



HAL
open science

Modélisation et simulation numérique de la convection naturelle dans des mélanges binaires de gaz parfaits contenus dans des cavités : application à la condensation ou à évaporation surfaciques

Hua Sun

► **To cite this version:**

Hua Sun. Modélisation et simulation numérique de la convection naturelle dans des mélanges binaires de gaz parfaits contenus dans des cavités : application à la condensation ou à évaporation surfaciques. Autre. Université Paris-Est, 2010. Français. NNT : 2010PEST1091 . tel-00598321

HAL Id: tel-00598321

<https://theses.hal.science/tel-00598321v1>

Submitted on 6 Jun 2011

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

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



Université PARIS-EST
École doctorale : Sciences, Ingénierie et Environnement

THÈSE
pour obtenir le grade de
Docteur de l'Université PARIS-EST

Spécialité : Energétique et Génie des Procédés

Hua SUN

Modélisation et simulation numérique de la convection naturelle dans des mélanges binaires de gaz parfaits contenus dans des cavités. Application à la condensation ou à l'évaporation surfaciques.

Thèse dirigée par Guy LAURIAT

Soutenue le 14 décembre 2010

Membres du jury :

D. Gobin	Dir. de recherche	CNRS	Rapporteur
G. Lauriat	Professeur	Univ. Paris-Est MLV	Directeur de thèse
L. Luo	Professeur	Univ. de Savoie	Rapporteur
S. Naili	Professeur	Univ. Paris-Est Créteil	Examineur
L. Tadrist	Professeur	Polytech Marseille	Examineur
X. Nicolas	M. de conférence	Univ. Paris-Est MLV	Invité

REMERCIEMENT

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé au sein du Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Echelle (MSME UMR 8208 CNRS), à l'Université Paris-Est Marne-la-Vallée.

Je tiens à remercier tout d'abord Monsieur Guy Lauriat, professeur à l'université Paris-Est Marne-la-Vallée, pour m'avoir proposé ce sujet de thèse et pour m'avoir encadré durant mon apprentissage. Ses compétences et ses connaissances ainsi que sa rigueur scientifique m'ont été considérablement bénéfiques.

Je remercie vivement Monsieur Salah Naili, professeur à l'université Paris-Est Créteil, pour m'avoir fait l'honneur d'avoir présidé mon jury de thèse.

J'adresse mes remerciements aux rapporteurs, Madame Lingai Luo, professeur à l'université de Savoie, à Monsieur Dominique Gobin, directeur de recherche au CNRS, pour le temps qu'ils ont consacré à l'évaluation de ce travail et pour l'intérêt qu'ils ont manifesté pour celui-ci.

Je remercie aussi, Monsieur Lounes Tadrist, professeur à Polytechnique Marseille, pour m'avoir fait l'honneur d'être membre du jury.

Je suis particulièrement reconnaissant à Monsieur Gille Desrayaud, professeur à l'université de Picardie, de m'avoir encadré lors du développement de mon code de simulation. Je le remercie également pour la confiance qu'il m'a témoignée, ainsi que pour sa disponibilité.

Je souhaite aussi remercier Monsieur Xavier Nicolas, maître de conférence à l'université Paris-Est et membre du laboratoire MSME, pour l'aide qui m'a apporté sur la modélisation de la condensation et de l'évaporation.

Je remercie également Monsieur Eric Chénier, maître de conférence à l'université Paris-Est et membre du laboratoire MSME, pour le temps qu'il m'a souvent consacré lors des discussions très riches sur les problèmes techniques de programmation.

Je remercie aussi tous les doctorants et membres des laboratoires MSME (équipe TCM) pour les nombreux échanges d'informations.

Un grand merci à ma femme Hua Zhu pour son soutien du début jusqu'à la fin

de ma thèse, pour son aide et sa présence à mes côtés dans les moments les plus difficiles. Merci de m'avoir constamment encouragé et de m'avoir soulagé de toutes les tâches du quotidien. Je considère que la moitié de mon doctorat est due à ma femme.

Enfin, je remercie tous mes amis et toutes les personnes qui m'ont supportés.

Table des matières

Introduction	1
1 Equations de conservation	7
1.1 Introduction	9
1.2 Equations de Navier-Stokes et équation de l'énergie d'un fluide monoconstituant.	10
1.2.1 Equation de l'énergie en fonction de l'enthalpie par unité de masse : $h = e + p/\rho$	11
1.2.2 L'approximation de Boussinesq.	13
1.2.3 L'approximation de faible compressibilité.	16
1.3 Convection thermosolutale.	21
1.3.1 Equations de conservation des espèces	22
1.3.2 Equations de conservation du mélange	23
1.3.3 Equations de conservation pour les mélanges binaires non dilués	25
1.3.4 Convection thermosolutale d'un mélange binaire dans une cavité bidimensionnelle.	26
1.4 Conclusion	33
1.5 ANNEXES	34
1.5.1 Annexe 1 : Formulation faiblement compressible.	34
1.5.2 Annexe 2 : Flux d'interdiffusion moléculaire, effets Dufour et Soret.	41
1.5.3 Annexe 3 : Approximation de Boussinesq et forme adimensionnelle des équations de conservation.	43
1.5.4 Annexe 4 : Calculs de la pression thermodynamique et de la masse volumique adimensionnelles.	45
2 Méthode de résolution numérique	49
2.1 Introduction	49
2.2 Discrétisation des équations de conservation	51
2.2.1 Discrétisation de la forme générale des équations adimensionnées	51
2.3 Discrétisation des termes de source	56
2.3.1 Discrétisation des termes de source d'équation du mouvement	57
2.3.2 Discrétisation du terme instationnaire de pression thermodynamique dans l'équation de l'énergie	58
2.4 Discrétisation des conditions aux limites	59
2.5 Interpolation des propriétés physiques	60
2.6 Méthode d'intégration de la variation de la masse du mélange.	61
2.7 Intégration temporelle : méthode des directions alternées	61

2.7.1	Evaluation l'erreur de discrétisation temporelle.	63
2.7.2	Forme finale de l'équation discrète	64
2.7.3	Choix du pas de temps	65
2.7.4	Critère de convergence vers la solution stationnaire	65
2.8	Algorithme global de résolution des équations de conservation	66
2.9	Algorithme de couplage vitesse-pression : IDEAL	67
2.9.1	Utilisation de la méthode ADI pour résoudre l'équation de la fluctuation de pression motrice.	71
2.10	Conclusion	71
2.11	ANNEXES	73
3	Validations du code de calcul	87
3.1	Introduction	87
3.2	Cavité carrée différentiellement chauffée.	87
3.2.1	Comparaisons avec Fluent	88
3.2.2	Comparaison avec la solution de référence et étude de maillage	94
3.3	Convection instationnaire dans une cavité d'allongement $A = 8$	97
3.3.1	Description du problème	99
3.3.2	Résultats	99
3.4	Convection thermosolutale	101
3.5	Etude du nombre d'itérations internes des deux boucles de l'algo- rithme IDEAL	105
3.5.1	Stabilité et vitesse de convergence	105
3.5.2	Critère CFL sur la résolution transitoire	106
3.5.3	Choix des critères de convergence pour les deux boucles in- ternes d'IDEAL	108
3.6	Conclusion	112
4	Convection thermosolutale dans une cavité	113
4.1	Introduction	115
4.2	Modélisation	117
4.3	Résultats	121
4.3.1	Influence des conditions initiales.	121
4.3.2	Analogie transfert de chaleur et de matière.	123
4.3.3	Convection solutale : influence du rapport des masses molaires.	128
4.3.4	Convection thermosolutale.	131
4.3.5	Influence de l'allongement de la cavité.	140
4.4	Conclusion	145
5	Convection thermosolutale instationnaire associée à des change- ments de phase surfaciques.	147
5.1	Introduction	149
5.2	Modèle de condensation et d'évaporation surfacique pour un mélange binaire avec un gaz non condensable	151
5.2.1	Bilan thermique à l'interface liquide-gaz	152
5.3	Equations de conservation	152
5.3.1	Formulation générale	153
5.3.2	Forme adimensionnelle des équations de conservation : cavité rectangulaire	155

5.3.3	Flux de chaleur et de matière pariétaux	158
5.4	Résolution numérique	159
5.4.1	Algorithme de calcul des masses d'eau condensées ou évaporées.	159
5.4.2	Tests de précision des solutions numériques	162
5.5	Résultats	164
5.5.1	Variation linéaire de la température des parois.	164
5.5.2	Variations périodiques de la température des parois.	174
5.6	Influence de l'allongement : condensation	182
5.6.1	Augmentation de l'allongement et du volume de la cavité (largeur constante).	182
5.6.2	Variation de l'allongement à volume constant	189
5.7	Conclusion	190
5.8	ANNEXES	192
5.8.1	Propriétés thermophysiques	192
5.8.2	Tableaux	194
	Conclusions et Perspectives	195
	Bibliographie	199
	Publications	206

Introduction

Au cours des cinquante dernières années, les études théoriques, numériques et expérimentales portant sur la convection naturelle en milieu confiné ont été si nombreuses qu'il devient très difficile d'en faire une synthèse. Les nombreuses références bibliographiques consultées dans le cadre de la préparation de cette thèse sont donc citées dans les introductions et corps des chapitres qui constituent ce mémoire, plutôt que dans cette introduction générale.

Il semble que la communauté dont l'activité principale est orientée vers l'étude des transferts de chaleur soit la première à s'être intensivement intéressée à la convection naturelle interne. Il s'ensuit que "convection naturelle" signifie souvent "convection d'origine thermique", ce qui est effectivement l'origine dominante de la convection dans de nombreuses applications liées à notre environnement : habitat, climatologie ... Par contre, les phénomènes solutaux jouent un rôle dominant dès que deux fluides miscibles de masses volumiques différentes sont mis en contact, que ce soient des gaz (air et vapeur d'eau par exemple) ou des liquides (eau et alcool par exemple). Ce type de convection naturelle a suscité un intérêt grandissant depuis une trentaine d'année, notamment sur le plan industriel et, plus particulièrement, en métallurgie et procédés mettant en jeu des mélanges de fluides. Si les méthodes et approches développées en convection thermique ont pu être transposées à la convection solutale, il n'en demeure pas moins que le problème solutal est beaucoup plus compliqué que le problème thermique, sauf si les études sont limitées aux mélanges binaires et dans des conditions particulières. Ce qui constitue la grande majorité des travaux référencés dans les ouvrages ou publiés dans des revues dont la thématique est centrée sur les phénomènes de transport.

On peut distinguer deux grandes classes d'écoulements d'origine purement thermique ou purement solutale correspondant à l'orientation, relativement à la gravité, des gradients de température et/ou de concentration entre parois : si ce gradient est horizontal, la cavité est dite verticale ; elle est dite horizontales si le gradient est colinéaire à la gravité. Les conditions aux limites les plus simples à modéliser correspondent à des températures et concentrations uniformes sur deux parois opposées, les autres parois étant supposées adiabatiques et imperméables. Notons que si cette extrême simplicité des conditions aux limites a le mérite de réduire le nombre de paramètres décrivant les transferts, elle ne conduit pas nécessairement à des configurations d'écoulement plus simples à analyser physiquement : elles correspondent le plus souvent à des effets maximums des forces de volume (sauf si les gradients sont dans le même sens que l'accélération gravitationnelle).

La première différence entre les cas horizontaux et verticaux est que le fluide peut

rester immobile dans le premier cas, alors qu'il y a (presque) toujours une circulation dans le second cas, même lorsque gradients de température ou de concentration sont infimes, l'exception se rencontre lorsque que les gradients horizontaux de température et de concentration (convection thermosolutale) sont en sens inverses et pour des conditions très particulières conduisant à une force motrice nulle : nombres de Prandtl et de Schmidt égaux (ou nombre de Lewis unité), mêmes conditions aux limites adimensionnelles. Les nombres de travaux consacrés aux cavités horizontale ou verticale sont probablement aussi importants. Entre ces deux cas, les configurations inclinées ont aussi été beaucoup étudiées. Une faible inclinaison par rapport à l'horizontale ou par rapport à la verticale ne modifie pas sensiblement les résultats mais la transition d'un mode de circulation à l'autre peut présenter un caractère tridimensionnel, ce qui est trop souvent ignoré.

