponibles dans la littérature et dans un deuxième temps de réaliser des essais pour compléter la comparaison.

De plus, il est à noter que les résultats relatifs à la quantification de la masse de liquide retenue par l'obstacle, ne sont pas vérifiables à l'heure actuelle du fait d'un manque de données expérimentales. Des essais sont également prévus pour évaluer la pertinence du modèle.

Pour mémoire, la réalisation d'une campagne d'essais est prévue pour obtenir plus de données relatives aux jets diphasiques en mesurant notamment :

- la masse de liquide retenue ;
- le champ de température et de vitesse dans le jet (champ proche) ;
- le transfert thermique entre le jet et l'obstacle, cet aspect étant encore fort mal connu actuellement.

A l'issue de cette campagne expérimentale, une confrontation des résultats obtenus avec le modèle développé et les valeurs expérimentales permettra de juger de sa validité.

7. REFERENCES

BEHNIA M. et al (1999)

Numerical study of turbulent heat transfer in confined and unconfined impinging jets

International Journal of Heat and Fluid Flow, No. 20, p. 1-9

BOUET (1999)

Ammoniac – Essais de dispersion atmosphérique à grande échelle

Rapport final, INERIS-DRA-Rbo-1999-20410, Ministère de l'Aménagement du Territoire et de l'Environnement.

CHANG C.T. et al (1993)

Confined and Submerged Single and Multiple Jet impingement Heat Transfer in Two-Phase Flow

ASME, HTD-Vol. 263, p. 33-41

GOTTFRIED B.S., LEE C.J., BELL K.J.(1966)

The Leidenfrost phenomenon : film boiling of liquid droplets on a flat plate

International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 9, p. 1167-1187

HODIN A. (1996)

Modélisation du débit à la brèche et du jet généré par une fuite d'ammoniac en phase liquide : état des connaissances et modélisation des rejets diphasiques

EDF-Centre Lyonnais d'Ingénierie, Note d'étude

IANELLO V., ROTHE P.H., WALLIS G.B. (1989)

Aerosol Research Program : improved source term definition for modeling the ambient impact of accidental release of hazardous liquids

Paper presented at the 6th International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, Oslo, Norway

JOHNSON D.W., WOODWARD J.L. (1998)

RELEASE, a Model with Data to Predict Aerosol Rainout in Accidental Releases

CCPS CONCEPT BOOK

MAY L.(1996)

Écoulements diphasiques lors de la vidange de gaz liquéfiés initialement sous saturés. Validation par l'eau et le CFC11.

Thèse de l'Ecole des Mines de Saint-Etienne et de Paris

MAZUR A.I., MAZUR G.A.(1995)

Controlled Cooling of the Inner Wall of a Cylinder by Two-Phase Jets

Heat Transfer Research, Vol. 26, Nos. 3-8, p 538-545

MUNDO C.H.R, TROPEA C., SOMMERFELD M. (1997)

Numerical and Experimental Investigation of Spray Characteristics in the Vicinity of a Rigid Wall

Experimental Thermal and Fluid Science, No. 15, p. 228-237

MUNDO C.H.R, SOMMERFIELD M., TROPEA C. (1995)

Droplet-wall collisions : experimental studies of the deformation and breakup process

Int. J. Multiphase Flow, Vol. 21, No. 2, p. 151-173

MUNDO C.H.R., SOMMERFIELD M., TROPEA C. (1998)

On the Modeling of Liquid Sprays Impinging on Surfaces

Atomization and Sprays, Vol. 8, p. 625-652

NYREN K., WINTER S. (1983)

Two phase discharge of liquified gases through pipes. Fields experiments with ammonia and theoretical model.

4 th International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, No 33 Vol. 1, p. E1-E11

OZDEMIR I., WHITLAW J.H. (1993)

Impingement of an unsteady two-phase jet on unheated and heated flat plates

Journal of Fluid Mechanics, Vol. 252, p. 499-523

PAPADOURAKIS A., CARAM H.S., BARNER C.L.(1993)

Upper and lower bounds of droplet evaporation in two-phase jets

J. Loss Prev. Ind., Vol. 4, p. 93-101

RAZZAGHI M. (1988)

Droplet size estimation of two-phase flashing jets

Nuclear Engineering and Design, No. 114, p.115-124

REIN M. (1993)

Phenomena of liquid drop impact on solid and liquid surfaces

Fluid Dynamics Research, No. 12, p. 61-93

STANTON D.W., RUTHLAND C.J.(1998)

Multi-dimensional modeling of thin liquids films and spray-wall interactions resulting from impinging sprays

International Journal of Heat and Mass Transfer, No. 21, p. 3037-3054

VAN DEN AKKER H.E.A., SNOEY H., SPOELSTRA H.(1983)

Discharges of pressurised liquified gases through apertures and pipes

4 th International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, No 33 Vol. 1, p. E23-E35

VESALA T., KUKKONEN J.(1992)

A model for binary droplet evaporation and condensation, and its application for ammonia droplets in humid air

Atmospheric Environment, Vol. 26A, No. 9, p. 1573-1581

WACHTERS L.H.J. et al (1966)

The heat transfer from a hot wall to impinging mist droplets in the spheroidal state

Chemical Engineering Science, Vol. 21, p. 1231-1238

WACHTERS L.H.J., WESTERLING N.A.J. (1966)

The heat transfer from a hot wall to impinging water drops in the spheroidal state

Chemical Engineering Science, Vol. 21, p. 1047-1056

XU H., LIUB Y., HE P., WANG H. (1998)

The TAR Model for calculation of Droplet/Wall Impingement

Journal of Fluids Engineering, Vol. 120, p. 593-597

YARIN A.L., WEISS D.A.(1995)

Impact of drops on solid surfaces : self-similar capillary waves, and splashing as a new type of kinematic discontinuity

Journal of Fluid Mechanics, Vol. 283, p. 141-173

ZHANG S., GOGOS G. (1991)

Film evaporation of a spherical droplet over a hot surface : fluid mechanics and heat/mass transfer analysis

J. Fluid Mechanics, Vol. 222, p. 543-563

ZUMBRUNNEN D.A., BALASUBRAMANIAN M.(1995)

Convective Heat Transfer Enhancement Due to Gas Injection Into an Impinging Liquid Jet

Journal of Heat transfer, Vol. 117, p. 1011-1017