Il faut aussi différencier la convection naturelle selon la nature du fluide : gaz, liquides ordinaires ou métaux liquides. Le cas des gaz est, à priori, le plus facile à traiter pour au moins trois raisons : les lois rhéologiques sont généralement simples (fluides newtoniens), les lois d'état sont mieux connues et les propriétés physiques sont mieux définies, notamment si l'approximation des gaz parfaits est employée (loi de Sutherland par exemple). Notons cependant que les phénomènes intervenant au voisinage du point critique sont beaucoup plus complexes. Le problème principal vient de leurs compressibilité et dilatation élevées. Cette propriété ne soulève pas de difficulté particulière en convection forcée lorsque la différence maximale de pression statique régnant dans le champ de l'écoulement est très petite devant la pression absolue (ou encore pour des nombres de Mach inférieurs à $Ma \approx 0,3$). Elle pose de réels problèmes pour la convection naturelle dans des systèmes fermés parce que les variations de masse volumique dépendent non seulement de la pression absolue (la pression statique ne jouant qu'un rôle marginal) mais aussi des variations de température, et de composition s'il s'agit d'un mélange de gaz.

La convection naturelle étant créée par des variations de masse volumique (selon la définition usuelle), un modèle compressible devrait donc être systématiquement utilisé pour traiter les écoulements de gaz. Cependant, lorsque les vitesses d'un écoulement sont faibles, les variations de masse volumique intervenant dans les termes d'advection et de transport peuvent être négligées alors que la masse volumique ne peut évidemment pas être supposée constante dans le terme moteur (force de volume). Cette supposition est à la base de l'approximation de Boussinesq, presque toujours introduite dans les études numériques et théoriques se rapportant à la convection naturelle en cavité. Au cours des dernières années, l'approximation de Boussinesq, généralement considérée comme justifiée lorsque les écarts maximums de température ne dépassent pas 10% de la température de référence d'un gaz, a été reconsidérée dans le cas de grands écarts de température en se basant sur la méthode des développements asymptotiques et sur la loi des gaz parfaits. Par contre, cette approximation ne semble jamais avoir été mise en cause dans le cas de la convection solutale. Implicitement adoptée dans le cas des mélanges dilués, c'est à dire lorsque la masse volumique partielle de l'un des constituants est très largement dominante, elle demande à être reconsidérée dans de nombreuses situations rencontrées dans des systèmes fermés parce que la diffusion d'une espèce gazeuse n'est limitée que par la pression de saturation. Cette pression peut être de l'ordre de la pression absolue du

gaz porteur, sans que les écarts de température soient très importants. En outre, contrairement au flux de conduction thermique (loi de Fourier) , le flux de matière (loi de Fick) dépend explicitement de la masse volumique du mélange.

Cette thèse s'inscrit dans cet axe de recherches. En nous limitant à la convection thermosolutale dans des mélanges de gaz parfaits, nous proposons une version faiblement compressible (ou modèle à faible nombre de Mach) adaptée au cas des mélanges binaires non dilués. Après une étude paramétrique basée sur la forme adimensionnelle des équations de conservation pour des écoulements laminaires dans une cavité verticale bidimensionnelle, nous appliquons le modèle au cas de la convection naturelle instationnaire d'air humide avec condensation de vapeur d'eau sur les parois ou évaporation d'eau liquide dans une cavité bidimensionnelle. Ces changements d'état sont provoqués par les variations temporelles des températures des quatre parois.

Ce mémoire de thèse comporte cinq chapitres suivis d'une Conclusion et d'une Annexe dans laquelle est présentée une étude complémentaire réalisée au cours de la dernière année de la préparation de la thèse. Cette étude, effectuée en utilisant un logiciel commercialisé, est reportée en annexe parce que son objectif est très différent de l'objectif principal de ce mémoire. Chacun des chapitres comporte une introduction dans laquelle sont cités les principaux travaux se rapportant au corps du chapitre et une conclusion succincte.

Le modèle original développé au cours de la préparation de cette thèse est présenté en détail dans le chapitre I qui comporte quatre annexes, dans lesquelles sont rappelés ou développés des calculs non-utiles à la compréhension de la démarche suivie. Partant des équations de conservation générales gouvernant la convection naturelle d'un fluide newtonien monoconstituant, nous établissons d'abord le modèle faiblement compressible en discutant l'origine des approximations introduites. Ces approximations portant essentiellement sur l'équation de l'énergie appliquée à un gaz parfait, il convient de partir de la conservation de l'énergie totale afin de les justifier le plus rationnellement possible. Nous considérons ensuite des mélanges de gaz parfaits puis nous nous limitons au cas de mélanges binaires non dilués. Nous obtenons alors toutes les équations adimensionnelles de la formulation faiblement compressible pour des écoulements de convection naturelle en cavités. Ces équations seront traitées numériquement. On montre aussi comment cette modélisation dégénère en celle du fluide de Boussinesq dans le cas de mélanges binaires dilués soumis à de faibles écarts de température.

La méthode de résolution numérique utilisée est décrite dans le chapitre II. S'agissant d'une discrétisation des équations de conservation basée sur la méthode des volumes finis mise en oeuvre sur des maillages structurés et décalés, l'originalité de ce chapitre ne concerne que notre apport à l'amélioration de l'une des versions d'un code de calcul existant au laboratoire. Ce code, utilisé pour résoudre une large variété de problèmes se rapportant à la convection naturelle en cavités ou à la convection mixte dans des conduites verticales, a été largement éprouvé depuis plus d'une dizaine d'années. Il nous paraît cependant nécessaire de rédiger le plus complètement possible la mise à jour de l'algorithme que nous avons effectuée en vue de futurs

développements et utilisations. Cette nouvelle version repose sur deux contributions :

- l'implémentation de la formulation faiblement compressible dans un code basé sur l'approximation d'incompressibilité mais en utilisant toujours une approche de type vitesse-pression,
- l'implémentation d'un nouvel algorithme de calcul du couplage vitesse-pression qui améliore sensiblement la conservation de la masse. Compte-tenu de la modélisation instationnaire présentée dans le premier chapitre, assurer la conservation de la masse avec une précision proche du zéro-machine à chaque pas de temps est en effet essentiel. A cette fin, nous avons programmé et adapté un nouvel algorithme, IDEAL, proposé par D.L. Sun et al., 2008 et 2009 [73] à [76] pour des écoulement incompressibles stationnaires. Son efficacité est discutée dans le chapitre III.

La lecture détaillée de ce chapitre "technique" n'est pas nécessaire à la compréhension des résultats présentés dans les chapitre IV et V. Il a pour fonction principale de donner toutes les clés permettant une reprogrammation complète de l'algorithme dans un langage différent et/ou sur d'autres types de machines que celles que nous avons utilisées (calculs séquentiels ou vectoriels).

Des tests de validation du modèle et de l'algorithme IDEAL sont présentés dans le chapitre III. En ce qui concerne le modèle, seule la version "thermique" a pu être validée par comparaisons à des solutions de référence, la version "thermosolutale" étant entièrement originale. Dans ce cas, nous nous sommes limités à montrer que le code de calcul permettait de prédire le passage d'un état thermodynamique "1" à un état "2", caractérisés par des masses de gaz, des pressions, des températures et des fractions massiques différentes. En plus de comparaisons avec des solutions de référence, nous discutons une confrontation des résultats fournis par le code avec des solutions que nous avons calculées en utilisant un code de calcul commercialisé (Fluent).

La convection thermosolutale d'un mélange binaire non-dilué est abordée dans le chapitre IV. Elle est limitée à une seule configuration : cavités verticales différentiellement chauffées dont les parois verticales sont aussi soumises à des distributions de fraction massique uniformes de l'un des constituants, le gaz porteur restant inerte (sa masse restant constante). Ce chapitre peut être considéré comme une étape préliminaire à l'étude présentée dans le chapitre suivant. Comme l'adimensionnalisation du problème n'est pas unique, nous introduisons succinctement le système adimensionnel résolu dans cette partie. Compte-tenu du nombre de paramètres intervenant dans le problème (10), le nombre de cas possibles est théoriquement quasiment illimité alors que le nombre de mélanges binaires de gaz réels couvrant le domaine de variations des paramètres est beaucoup plus limité. Nous nous sommes donc concentrés sur les influences de quelques paramètres. Ce choix peut apparaître arbitraire et demanderait certainement quelques compléments. Cependant, nous pensons que nous atteignons ici la limite de l'intérêt d'une formulation adimensionnelle lorsque l'on tient compte des variations de masse volumique d'un mélange binaire. L'originalité principale des résultats présentés dans ce chapitre réside dans la mise en évidence des effets hors-Boussinesq dans le cas non dilué.

Les transferts de chaleur et de matière associés à la condensation ou à l'évaporation surfacique d'air humide dans une cavité dont la température des parois évolue au cours du temps est considérée dans le chapitre V, qui constitue l'aboutissement du travail de thèse. La problématique est simple : il s'agit de modéliser la convection naturelle instationnaire dans une cavité remplie d'air humide.

- Si les parois sèches sont progressivement refroidies en dessous de la température de rosée, la vapeur d'eau se condense sur les parois jusqu'à ce que la pression de vapeur d'eau dans la cavité atteigne la pression de vapeur saturante.
- Si les parois recouvertes par un film d'eau sont progressivement chauffées au dessus de la température de rosée correspondant à la pression de saturation, une partie ou toute l'eau liquide s'évapore.

En combinant ces deux types d'évolution de la température des parois, refroidissement puis chauffage (ou l'inverse), on peut obtenir, ce qui est le plus simple à analyser, un écoulement périodique caractérisé par des augmentations, suivies de diminutions, de pression et de masse totale de l'air humide contenue dans la cavité. Si les évolutions des températures des parois sont choisies de telle sorte que le système passe périodiquement entre deux états thermodynamiques bien définis, nous avons des repères qui nous permettent de vérifier la qualité des solutions numériques correspondant à ces deux états.

Par rapport aux situations considérées dans le chapitre précédent, la variété des solutions envisageables est considérablement augmentée parce qu'il est absolument indispensable de tenir compte des variations des propriétés physiques du mélange avec sa température et sa composition. Les relations utilisées pour calculer les propriétés physiques en fonction de la fraction massique de vapeur d'eau, de la température et, éventuellement, de la pression sont données dans une annexe.

La formulation du problème étant légèrement différente de celle employée au chapitre IV, en particulier parce qu'il faut tenir compte de la pression de saturation et parce que les conditions aux limites varient au cours du temps (les parois pouvant être humides ou sèches, chaudes ou froides) nous redonnons les équations de conservation et leur forme adimensionnelle. Nous expliquons aussi l'algorithme de calcul des masses d'eau condensées ou évaporées et donnons quelques tests de précision des solutions numériques. En ce qui concerne l'air humide, il est habituel de raisonner en termes d'humidité relative. Nous présentons donc des champs de fraction massique de vapeur d'eau et d'humidité relative instationnaires correspondant aux diverses situations étudiées.

Après une Conclusion générale, nous présentons dans une Annexe les résultats de calculs que nous avons effectués dans le but de montrer l'influence des échanges par rayonnement entre surfaces dans une configuration particulière, celle retenue dans une étude expérimentale récente. S'agissant d'air supposé sec et de très faibles écarts de température dans le cas d'une cavité de petite dimensions contenant une source de chaleur localisée en son centre, l'approximation de Boussinesq est parfaitement justifiée. Compte-tenu de la géométrie considérée, le calcul des échanges par rayonnement nécessiterait le développement d'un algorithme spécifique. Nous avons donc opté de faire des calculs avec un code de calcul commercialisé (Fluent), que nous pensons suffisamment bien maîtriser pour traiter cette configuration, et qui a été

employé dans une thèse soutenue récemment au laboratoire (Laaroussi, 2008 [39]). Dans le contexte actuel, les résultats obtenus peuvent être considérés comme nouveaux.

Chapitre 1

Equations de conservation

Nomenclature

a	diffusivité thermique [$m^2 s^{-1}$]
A	allongement, $A = H/L$
C_p	chaleur spécifique [$J K^{-1} kg^{-1}$]
D_{av}	coefficient de diffusion massique [$m^2 s^{-1}$]
Fr	nombre de Froude, $Fr = a_0^2/gL^3$
g	accélération gravitationnelle [$m s^{-2}$]
h	enthalpie [$J kg^{-1}$]
h_{lv}	enthalpie de changement d'état liquide-vapeur [$J kg^{-1}$]
H	hauteur de la cavité [m]
H_g	chaleur latente adimensionnelle, $H_g = h_{lv}/C_{p0}\Delta T$
HR	humidité relative [%]
\bar{I}	tenseur unité
\mathbf{J}	vecteur densité de flux massique [$kg m^{-2} s^{-1}$]
k	conductivité thermique [$W m^{-1} K^{-1}$]
L	largeur de la cavité [m]
Le	nombre de Lewis, $Le = a_0/D_{av,0}$
m	masse du mélange [kg]
\dot{m}	flux massique [$kg s^{-1}$]
M	masse molaire [$kg/kmol$]
M^*	rapport des masses molaires, $M^* = M_v/M_a$
\mathbf{n}	vecteur unitaire à dS
Nu	nombre de Nusselt local (Eq. 1.117)
N_x, N_y	nombres de points du maillage dans les directions x - et y -
p'_m	partie fluctuante de la pression motrice [Pa]
\bar{P}	pression thermodynamique [Pa]
$P_{v,sat}$	pression de vapeur à saturation [Pa]
Pr	nombre de Prandtl de l'air humide dans les conditions initiales $Pr = \mu_0/\rho_0 a_0$
R	constante universelle des gaz parfaits, $R = 8.315 kJ kmol^{-1}$
Ra_m	nombre de Rayleigh solutal, $Ra_m = \rho_0 g \beta_m \Delta W L^3 / a_0 \mu_0$
Ra_T	nombre de Rayleigh thermique, $Ra_T = \rho_0 g \beta_T \Delta T L^3 / a_0 \mu_0$
Sc	nombre de Schmidt, $Sc = \mu_0 / \rho_0 D_{av,0}$
Sh	nombre de Sherwood local (Eq. 1.118)

t	temps [s]
T	température [K]
$\mathbf{V} = (u, v)$	vecteur vitesse [$m s^{-1}$]
W	fraction massique
(x, y)	coordonnées cartésiennes [m]

Symboles grecques

β_m	coefficient d'expansion massique
β_T	coefficient d'expansion thermique, $\beta_T = 1/T_0$ [K^{-1}]
Δm_v	variation de la masse de vapeur dans la cavité [kg]
ΔT	différence de température, $\Delta T = (T_{w,max} - T_{w,min})$ [K]
ΔW	différence de fraction massique
ϵ_m	paramètre hors-Boussineq massique, $\epsilon_m = 1/M^* - 1$
ϵ_T	paramètre hors-Boussineq thermique, $\epsilon_T = \Delta T/T_0$
γ	rapport des chaleurs spécifiques, $\gamma = C_p/C_v$
μ	viscosité dynamique de l'air humide [$N m^{-1} s^{-1}$]
ν	viscosité cinématique de l'air humide [$m^2 s^{-1}$]
Ω	volume de la cavité [m^3/m]
Ψ	fonction de courant
ρ	masse volumique [$kg m^{-3}$]
τ	temps adimensionnel, $\tau = a_0 t/L^2$
$\overline{\tau}$	tenseur des contraintes visqueuse
θ	rapport d'écart de température (température adimensionnelle) $\theta = (T - T_0)/\Delta T$

Indices

a	air sec
adv	advection
$diff$	diffusion
l	eau liquide
m	mélange
v	vapeur d'eau
w	paroi
0	quantité définie à l'instant initial
∞	état stationnaire

Exposants

—	grandeur moyenne
*	grandeur adimensionnelle

1.1 Introduction

Les équations de conservation et les hypothèses simplificatrices introduites dans le cadre de ce travail de thèse sont présentées et discutées dans ce chapitre. On écrit d’abord les équations sous leur forme générale pour les écoulements de convection naturelle, mais restreintes aux fluides newtoniens en milieux confinés. On considère les équations du mouvement et de l’énergie puis l’équation de conservation de l’une des espèces, l’étude étant ensuite limitée aux mélanges binaires.

Le formalisme des équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement ne poserait pas de problème si aucune hypothèse sur la compressibilité du fluide n’était introduite. La difficulté résiderait alors dans la résolution de l’équation de l’énergie qui contient des termes de propagation acoustique dont les vitesses caractéristiques sont très supérieures à celle de l’écoulement du fluide. Si cet aspect ne semble pas poser de problèmes fondamentaux, il en pose du point de vue numérique, notamment si des algorithmes de calcul efficaces et bien adaptés aux écoulements incompressibles, sont transposés aux écoulements à faible vitesse mais à masse volumique variable.

En ce qui concerne la convection naturelle, un débat entamé depuis plus de cinquante ans, porte sur le domaine de validité de l’approximation de Boussinesq (1903) [10] qui règle, de façon que l’on pourrait juger comme cavalière dans le cas des gaz, le problème des variations spatio-temporelles de la masse volumique : elle ne varie que dans le terme de poussée d’Archimède et elle est constante dans les autres termes des équations de transport (quand elle y intervient).

Pour un gaz parfait, la masse volumique ne dépend que de la température et de la pression : donc si la pression peut être supposée comme quasi-constante (systèmes ouverts dans lesquels la pression motrice est très faible), on peut se soustraire aisément de l’approximation de Boussinesq en écrivant $\rho = \rho(T)$ dans tous les termes. Dans les systèmes fermés, ρ dépend automatiquement de P et de T . Il y a donc nécessairement des phénomènes acoustiques. On se place dans le cadre de l’hypothèse où ils sont marginaux parce que les vitesses des écoulements considérés sont faibles (on suppose donc que la convection naturelle n’est pas bruyante). Il n’en demeure pas moins qu’il faut calculer $\rho = \rho(P, T)$, donc introduire l’équation d’état du gaz dans le système d’équations.

Pour les écoulements thermosolutaux, la masse volumique du mélange dépend aussi des distributions de fraction massique, W_i , des N constituants et donc $\rho = \rho(P, T, W_i)$ ($i = 1 \dots N$). Cela devient donc très compliqué, sauf si les fractions massiques (ou bien les concentrations) de $N - 1$ constituants sont très faibles devant celle du N^{ieme} : ce sont les mélanges que l’on appelle ”dilués”, ce qui signifie que la fraction massique de l’un des constituants (le fluide ”porteur”) est très largement dominante.

Dans ce chapitre, et ses annexes, nous présentons, en partant d’un formalisme assez général, les étapes qui nous ont conduit à établir les systèmes d’équations qui ont été effectivement résolus.

1.2 Equations de Navier-Stokes et équation de l'énergie d'un fluide monoconstituant.

Les équations de bilan, basées sur des lois de comportement phénoménologiques, décrivent la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale. Ces équations générales décrivent tout type d'écoulement de fluides et, pour les gaz, du début de la raréfaction (caractérisée par le nombre de Knudsen) aux écoulements hypersoniques (dans la limite d'une vitesse caractéristique de l'ordre de 15 fois la vitesse du son). Elles décrivent les régimes laminaires, chaotiques ou turbulents. Elles s'écrivent sous forme conservative :

Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (kg/m^3 \ s) \quad (1.1)$$

Equation de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial(\rho \vec{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \otimes \vec{V}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho \vec{g} \quad (Pa/m) \quad (1.2)$$

$\bar{\tau}$ est le tenseur des contraintes visqueuses. Dans le cas d'un fluide Newtonien et en admettant l'hypothèse de Stokes, il s'écrit :

$$\bar{\tau} = \mu[\nabla \vec{V} + (\nabla \vec{V})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{V})\bar{I}] \quad (Pa)$$

Equation de conservation de l'énergie totale :

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{1}{2} V^2 \right) = -\nabla \cdot \vec{q} + \nabla \cdot (\vec{V} \cdot \bar{\tau}) + \rho \vec{V} \cdot \vec{g} \quad (W/m^3) \quad (1.3)$$

dans laquelle la production volumique de chaleur due à des effets autres que le travail des forces intervenant dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement n'a pas été prise en compte. On reviendra sur cette question dans la suite. La densité de flux de chaleur est donnée par la loi de Fourier, $\vec{q} = -k \nabla T$.

Ecrites sous leur forme compressible, les équations de conservation sont difficiles à traiter numériquement, même si la vitesse du fluide est faible (convection naturelle ou convection mixte). Deux principaux types de simplifications ont été introduits mais font l'objet de nombreuses controverses depuis plusieurs années lorsque le fluide est un gaz : l'approximation d'Oberbeck (1979) [56] ou de Boussinesq (1903) [10] et l'approximation à faible nombre de Mach (ou de faible compressibilité), dont le formalisme le plus élaboré semble être dû à Paolucci (1982) [57]. Il s'ensuit que la tendance actuelle consiste à rechercher de nouveaux algorithmes de calcul permettant de traiter l'équation de l'énergie sous sa forme générale, sans négliger aucun terme (Barrios-Pina, 2010 [2]). Cependant, cette équation semble mieux se prêter à un traitement numérique si elle est écrite sous la forme d'une équation de conservation de l'énergie interne, e . Notons ici que l'approximation de faible compressibilité conduit à écrire les équations de Navier-Stokes sous leur forme compressible et que les controverses ne portent donc que sur la prise en compte ou non des termes négligés dans l'équation de l'énergie.

Le système d'équations 1.1- 1.3 est incomplet puisqu'il comporte 5 inconnues (ρ , \vec{V} , p , e et T). Il doit donc être complété par l'équation d'état, $\rho = f(T, p)$ pour un fluide monoconstituant, et une relation reliant l'énergie interne à la température. Dans ce travail de thèse, nous ne considérons que des gaz ou des mélanges de gaz parfaits. L'équation d'état est donc :

$$p = \rho \frac{R}{M} T \quad (1.4)$$

où $R = 8,3145 \text{ J/mol K}$ est la constante des gaz parfaits et M , en kg/mol , est la masse molaire du gaz ou celle du mélange.

Le terme d'énergie cinétique peut être retiré de l'équation de l'énergie totale en lui soustrayant l'équation de conservation de l'énergie mécanique, produit scalaire de l'équation de conservation de la quantité de mouvement par le vecteur vitesse. On obtient (Lauriat (2009) [43]) :

$$\rho \frac{De}{Dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) - p \nabla \cdot \vec{V} + \nabla \vec{V} : \bar{\tau} \quad (W/m^3) \quad (1.5)$$

où :

- le terme du membre de gauche représente le taux de variation de l'énergie interne par unité de volume (au sens thermodynamique),
- les termes des membres de droite représentent successivement :
 - . - l'apport de chaleur par conduction (irréversible),
 - . - la puissance apportée par le travail des forces de pression (réversible),
 - . - la puissance apportée par le travail des forces de viscosité : cette dissipation de chaleur, notée $\nabla \vec{V} : \bar{\tau} = \mu \phi_v$ pour un fluide newtonien, est irréversible.

NOTE : Cette forme de l'équation de l'énergie ne permet pas d'évaluer le travail des forces d'Archimède : s'il y a controverse au sujet de l'importance de ce terme, il faut revenir à l'équation de conservation de l'énergie totale.

1.2.1 Equation de l'énergie en fonction de l'enthalpie par unité de masse :

$$\mathfrak{h} = e + p/\rho.$$

Pour relier l'énergie interne à la température, on introduit d'abord l'expression de l'équation de l'énergie en fonction de l'enthalpie par unité de masse, $\mathfrak{h} = e + p/\rho$. \mathfrak{h} n'étant fonction que de p et de T , on peut écrire

$$\frac{D\mathfrak{h}}{Dt} = \frac{De}{Dt} + p \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} \quad (1.6)$$

ou

$$\frac{De}{Dt} + p \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = \frac{D\mathfrak{h}}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} \quad (1.7)$$

d'où la forme de l'équation de l'énergie en fonction de \mathfrak{h} :

$$\rho \frac{D\mathfrak{h}}{Dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \frac{Dp}{Dt} + \nabla \vec{V} : \bar{\tau} \quad (1.8)$$

A partir de cette forme, on en déduit l'équation de l'énergie en fonction de la température pour un écoulement isovolume ($\rho = cste$) ou incompressible ($\nabla \cdot \vec{V} = 0$); de même, dans le cas des écoulements isobares.

Pour un écoulement **compressible**, h n'est fonction que de p et de T . Par conséquent :

$$\frac{Dh}{Dt} = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right) \frac{DT}{Dt} + \left(\frac{\partial h}{\partial p} \right) \frac{Dp}{Dt} \quad (1.9)$$

Par définition :

$$\left. \frac{\partial h}{\partial T} \right|_p = C_p \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial h}{\partial p} \right|_T = \frac{1}{\rho}(1 - \beta T) \quad \text{avec} \quad \beta = - \left. \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_p \quad (1.10)$$

D'où

$$\frac{Dh}{Dt} = C_p \frac{DT}{Dt} + \frac{1}{\rho}(1 - \beta T) \frac{Dp}{Dt} \quad (1.11)$$

En reportant 1.11 dans 1.8, on en déduit la forme de l'équation de l'énergie en fonction de la température

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \beta T \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot \vec{V} : \bar{\tau} \quad (1.12)$$

Cette forme de l'équation de l'énergie présente l'avantage de faire intervenir la chaleur massique à pression constante, C_p , quantité beaucoup plus facilement mesurable que C_v . Comme le montre l'équation 1.11, cette expression reste valable lorsque C_p dépend de la température.

Le terme $\beta T (Dp/Dt)$, qui représente le travail des forces de pression, peut être positif (compression) ou négatif (expansion) : un fluide s'échauffe s'il est comprimé et il se refroidit s'il se détend.

Le terme de dissipation visqueuse $\nabla \cdot \vec{V} : \bar{\tau}$ est toujours positif.

- Gaz parfaits :

Pour les gaz parfaits, l'enthalpie et l'énergie interne ne sont fonction que **de la température** (résultat de la théorie cinétique des gaz) et les chaleurs spécifiques C_p et C_v sont aussi uniquement fonction de T . De plus, la différence $C_p - C_v = R$ ne dépend pas de T et

$$e = \int C_v(T) dT + \text{constante} \quad \text{et} \quad h = \int C_p(T) dT + \text{constante} \quad (1.13)$$

On déduit de la loi des gaz parfaits que $\beta = 1/T$ et donc que

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \frac{Dp}{Dt} + \mu \phi_v \quad (1.14)$$

car tous les gaz parfaits peuvent être considérés comme des fluides newtoniens, sauf dans des conditions très particulières (taux de cisaillement extrêmes par exemple). En régime permanent, l'équation de l'énergie se réduit à

$$\rho C_p \nabla \cdot (\vec{V} T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + p \nabla \cdot \vec{V} + \mu \phi_v \quad (1.15)$$

où l'équation de continuité a été utilisée pour exprimer le travail des forces de pression sous la forme $p \nabla \cdot \vec{V}$, ce qui montre que ce travail est toujours nul pour un écoulement incompressible. Il est à souligner que le travail des forces de volume, $\vec{f}_v \cdot \vec{V}$, n'apparaît que dans l'équation de conservation de l'énergie totale, ce qui signifie que si ce terme est considéré comme important (Pons et Le Quéré (2005a, 2005b, 2007) [65], [66], [67], Barrios-Pina (2010) [2]), il conviendrait de revenir à l'équation 1.3 pour en mesurer l'importance.

1.2.2 L'approximation de Boussinesq.

L'approximation de Boussinesq consiste à introduire l'hypothèse d'incompressibilité pour les écoulements à faible variation de masse volumique. Le postulat fondamental est que les variations de masse volumique par rapport à une masse volumique de référence ne sont importantes que dans le terme d'Archimède de l'équation du mouvement (c'est à dire dans le terme $\rho \vec{g}$ de l'équation 1.2). Ce postulat implique d'autres conséquences qui seront abordées dans la suite. La discussion ne porte d'abord que sur la convection naturelle d'origine purement thermique, cas formellement plus simple que celui de la convection solutale. Elle ne porte aussi que sur les gaz parfaits.

1.2.2.1 La pression motrice

La pression intervenant dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement est la pression statique qui représente la pression mesurée par une sonde se déplaçant à la vitesse de la particule fluide. Introduisons la force d'Archimède locale définie à partir d'une masse volumique de référence ρ_r par

$$\vec{A} = (\rho(T) - \rho_r) \vec{g} \quad (1.16)$$

Le champ de pression hydrostatique, $p_h(z)$, dans un fluide immobile dans lequel la masse volumique locale est $\rho_r(z)$ vérifie la condition

$$\nabla p_h = \rho_r(z) \vec{g} \quad (1.17)$$

Si le fluide est en écoulement, $p \neq p_h$. On peut écrire

$$\rho \vec{g} - \nabla p = (\rho - \rho_r(z)) \vec{g} - (\nabla p - \nabla p_h) = \vec{A} - \nabla(p - p_h) \quad (1.18)$$

où $p_m = p - p_h$ est appelée "pression motrice". Il en résulte que l'équation de quantité de mouvement peut toujours s'écrire sous la forme :

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla p_m + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + (\rho - \rho_r) \vec{g} \quad (1.19)$$

Comme $\rho = f(p, T)$, l'écart $(\rho - \rho_r)$ peut être développé en fonction de $(T - T_r)$ et de $(p - p_h)$. Soit

$$\begin{aligned}
(\rho - \rho_r) &= \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p (T - T_r) + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial T^2} \right)_p (T - T_r)^2 + \dots \\
&+ \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T (p - p_h) + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial p^2} \right)_T (p - p_h)^2 + \dots \\
&+ \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial p \partial T} \right)_T (p - p_h)(T - T_r) + \dots
\end{aligned} \tag{1.20}$$

On montre que si la pression motrice est égale $p_m = g(\rho_r - \rho)H$ à une certaine hauteur H , on a [22] :

$$\frac{(\rho_r - \rho)}{\rho} \left[1 - \frac{g\beta_r H}{R/M} [1 + \beta_r(T - T_r)] \right] = \frac{\beta_r(T - T_r)}{1 - \beta_r(T - T_r)} + \dots \tag{1.21}$$

L'approximation linéaire

$$(\rho_r - \rho) \approx \rho_r \beta_r (T - T_r) \tag{1.22}$$

n'est donc admissible que si

$$C_1 = \frac{g\beta_r H}{R/M} [1 + \beta_r(T - T_r)] \ll 1 \quad \text{et} \quad C_2 = \beta_r(T - T_r) \ll 1 \tag{1.23}$$

La condition $C_2 \ll 1$ est, en général, plus restrictive que la condition $C_1 \ll 1$. C'est sous cette forme que l'une des approximations de Boussinesq est la plus souvent énoncée en prenant comme critère $C_2 \leq 0, 1$.

En conclusion, la force d'Archimède peut s'écrire en fonction de la température sous la forme linéaire :

$$\vec{A} = (\rho(T) - \rho_r) \vec{g} \approx -\rho_r \beta_r (T - T_r) \vec{g} \tag{1.24}$$

si $\Delta T/T_r \leq 0, 1$.

Dans le cas de la convection naturelle en cavité différentiellement chauffée, le choix de la masse volumique et de la température de référence n'est pas aussi simple qu'il pourrait paraître. Si l'on ne considère que le régime stationnaire, la température de référence est $T_r = (T_c + T_f)/2$, où T_c et T_f sont les températures des parois chaude et froide. C'est à cette température, équivalente à la température de film utilisée dans le cas de la convection naturelle le long d'une paroi verticale, que doivent être évaluées les propriétés physiques du fluide si elles sont supposées constantes. Par contre, il n'y a pas fondamentalement de raison de choisir cette température pour calculer la masse volumique de référence. Dans un système fermé, la masse totale étant constante les conditions thermodynamiques correspondant au calcul de la masse du gaz doivent être celles retenues pour définir la masse volumique de référence. Il en résulte que si la masse de gaz est calculée à une pression P_0 et à une température T_0 (totalement indépendante de T_r) la masse volumique de référence est ρ_0 .

1.2.2.2 Autres simplifications

Les hypothèses permettant de négliger les effets de la pression motrice sur les variations de masse volumique impliquent que d'autres simplifications peuvent être introduites dans les équations de conservation de la masse et de l'énergie. Cette question est discutée en détail dans l'ouvrage de Gebhart et al. (1988) [22] où des analyses d'ordre de grandeur permettent de justifier les résultats essentiels résumés ici.

1.2.2.2.1 Equation de continuité. L'équation de continuité écrite sous la forme :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (1.25)$$

montre que négliger les effets de la pression sur ρ n'implique pas $\nabla \cdot \vec{V} = 0$ en régime stationnaire. Cette équation ne peut être satisfaite que si

$$\left(\frac{\nabla \rho}{\rho} \right) \ll \left(\frac{\nabla \cdot \vec{V}}{\vec{V}} \right) \quad (1.26)$$

Une analyse d'ordre de grandeur montre que cette condition est toujours satisfaite si le gradient vertical de température n'est pas trop important. L'équation de continuité peut donc s'écrire

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (1.27)$$

si $\Delta \rho / \rho_r \ll 1$.

1.2.2.2.2 Equation de l'énergie. L'équation de l'énergie contient deux termes sources dus aux gradients de pression et à la dissipation visqueuse, dont l'importance dépend des variations de masse volumique et de la vitesse du fluide.

La comparaison des ordres de grandeur des termes convectifs ($\nabla \cdot (\vec{V} T)$) et de compressibilité (DP/Dt) montre que le travail des forces de pression est négligeable si les variations de masse volumique ne dépendent que de la température ($C_2 \ll 1$)

En comparant le terme de production de chaleur dû au travail des forces de viscosité à la diffusion thermique ($\nabla \cdot (k \nabla T)$), on montre que son influence est marginale, quelle que soit la valeur du nombre de Prandtl. On montre aussi qu'il est toujours très inférieur au terme de compressibilité si $C_1 \ll 1$.

En conclusion, la condition $\Delta \rho / \rho_r \ll 1$ implique que l'équation de l'énergie peut se réduire à :

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (1.28)$$

Approximation de Boussinesq

La grande majorité des solutions analytiques approchées et des simulations numériques

présentées jusqu'à ce jour ont été basées sur les hypothèses de Boussinesq (1903) [10], dont les fondements ont été rappelés ci-dessus. On évoque, en général, "l'approximation de Boussinesq" qui peut se résumer sous la forme suivante :

Dans un fluide pur, la masse volumique peut être supposée constante sauf dans le terme de poussée d'Archimède lorsque les écarts de température ne conduisent pas à de fortes variations de la pression motrice. Dans ces conditions, $\rho \vec{g} = \rho(T) \vec{g}$ et $\rho = \rho(T_0)$ dans tous les autres termes, T_0 étant une température de référence pour la masse volumique.

Pour un fluide **pur** de comportement rhéologique newtonien, l'approximation de Boussinesq permet ainsi de ramener le système d'équations de conservation à la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{V} = 0 \\ \rho_0 \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla p_m + \nabla \cdot (\mu[\nabla \vec{V} + (\nabla \vec{V})^T]) + \rho_0[\beta_0(T - T_0)] \vec{g} \\ \rho_0 C_p \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \bar{\omega} \\ + \text{conditions aux limites} \end{array} \right. \quad (1.29)$$

où μ , C_p et k peuvent dépendre de la température.

1.2.3 L'approximation de faible compressibilité.

Comme mentionné précédemment, l'approximation de Boussinesq a suscité de nombreuses controverses. Les analyses d'ordre de grandeur ne donnent qu'une indication sur ses conditions de validité. Par exemple, il était admis, jusqu'à une période assez récente, qu'une différence de température ΔT inférieure à 10% de la température de référence permettait de l'utiliser et que les travaux des forces de pression étaient alors négligeables, et donc les travaux des forces visqueuses. Cependant, la question de la validité de l'approximation de Boussinesq, notamment dans le cas de systèmes fermés, a suscité plusieurs travaux depuis une cinquantaine d'année. On citera Spiegel and Veronis (1960) [72], Mihaljan (1962) [55], Rubel and Landis (1970) [70], Gebhart (1971) [21], Gray and Giorgini (1976) [25], Paolucci (1982) [57]...

L'article de Gray et Giorgini (1976) [25] a apporté un autre éclairage sur cette approximation en affirmant en particulier que sa limite de validité pour l'air serait $\Delta T < 28,6 K$. Ce travail est probablement à l'origine de la théorie développée par Paolucci (1982) [57] qui est maintenant remise en question dans un certain nombre de travaux. Par exemple, Rey (2000) [68] donne comme limites du domaine d'application $\Delta T/T_0 < 0,01$ et $Ma = 0,142$ ou même $Ma = 0,0027$ (Pavageau et Rey, 2002 [62]). La limite sur le nombre de Mach n'est, en pratique, pas significative pour les écoulements internes parce que les nombres de Mach sont toujours très petits. De plus, Pons et Le Quéré (2005a, 2005b, 2007 [65], [66], [67]) posent la question de l'effet des travaux des forces de pression et, même, de viscosité (Pons, 2009 [64]).

La modélisation "faible nombre de Mach" a été introduite afin de traiter des écoulements compressibles à faibles vitesses. Ce régime est décrit par une vitesse caractéristique u_c de l'écoulement très faible devant la célérité du son c (vitesse de propagation de l'onde de pression $c = \sqrt{\frac{\gamma p_r}{\rho_r}}$ où $\gamma = C_p/C_v$). Le nombre de Mach, défini par le rapport $Ma = u_c/c$, est par conséquent très inférieur à l'unité. Ainsi, les effets des ondes acoustiques, qui se passent sur une échelle de temps très petite devant celle de l'écoulement, sont filtrés. Les exemples des applications typiques incluent la combustion, le refroidissement ou le chauffage d'un gaz dans un domaine fermé.

Le résultat principal de la théorie asymptotique développée par Paolucci (1982) [57] (voir **Annexe 1** à la suite de ce chapitre) est que la pression peut être décomposée en deux parties :

$$p_m = \bar{P}(t) + p'_m \quad (1.30)$$

où $\bar{P}/\bar{P}_r = O(1)$ et $p'_m/\bar{P}_r = O(Ma^2)$ est la fluctuation de la pression motrice. $\bar{P}(t)$ représente la pression thermodynamique qui ne dépend que du temps, par conséquent $\nabla p_m = \nabla p'_m$. Pour un gaz parfait, $\bar{P}(t)$ est calculée par la loi d'état :

$$\bar{P}(t) = \int_{\Omega} \frac{\rho R T}{M} d\Omega \quad (1.31)$$

où $\bar{\rho}$ et \bar{T} sont les valeurs moyennes de la masse volumique et de la température du gaz contenu dans un volume Ω .

La fluctuation de pression doit donc vérifier la condition :

$$\int_{\Omega} p'_m d\Omega = 0 \quad (1.32)$$

La décomposition de la pression (Eq. 1.30) nécessite d'introduire une équation supplémentaire qui traduit la conservation de la masse dans un volume Ω fermé :

$$\int_{\Omega} \rho(t) d\Omega = \rho_0(t_0)\Omega + \Delta m \quad (1.33)$$

où Δm représente la variation de la masse de gaz contenue dans Ω entre les deux instants t_0 et t . En convection naturelle purement thermique, $\Delta m = 0$.

Dans un domaine d'intégration spatiale Ω , le système d'équations de conservation (équations 1.1, 1.2 et 1.11) est écrit sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \\ \frac{\partial (\rho \vec{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \otimes \vec{V}) = -\nabla p' + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + \rho \vec{g} \\ \rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V} T) \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \left(\frac{d\bar{P}}{dt} + \frac{Dp'}{Dt} \right) + \bar{\bar{\tau}} : \nabla \vec{V} \end{array} \right. \quad (1.34)$$

Ce système est rendu adimensionnel en utilisant les propriétés thermophysiques à une température de référence T_0 , qui en général la température moyenne à l'instant initial. Soient : ρ_0 , μ_0 , C_{p0} et k_0 . On écrit alors :

$$\rho = \rho_0 \rho^* \quad \mu = \mu_0 \mu^* \quad C_p = C_{p0} C_p^* \quad k = k_0 k^* \quad (1.35)$$

En utilisant comme L et u_c comme échelles de longueur et de vitesse, et donc L/u_c comme échelle du temps, $\rho_0 u_c^2$ comme échelle de la fluctuation de pression, \bar{P}_0 comme échelle de la pression thermodynamique et ΔT_c comme écart de température caractéristique, le système (1.34) s'écrit sous la forme adimensionnelle :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^*) = 0 \\ \frac{\partial (\rho^* \vec{V}^*)}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^* \otimes \vec{V}^*) = -\nabla p'^* + \left(\frac{\mu_0}{\rho_0 u_c L} \right) \nabla \cdot \vec{\tau}^* - \frac{gL}{u_c^2} \rho^* \vec{k} \\ \rho^* C_p^* \left(\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\vec{V}^* \theta) \right) = \left(\frac{a_0}{u_c L} \right) \nabla \cdot (k^* \nabla \theta) + \left(\frac{\bar{P}_0}{\rho_0 C_{p0} \Delta T_c} \right) \frac{d\bar{P}^*}{d\tau} + \left(\frac{u_c^2}{C_{p0} \Delta T_c} \right) \frac{Dp'^*}{D\tau} \\ \quad + \left(\frac{\mu_0 u_c}{\rho_0 C_{p0} \Delta T_c L} \right) \vec{\tau}^* : \nabla \vec{V}^* \end{array} \right. \quad (1.36)$$

où $\theta = (T - T_0)/\Delta T_c$.

Pour les écoulements de convection naturelle, les variations de la masse volumique avec la pression statique ne sont importantes que pour les gaz. On peut donc retenir $u_c = a_0/L$ (ou $u_c = \mu_0/\rho_0 L$) comme vitesse caractéristique en régime laminaire si les vitesses maximales de l'écoulement sont très faibles ($|\vec{V}_{max}| \approx O(10^{-2} m/s)$) ou bien la vitesse de "chute libre" $u_c = \sqrt{g\beta\Delta T_c L}$ qui est plus proche des vitesses observées dans la réalité. On pose $\varepsilon = \Delta T_c/T_0$, paramètre mesurant l'écart à l'approximation de Boussinesq.

Si le travail des forces de pression motrice est conservé, on pourrait aussi choisir $u_c = c$. On exclut cette possibilité car la formulation "faible Mach" consiste à montrer que le travail des fluctuations de pression est toujours négligeable pour les écoulements de convection naturelle.

Pour les gaz parfaits, le rapport γ des chaleurs spécifiques à pression constante et à volume constant est relié aux grandeurs de référence dans un système en équilibre thermodynamique par :

$$\frac{\gamma - 1}{\gamma} = \frac{\bar{P}_0}{\rho_0 C_{p0} T_0} \quad (1.37)$$

On en déduit que le coefficient du terme de pression moyenne dans l'équation de l'énergie s'écrit aussi

$$\frac{\bar{P}_0}{\rho_0 C_{p0} \Delta T_c} = \frac{\gamma - 1}{\varepsilon \gamma} \quad (1.38)$$

- Avec $u_c = a_0/L$, le système adimensionnel (1.36) devient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^*) = 0 \\ \frac{D(\rho^* \vec{V}^*)}{D\tau} = -\nabla p'^* + Pr \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}^* - \frac{Ra Pr}{\varepsilon} \rho^* \vec{k} \\ \rho^* \frac{D(\theta)}{D\tau} = \nabla \cdot (k^* \nabla \theta) + \frac{\gamma - 1}{\varepsilon \gamma} \frac{d\bar{P}^*}{d\tau} + \frac{Ma^2(\gamma - 1)}{\varepsilon} \frac{Dp'^*}{D\tau} + \left(Pr \frac{Ma^2(\gamma - 1)}{\varepsilon} \right) \bar{\bar{\tau}}^* : \nabla \vec{V}^* \end{array} \right. \quad (1.39)$$

où $Ra = g\beta_0 \Delta T_c L^3 / a_0 \nu_0$ est le nombre de Rayleigh et $Ma = (a_0/L) \sqrt{\rho_0 / \gamma p_0}$ est le nombre de Mach, relié au nombre d'Eckert, $Ec = u_c^2 / C_{p0} \Delta T_c$, par $Ec = Ma^2(\gamma - 1)$.

- Avec $u_c = \sqrt{g\beta \Delta T_c L}$, le système adimensionnel (1.36) devient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^*) = 0 \\ \frac{D(\rho^* \vec{V}^*)}{D\tau} = -\nabla p'^* + \left(\frac{Pr}{Ra} \right)^{1/2} \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}^* - \frac{1}{\varepsilon} \rho^* \vec{k} \\ \rho^* \frac{D(\theta)}{D\tau} = \frac{1}{(Pr Ra)^{1/2}} \nabla \cdot (k^* \nabla \theta) + \frac{\gamma - 1}{\varepsilon \gamma} \frac{d\bar{P}^*}{d\tau} + \frac{Ma^2(\gamma - 1)}{\varepsilon} \frac{Dp'^*}{D\tau} + \left(Pr \frac{Ma^2(\gamma - 1)}{\varepsilon} \right) \bar{\bar{\tau}}^* : \nabla \vec{V}^* \end{array} \right. \quad (1.40)$$

L'approximation "faible Mach" consiste à négliger les termes en Ma^2 dans l'équation de l'énergie, c'est à dire le travail des fluctuations de pression devant la variation d'enthalpie due à la variation de pression moyenne. En ce qui concerne le terme dû au travail des forces de viscosité, on note que $Pr = O(1)$ pour les gaz (en s'appuyant sur la loi de Sutherland) et donc que l'ordre de grandeur du coefficient du terme de viscosité (quel que soit le choix de u_c) est identique à celui du terme de fluctuations de pression. Conserver ce terme signifie donc qu'il faut aussi conserver le travail des fluctuations de pression, c'est à dire revenir à une formulation purement compressible.

Dans ce travail, on admet donc que :

$$\gamma Ma^2 \left(\frac{Dp'^*}{D\tau} \right) \ll \frac{d\bar{P}^*}{d\tau} \quad \text{et} \quad \gamma Ma^2 Pr \left(\bar{\bar{\tau}}^* : \nabla \vec{V}^* \right) \ll \frac{d\bar{P}^*}{d\tau} \quad (1.41)$$

Fröhlich (1990) [20] a montré que les trois hypothèses suivantes doivent être vérifiées pour que l'approximation à faible nombre de Mach soit applicable :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{gL}{R/MT_0} = \frac{\gamma Ma^2}{Fr} \ll 1 \\ \frac{\mu_0 u_0}{\bar{P}_0 L} = \frac{\gamma Ma^2}{Re} \ll 1 \\ \frac{\gamma Ma^2}{Re Pr} \ll 1 \end{array} \right. \quad (1.42)$$

où $Fr = u_0^2/gL$ est le nombre de Froude qui caractérise le rapport entre les forces d'inertie et les forces de gravité et $Re = \rho_0 u_0 L/\mu_0$ est le nombre de Reynolds.

A tout instant, on suppose que la pression moyenne et la masse volumique obéissent à l'équation d'état des gaz parfaits. La forme adimensionnelle de la loi des gaz parfaits s'écrit :

$$\bar{p}^* = \rho^*(1 + \varepsilon\theta) \quad (1.43)$$

En définitive, le système d'équations de conservation "faible-Mach" dans un gaz parfait prend la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^*) = 0 \\ \frac{D(\rho^* \vec{V}^*)}{D\tau} = -\nabla p'^* + Pr \nabla \cdot \vec{\tau}^* - \frac{(Ra Pr)}{\varepsilon} \rho^* \vec{k} \\ \rho^* \frac{D(\theta)}{D\tau} = \nabla \cdot (k^* \nabla \theta) + \frac{\gamma - 1}{\varepsilon \gamma} \frac{d\bar{p}^*}{d\tau} \\ \bar{p}^* = \rho^*(1 + \varepsilon\theta) \end{array} \right. \quad (1.44)$$

ou

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^*) = 0 \\ \frac{D(\rho^* \vec{V}^*)}{D\tau} = -\nabla p'^* + \left(\frac{Pr}{Ra}\right)^{1/2} \nabla \cdot \vec{\tau}^* - \frac{\rho^*}{\varepsilon} \vec{k} \\ \rho^* \frac{D(\theta)}{D\tau} = \frac{1}{(Pr Ra)^{1/2}} \nabla \cdot (k^* \nabla \theta) + \frac{\gamma - 1}{\varepsilon \gamma} \frac{d\bar{P}^*}{d\tau} \\ \bar{p}^* = \rho^*(1 + \varepsilon\theta) \end{array} \right. \quad (1.45)$$

Quel que soit le choix de la vitesse de référence, ce système contient cinq inconnues : ρ^* , \vec{V}^* , p'^* , θ et \bar{P}^* . Pour un système fermé, la conservation de la masse dans le domaine Ω conduit à la condition :

$$\int_{\Omega} \frac{\bar{P}^*(\tau)}{1 + \varepsilon\theta(M, \tau)} d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\bar{P}^*(0)}{1 + \varepsilon\theta(M, 0)} d\Omega \quad (1.46)$$

qui constitue une quatrième équation de conservation (écrite sous forme intégrale).

Si $\varepsilon \rightarrow 0$, $\bar{P}^*(\tau) \rightarrow \bar{P}^*(0)$ et la pression thermodynamique devient indépendante du temps.

Paolucci (1982) [57] suggère d'utiliser l'équation de l'énergie au lieu de la conservation globale de la masse (équation 1.46) pour générer une équation scalaire pour la pression thermodynamique. Cette équation, qui ne s'applique que pour des conditions de parois imperméables ($\vec{V}_p = \vec{0}$), s'écrit sous forme adimensionnelle (voir Annexe 1) :

$$\frac{d\bar{P}^*}{dt} = \frac{1}{\int_{\Omega} (C_p - \Gamma) d\Omega} \left[\frac{1}{Pe} \int_S k \frac{\partial T}{\partial x_j} dS + \bar{P}^*(t) \int_{\Omega} v_j \frac{\partial c_p}{\partial x_j} d\Omega \right] \quad (1.47)$$

la condition initiale étant $\bar{P}^*(0) = 1$ et $\Gamma = (\gamma - 1)/\gamma$. En remplaçant $d\bar{P}^*/dt$ dans l'équation de l'énergie par cette expression, on obtient une forme intégral-différentielle de l'équation de l'énergie. En régime permanent, la somme des flux de chaleur traversant les parois d'un système fermé est nulle et donc le premier terme s'annule automatiquement. Il est moins simple de vérifier que la seconde intégrale s'annule lorsque la chaleur spécifique dépend de la température.

La forme dimensionnelle simplifiée suivante est proposée dans la thèse de Barrios-Pina (2010) [2] :

$$\frac{d\bar{P}(t)}{dt} \frac{\rho_0 \vec{V}}{\bar{P}(t)} = \int_{\Omega} \frac{\rho}{T} \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega \quad (1.48)$$

Il est clair que le terme de droite de l'équation 1.48 s'annule en régime permanent.

Ces expressions du travail de la pression thermodynamique n'ont pas été envisagées dans ce travail de thèse parce qu'elles ne s'appliquent pas lorsque les composantes normales des vitesses pariétales ne sont pas nulles, ce qui est le cas lorsqu'il y a évaporation/condensation d'une ou de plusieurs espèces sur les parois d'une cavité ou bien lorsque les parois sont poreuses.

1.3 Convection thermosolutale.

La convection naturelle d'origine solutale est beaucoup plus complexe à modéliser que la convection d'origine thermique parce qu'elle fait intervenir des phénomènes physico-chimiques qu'il n'est pas toujours aisé de représenter à l'échelle macroscopique et parce que des espèces peuvent disparaître, et donc d'autres apparaître, dans différentes parties de l'écoulement. On rencontre ces situations dans tous les réacteurs chimiques (c'est leur principe de fonctionnement) et lorsqu'une espèce change d'état (vapeur \rightarrow liquide, ou l'inverse) au sein de l'écoulement. C'est le cas lorsque du brouillard se forme. Un degré de complexité supplémentaire surgit lorsque les transferts solutaux et thermiques interviennent simultanément parce que des effets de couplages, tels que les effets Dufour et Soret, doivent, en général, être pris en compte. Nous donnons dans **l'annexe 2** quelques définitions des effets Dufour et Soret, non introduits dans la modélisation utilisée dans ce travail de thèse.

Dans cette partie, nous rappelons d’abord des notions classiques afin de préciser le formalisme des équations de conservation introduites dans la suite, notre choix s’étant, à priori, porté sur le système massique plutôt que sur le système molaire. La rédaction de cette partie s’appuie en grande partie sur Lauriat et Gobin (2008) [42]. Des compléments et démonstrations plus détaillés peuvent être trouvés dans Lauriat (2009) [43]. Nous considérons ensuite le cas des mélanges binaires non dilués pour lesquels nous présentons une extension de la formulation à faible nombre de Mach. Nous proposons aussi une écriture adimensionnelle des équations de conservation.

1.3.1 Equations de conservation des espèces

Dans un mélange à n constituants de concentration molaire non-uniforme c_i ($\sum_{i=1}^n c_i = 1$, c_i en $kmol/m^3$), les gradients de masse volumique du mélange, $\rho_m = \sum_{i=1}^n \rho_i$, créent des mouvements de convection naturelle massique ($\rho_i = M_i c_i$ où M_i est la masse molaire de i).

La vitesse massique moyenne du mélange, ou vitesse du fluide, est définie par :

$$\vec{V} = \frac{1}{\rho_m} \sum_{i=1}^n \rho_i \vec{v}_i = \frac{\sum_{i=1}^n \rho_i \vec{v}_i}{\sum_{i=1}^n \rho_i}, \quad (1.49)$$

où \vec{v}_i est la vitesse massique du constituant i . Les différences de vitesse ($\vec{V} - \vec{v}_i$) sont à l’origine des flux diffusifs :

$$\vec{j}_i = \rho_i (\vec{V} - \vec{v}_i) \quad \text{avec} \quad \sum_{i=1}^n \vec{j}_i = 0. \quad (1.50)$$

La diffusion massique obéit à la loi de Fick qui peut s’exprimer sous forme massique ou sous forme molaire.

- Forme massique (ρ_m, W_i)

$$\vec{j}_i = -\rho_m \mathcal{D}_{im} \nabla W_i \quad (kg/m^2 s), \quad (1.51)$$

où $W_i = \rho_i / \rho_m$ est la fraction massique et \mathcal{D}_{im} est le coefficient de diffusion du constituant “ i ” dans le mélange (unités : m^2/s).

- Forme molaire (c, x_i)

$$\vec{J}_i = -c \mathcal{D}_{im} \nabla x_i \quad (kmol/m^2 s). \quad (1.52)$$

où $x_i = c_i / c$ est la fraction molaire du constituant i . L’équation de conservation des espèces traduit la conservation de la masse du constituant “ i ”. En négligeant les effets des gradients de température sur le flux de diffusion de matière (effet Soret qui caractérise l’aptitude des constituants à se séparer dans un fluide à température non-uniforme), elle s’écrit en terme massique :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \vec{V}) = -\nabla \cdot \vec{j}_i + r_i \quad (1.53)$$

où \dot{r}_i représente le taux de création ou de disparition d'une espèce due à une réaction chimique. La conservation de la masse du mélange implique que $\sum_i \dot{r}_i = 0$. En sommant termes à termes toutes les équations de conservation des espèces, on obtient l'équation de conservation de la masse du mélange.

Le système d'équations de conservation décrivant les mouvements de convection naturelle d'un mélange constitué de n espèces est donc formé par $(n + 2)$ équations :
- les équations de conservation de quantité de mouvement et de l'énergie qui se rapportent au mélange,
- les n équations des espèces.

Cependant, comme le terme de poussée d'Archimède doit être modélisé et que les approximations de compressibilité sont définies à partir de la variation de la masse volumique du mélange, on préfère souvent utiliser $(n - 1)$ équations des espèces et rajouter l'équation de conservation de la masse du mélange.

Remarques :

- pour un écoulement incompressible $\nabla \cdot \vec{V} = 0$ et donc

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \rho_i = \nabla \cdot (\rho_m \mathcal{D}_{im} \nabla W_i) + \dot{r}_i \quad (\dot{r}_i \text{ en } kg/m^3 s) \quad (1.54)$$

- si, de plus, la masse volumique du mélange est uniforme

$$\rho_m \mathcal{D}_{im} \nabla W_i = \mathcal{D}_{im} \nabla \rho_i \quad (1.55)$$

on peut donc écrire

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla W_i = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{im} \nabla W_i) + \frac{\dot{r}_i}{\rho_m} \quad (1.56)$$

ou

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla c_i = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{im} \nabla c_i) + \frac{\dot{r}_i}{M_i} \quad (\dot{r}_i \text{ en } kmol/kg m^3 s) \quad (1.57)$$

Toutes ces expressions de l'équation de conservation de la masse du constituant "i" sont formellement similaires à l'équation de l'énergie. Les conditions aux limites sont, en général, plus compliquées que celles des autres équations de conservation à cause de l'existence possible de discontinuités aux interfaces. Les conditions aux limites les plus simples sont de type fraction massique (ou concentration) imposée ou bien flux massique (ou flux molaire) imposé.

1.3.2 Equations de conservation du mélange

- Equation de continuité relative au mélange.

$$\frac{D\rho_m}{Dt} = -\rho_m \nabla \cdot \vec{V} \quad (1.58)$$

Dans un système fermé, aucun terme de source ne doit apparaître dans cette équation parce que $\sum_i \dot{r}_i = 0$.

- Equation de conservation de la quantité de mouvement relative au mélange.

Les forces associées au transport diffusif d'un constituant modifient théoriquement l'expression du tenseur des contraintes. Ces forces étant très inférieures aux forces de pression et de viscosité, elles sont généralement négligées. Par contre, il faut tenir compte des forces de volume spécifiques à chaque constituant, c'est à dire que :

$$\rho_m \vec{f}_V = \sum_{i=1}^n \rho_i \vec{f}_{V,i} \quad (1.59)$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement relative au mélange s'écrit donc

$$\rho_m \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}}) + \sum_{i=1}^n \rho_i \vec{f}_{V,i} \quad (1.60)$$

Dans le cas particulier d'un mélange soumis seulement au champ de gravité ($\vec{f}_{V,i} = \vec{g}$), $\sum_{i=1}^n \rho_i \vec{f}_{V,i} = \rho_m \vec{g}$.

- Equation de l'énergie relative au mélange.

Afin d'alléger l'écriture, l'équation de l'énergie relative au mélange est établie en introduisant les hypothèses suivantes :

- écoulement incompressible,
- dissipation visqueuse négligeable,
- pas de production volumique de chaleur,
- effet Dufour négligeable.

En notant h_i l'enthalpie du constituant "i", l'équation de l'énergie du mélange s'écrit

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{i=1}^n \rho_i h_i \right) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \rho_i h_i \vec{v}_i \right) = \nabla \cdot (k_m \nabla T) \quad (1.61)$$

où k_m est la conductivité thermique d'un mélange homogène, c'est à dire sans diffusion massique. Comme $\rho_i \vec{v}_i = \rho_i \vec{V} - \rho_m \mathcal{D}_{i,m} \nabla W_i$, on en déduit la forme suivante

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{i=1}^n \rho_i h_i \right) + \nabla \cdot \left(\left(\sum_{i=1}^n \rho_i h_i \right) \vec{V} \right) = \nabla \cdot (k_m \nabla T) + \nabla \cdot \left(\rho_m \sum_{i=1}^n h_i \mathcal{D}_{i,m} \nabla W_i \right) \quad (1.62)$$

Le second terme du membre de droite s'appelle "terme d'interdiffusion entre espèces" : $\vec{q}_{i,m} = \rho_m \sum_{i=1}^n h_i \mathcal{D}_{i,m} \nabla W_i$ est analogue à un flux de chaleur.

On considère maintenant les deux cas suivants :

1. Il n'y a pas de réaction chimique ou de changement d'état. On obtient :

$$\rho_m \bar{C}_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}T) \right) = \nabla \cdot (k_m \nabla T) + \nabla \cdot \left(\rho_m \sum_{i=1}^n h_i \mathcal{D}_{i,m} \nabla W_i \right) \quad (1.63)$$

ou encore

$$(\rho_m \bar{C}_p) \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (k_M \nabla T) \quad (1.64)$$

où \bar{C}_p est la chaleur massique du mélange à la température de référence T_0 ($\bar{C}_p = \sum_{i=1}^n W_i C_{p,i}$) et k_M est la conductivité effective du mélange définie par :

$$k_M = k_m + \left(\rho_m \sum_{i=1}^n C_{p,i} (T - T_0) \mathcal{D}_{i,m} \frac{\nabla W_i}{\nabla T} \right) . \quad (1.65)$$

2. Il y a création ou disparition d'un constituant.

Il faut maintenant écrire l'enthalpie du constituant "i" sous la forme :

$$h_i = C_{p,i} \Delta T + \Lambda_i \quad (1.66)$$

où Λ_i représente l'enthalpie de formation/disparition de "i" à la température T_0 . On obtient alors :

$$(\rho_m \bar{C}_p) \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (k_M \nabla T) + \sum_{i=1}^n \dot{r}_i \Lambda_i \quad (1.67)$$

1.3.3 Equations de conservation pour les mélanges binaires non dilués

Si seules deux espèces 1 et 2 diffusent en même temps, alors :

$$\vec{j}_1 = -\rho_m D_{1,2} \nabla W_1 \quad \text{et} \quad \vec{j}_2 = -\rho_m D_{2,1} \nabla W_2 \quad (1.68)$$

Comme :

$$D_{1,2} = D_{2,1} \quad \text{et} \quad W_2 = 1 - W_1 \quad (1.69)$$

on en déduit que

$$\vec{j}_2 = -\vec{j}_1 \quad (1.70)$$

L'équation de conservation de l'espèce "2" s'écrit donc :

$$\rho_m \frac{DW_2}{Dt} = \nabla \cdot (\rho_m D_{1,2} \nabla W_2) \quad (1.71)$$

1.3.3.1 Conditions aux limites

- On suppose que deux espèces ne diffusent pas depuis ou vers la paroi, donc les vitesses pariétales des deux constituants sont nulles :

$$\vec{v}_1 = \vec{v}_2 = \vec{0} \quad (1.72)$$

- Si l'espèce 1 ne diffuse pas vers les parois (par exemple l'air sec et incondensable ne diffuse pas dans le film d'eau en cas de condensation d'air humide), alors $\vec{v}_1 = \vec{0}$. D'où :

$$\rho_m \vec{V} = \rho_2 \vec{v}_2 = \rho_2 \vec{V} - \rho_m D_{2,1} \nabla W_2 \quad (1.73)$$

On en déduit la vitesse du mélange à partir de l'équation 1.73. Soit :

$$\vec{V} = -\frac{D_{2,1}}{(1 - W_2)} \nabla W_2 \quad (1.74)$$

La vitesse de l'espèce 2 étant :

$$\vec{v}_2 = \frac{\vec{V}}{W_2} = -\frac{D_{2,1}}{W_2(1 - W_2)} \nabla W_2 \quad (1.75)$$

Il s'ensuit que la variation totale de la masse du mélange entre les instants $t = 0$ et t due à la diffusion de l'espèce 2 à travers les N parois a pour expression :

$$\Delta m = \sum_k^N \int_0^t \int_{S_k} \rho_m \vec{V} \cdot \vec{n}_k dS_k dt \quad (1.76)$$

1.3.4 Convection thermosolutale d'un mélange binaire dans une cavité bidimensionnelle.

Dans ce paragraphe, l'ensemble des équations de conservation et des conditions initiales et aux limites sont écrites dans le système de coordonnées cartésiennes (x, y) dans le cas particulier de la cavité schématisée sur la figure 1. Afin d'alléger l'écriture, l'indice m a été omis : toutes les propriétés thermophysiques intervenant dans ces équations se rapportent au mélange, à l'exception du coefficient de diffusion massique, D_{12} .

Ces équations sont écrites sous les hypothèses suivantes :

- La géométrie du problème est en deux dimensions,
- Le fluide est supposé newtonien et le régime d'écoulement laminaire,
- L'approximation "faible nombre de Mach" est employée,
- La dissipation d'énergie due au travail des forces visqueuses est négligée,
- Le mélange de gaz est supposé transparent au rayonnement thermique,
- Il n'y a pas de production volumique de chaleur,
- Le mélange est constitué de deux gaz parfaits,

- Les effets Dufour et Soret sont négligés (Annexe 2).

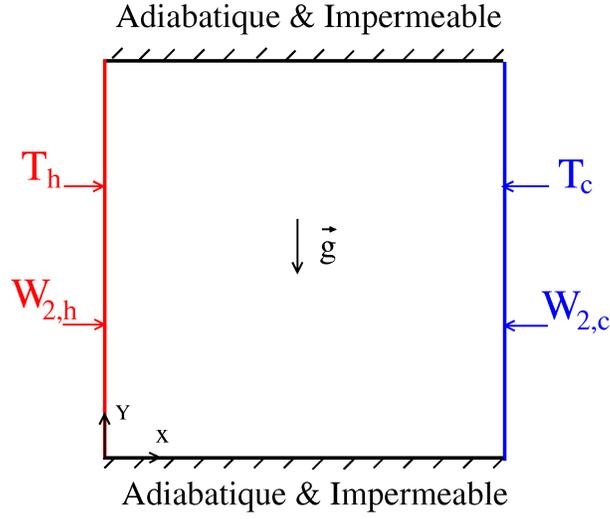


FIG. 1.1 – Représentation schématique de la cavité et système de coordonnées.

- Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (1.77)$$

- Equation de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial y} = -\frac{\partial p'_m}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \quad (1.78)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} = -\frac{\partial p'_m}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + (\rho_m - \rho_r) \vec{g} \quad (1.79)$$

- Equation de l'énergie :

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(uT)}{\partial x} + \frac{\partial(vT)}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{d\bar{P}}{dt} \quad (1.80)$$

- Equation de conservation de l'espèce "2" :

$$\frac{\partial(\rho W_2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u W_2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v W_2)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{1,2} \frac{\partial W_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{1,2} \frac{\partial W_2}{\partial y} \right) \quad (1.81)$$

Dans les équations de quantité mouvement, Eq. 1.78 et Eq. 1.79, les composantes du tenseur des contraintes s'écrivent pour un fluide newtonien :

$$\tau_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \quad (1.82)$$

$$\tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (1.83)$$

$$\tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (1.84)$$

$$\tau_{yy} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \quad (1.85)$$

- Conditions initiales :

$$u = v = 0, \quad T = T_0, \quad W_2 = W_{2,0}, \quad \rho = \rho_0, \quad \bar{P} = \bar{P}_0 \quad (1.86)$$

- Conditions aux limites :

$$u_p = -\frac{D_{1,2}}{(1 - W_{2,h})} \frac{\partial W_2}{\partial \vec{n}} \Big|_0, \quad v = 0, \quad T = T_h, \quad W_2 = W_{2,h} \text{ en } x = 0, \quad t > 0, \quad \forall y \quad (1.87)$$

$$u_p = -\frac{D_{1,2}}{(1 - W_{2,c})} \frac{\partial W_2}{\partial \vec{n}} \Big|_L, \quad v = 0, \quad T = T_c, \quad W_2 = W_{2,c} \text{ en } x = L, \quad t > 0, \quad \forall y \quad (1.88)$$

$$u = v = 0, \quad \partial T / \partial y = 0 \text{ et } \partial W_2 / \partial y = 0 \text{ en } y = 0, H \quad \forall x \quad (1.89)$$

1.3.4.1 Forme adimensionnelles des équations des mélanges binaires non dilués

Grandeurs adimensionnelles :

La largeur L de la cavité est choisie comme longueur de référence et $u_c = a_r/L$ comme échelle des vitesses, où a_r est la diffusivité thermique. Il s'ensuit que l'échelle de temps est a_r/L^2 . La masse volumique et la pression thermodynamique à l'instant initial étant choisies comme échelles pour ces deux quantités, l'échelle de la fluctuation de pression motrice est $\rho_0 u_c^2$.

On introduit une différence de température adimensionnelle et une différence de fraction massique réduite de façon à ce que ces deux grandeurs varient dans le même intervalle, soient $T_r = (T_c + T_h)/2$ et $W_{2,r} = (W_{2,c} + W_{2,h})/2$.

Les variables indépendantes adimensionnelles s'écrivent donc :

$$x^* = \frac{x}{L}, \quad y^* = \frac{y}{L}, \quad \tau = t \frac{u_c}{L} \quad (1.90)$$

et les variables dépendantes adimensionnelles sont :

$$p_m^* = \frac{p_m'}{\rho_0 u_c^2}, \quad \bar{P}^* = \frac{\bar{P}}{\bar{P}_0}, \quad \rho^* = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad u^* = \frac{u}{u_c}, \quad v^* = \frac{v}{u_c}, \quad \theta = \frac{T - T_r}{\Delta T}, \quad W_2^* = \frac{W_2 - W_{2,r}}{\Delta W_2} \quad (1.91)$$

où $\Delta T = (T_h - T_c)$ et $\Delta W_2 = (W_{2,h} - W_{2,c})$.

Les grandeurs thermophysiques adimensionnelles sont définies à partir de leurs valeurs dans les conditions de référence (T_r et $W_{2,r}$) :

$$\mu^* = \frac{\mu}{\mu_r}, \quad C_p^* = \frac{C_p}{C_{pr}}, \quad k^* = \frac{k}{k_r}, \quad D_{1,2}^* = \frac{D_{1,2}}{D_{1,2,r}} \quad (1.92)$$

On obtient alors le système d'équations adimensionnelles suivant :

- Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} + \frac{\partial(\rho^* u^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(\rho^* v^*)}{\partial y^*} = 0 \quad (1.93)$$

- Equation de quantité mouvement :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho^* u^*)}{\partial \tau} + \frac{\partial(\rho^* u^* u^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(\rho^* v^* u^*)}{\partial y^*} = & -\frac{\partial p_m^*}{\partial x^*} + Pr \frac{\partial}{\partial x^*} (\mu^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*}) + Pr \frac{\partial}{\partial y^*} (\mu^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*}) \\ & + Pr \frac{\partial}{\partial x^*} (\frac{1}{3} \mu^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} - \frac{2}{3} \mu^* \frac{\partial v^*}{\partial y^*}) + Pr \frac{\partial}{\partial y^*} (\mu^* \frac{\partial v^*}{\partial x^*}) \end{aligned} \quad (1.94)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho^* v^*)}{\partial \tau} + \frac{\partial(\rho^* u^* v^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(\rho^* v^* v^*)}{\partial y^*} = & -\frac{\partial p_m^*}{\partial y^*} + Pr \frac{\partial}{\partial x^*} (\mu^* \frac{\partial v^*}{\partial x^*}) + Pr \frac{\partial}{\partial y^*} (\mu^* \frac{\partial v^*}{\partial y^*}) \\ & + Pr \frac{\partial}{\partial x^*} (\mu^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*}) + Pr \frac{\partial}{\partial y^*} [\frac{1}{3} (\mu^* \frac{\partial v^*}{\partial y^*}) - \frac{2}{3} (\mu^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*})] + (\rho^* - 1) \frac{\vec{g}}{|g|} Fr \end{aligned} \quad (1.95)$$

- Equation de l'énergie :

$$\rho^* C_p^* \left(\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \frac{\partial(u^* \theta)}{\partial x^*} + \frac{\partial(v^* \theta)}{\partial y^*} \right) = \frac{\partial}{\partial x^*} (k^* \frac{\partial \theta}{\partial x^*}) + \frac{\partial}{\partial y^*} (k^* \frac{\partial \theta}{\partial y^*}) + \frac{\gamma - 1}{\gamma \epsilon_T} \frac{d\bar{P}^*}{dt} \quad (1.96)$$

- Equation de conservation de l'espèce "2" :

$$\frac{\partial(\rho^* W_2^*)}{\partial \tau} + \frac{\partial(\rho^* u^* W_2^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(\rho^* v^* W_2^*)}{\partial y^*} = \frac{1}{Le} \frac{\partial}{\partial x^*} (\rho^* D_{1,2}^* \frac{\partial W_2^*}{\partial x^*}) + \frac{1}{Le} \frac{\partial}{\partial y^*} (\rho^* D_{1,2}^* \frac{\partial W_2^*}{\partial y^*}) \quad (1.97)$$

- Equation d'état :

$$\bar{P}^* = \frac{1}{M^* T_0^*} (\epsilon_T \theta + 1) \quad (1.98)$$

où $M^* = M/M_0$, $T_0^* = T_0/T_r$ et $\epsilon_T = \Delta T/T_r$.

Remarque : Si les propriétés physiques sont supposées constantes, $T_0^* \neq 1$. Si elles varient, il vaut mieux alors choisir $T_r = T_0 \Rightarrow T^* = 1$.

Ce système d'équations n'est pas complet : il manque une équation pour calculer la pression thermodynamique.

1.3.4.2 Calculs de la pression thermodynamique et de la masse volumique

La relation utilisée pour calculer la pression thermodynamique dérive directement de la conservation de la masse (Eq. 1.33). Elle est écrite dans le système 2D-cartésien représenté sur la figure 1.1.

$$\int_{\Omega} \frac{\bar{P}M}{RT} d\Omega = \rho_0\Omega + \Delta m \quad (1.99)$$

où Ω est le volume de la cavité (en m^3/m) et Δm est l'augmentation de la masse du mélange (en kg/m). La pression thermodynamique ne dépendant que du temps, l'équation 1.99 s'écrit aussi

$$\bar{P} \int_{\Omega} \frac{M}{RT} d\Omega = \rho_0\Omega + \Delta m \quad (1.100)$$

Soit sous forme adimensionnelle :

$$P^* = \frac{\bar{P}}{P_0} = \frac{\rho_0\Omega + \Delta m}{\frac{\rho_0 RT_0}{M_0} \int_0^H \int_0^L \frac{M}{RT} dx dy} = \frac{\Omega + \Delta m/\rho_0}{\int_0^H \int_0^L \frac{M}{M_0} \frac{T_0}{T} dx dy} \quad (1.101)$$

En introduisant les deux paramètres ϵ_r et ϵ_m :

$$\epsilon_r = \frac{\Delta T}{T_r} \quad (1.102)$$

$$\epsilon_m = \frac{(1 - M^*)\Delta W_2}{(1 - M^*)W_{2,r} + M^*} \quad (1.103)$$

la pression thermodynamique devient (voir Annexe 4 pour les calculs détaillés) :

$$P^* = \frac{A + \Delta m^*}{\int_0^A \int_0^1 \left(\frac{\epsilon_r \theta_0 + 1}{\epsilon_r \theta + 1} \right) \left(\frac{\epsilon_m W_{2,0}^* + 1}{\epsilon_m W_{2,i}^* + 1} \right) dx^* dy^*} \quad (1.104)$$

où la variation de masse volumique adimensionnelle entre les instants $\tau = 0$ et τ a pour expression (voir Annexe 4) :

$$\Delta m^* = \sum_i \int_0^\tau \int_0^{S_i^*} \rho^* \left(\frac{-D_{1,2}^*}{Le(C_w - W_{2,i}^*)} \right) \frac{\partial W_2^*}{\partial \vec{n}^*} \Big|_p d\xi_i^* d\tau \quad (1.105)$$

La sommation portant sur les quatre parois de la cavité d'aire adimensionnelle S_i^* et de coordonnée normale ξ_i^* . Le paramètre adimensionnel C_w caractérise la densité de flux massique sur une paroi et a pour expression :

$$C_w = \frac{1 - W_{2,r}}{\Delta W_2} \quad (1.106)$$

En introduisant cette expression de la variation adimensionnelle de la masse volumique dans l'équation 1.104, on obtient la pression thermodynamique adimensionnelle sous la forme suivante :

$$P^* = \frac{A + \sum_i \int_0^\tau \int_0^{S_i^*} \frac{-\rho^* D_{1,2}^*}{Le(C_w - W_{2,i}^*)} \frac{\partial W_2^*}{\partial \bar{n}^*} \Big|_p d\xi_i^* d\tau}{\int_0^A \int_0^1 \left(\frac{\epsilon_T \theta_0 + 1}{\epsilon_T \theta + 1}\right) \left(\frac{\epsilon_m W_{2,0}^* + 1}{\epsilon_m W_2^* + 1}\right) dx^* dy^*} \quad (1.107)$$

Finalement, la masse volumique est calculée en utilisant la loi des gaz parfaits (équation 1.98) ré-écrite sous la forme suivante :

$$\rho^* = \left(\frac{\bar{P}}{P_0}\right) \left(\frac{T_0}{T}\right) \left(\frac{1/M_0}{1/M}\right) = P^* \left(\frac{\epsilon_T \theta_0 + 1}{\epsilon_T \theta + 1}\right) \left(\frac{\epsilon_m W_{2,0}^* + 1}{\epsilon_m W_2^* + 1}\right) \quad (1.108)$$

1.3.4.3 Conditions initiales et aux limites adimensionnelles

Les conditions initiales (équation 1.86) et les conditions aux limites (équations 1.87 à 1.89) s'écrivent sous forme adimensionnelle :

- Conditions initiales

$$u^* = v^* = 0, \quad \theta = \theta_0, \quad W_2^* = W_{2,0}^*, \quad \rho^* = 1, \quad \bar{P}^* = 1 \quad \text{en } \tau = 0, \quad \forall x^*, y^* \quad (1.109)$$

- Conditions aux limites

$$u_p^* = -\frac{D_{1,2}^*}{Le(C_w - 0,5)} \frac{\partial W_2^*}{\partial x^*} \Big|_0, \quad v^* = 0, \quad \theta = 0,5, \quad W_2^* = 0,5 \quad \text{en } x^* = 0, \quad \forall y^* \quad (1.110)$$

$$u_p^* = -\frac{D_{1,2}^*}{Le(C_w + 0,5)} \frac{\partial W_2^*}{\partial x^*} \Big|_1, \quad v^* = 0, \quad \theta = -0,5, \quad W_2^* = -0,5 \quad \text{en } x^* = 1, \quad \forall y^* \quad (1.111)$$

$$u^* = v^* = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial y^*} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial W_2^*}{\partial y^*} = 0 \quad \text{en } y^* = 0, A \quad \forall x^* \quad (1.112)$$

1.3.4.4 Paramètres adimensionnels

L'ensemble des équations de conservation (équations 1.93 à 1.97), les expressions de la pression thermodynamique et de la masse volumique (équations 1.107 et 1.108) et les conditions initiales et aux limites (équations 1.109 à 1.112) font apparaître 10 nombres sans dimension : 5 dans les 4 équations de conservation et 5 autres dans

l'expression de la pression, que l'on retrouve dans les expressions de la masse volumique et des conditions aux limites. Ce nombre de paramètres est réduit à 5 si l'on considère des mélanges binaires dilués et si l'on admet l'approximation de Boussinesq thermique. Ces 5 paramètres sont donnés dans l'annexe 3.

• Paramètres intervenant dans les équations de conservation :

- Nombre de Froude : $Fr = a_r/gL^3$
- Nombre de Lewis : $Le = a_r/D_{1,2r}$
- Nombre de Prandtl : $Pr = \nu_r/a_r$
- Paramètre "hors-Boussinesq" thermique : ϵ_T
- Rapport des chaleur spécifiques : $\gamma = C_p/C_v$

• Paramètres intervenant dans l'expression de la pression thermodynamique :

- Rapport de forme ou allongement de la cavité : $A = H/L$
- Paramètre caractérisant le transfert massique le long des parois : C_w
- Paramètre "hors-Boussinesq" massique : ϵ_m
- Condition initiale thermique : θ_0
- Condition initiale massique : $W_{2,0}^*$

1.3.4.5 Nombres de Nusselt et de Sherwood

On ne donne ici que les définitions des nombres de Nusselt et de Sherwood correspondant à la géométrie représentée sur la figure 1.1, c'est à dire pour des gradients horizontaux de température et de fraction massique dans une cavité rectangulaire, cas traité dans le chapitre 4. Dans un cas plus général, il faudrait ré-écrire ces relations sous forme vectorielle mais le choix des flux de référence pertinents (diffusion pure) n'est pas unique (chapitre 5). Dans le cas que nous considérons ici, les flux de référence sont les flux de diffusion pure. Soit pour le transfert thermique :

$$Q_{cond} = -k_r \left(\frac{T_h - T_v}{L} \right) \quad (1.113)$$

et pour le transfert massique

$$Q_{mass} = -\rho D_{1,2r} \left(\frac{W_{2,h} - W_{2,c}}{L} \right) \quad (1.114)$$

En régime convectif non dilué, les flux thermiques et massiques aux parois dépendent aussi des distributions de vitesses normales aux parois (pour le cas considéré, il ne s'agit que des parois verticales) et s'écrivent :

$$Q_{conv,T} = -k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_p + \rho u_p C_p (T_p - T_r) \quad (1.115)$$

et

$$Q_{conv,m} = \rho D_{1,2} \frac{\partial W_2}{\partial x} \Big|_p + \rho u_p (W_{2,p} - W_{2,r}) \quad (1.116)$$

Les nombres de Nusselt et de Sherwood sont alors définis comme étant les rapports $Q_{conv,T}/Q_{cond}$ et $Q_{conv,m}/Q_{mass}$. Soit :

$$Nu = \frac{Q_{conv,T}}{Q_{cond}} = \frac{-k \frac{\partial T}{\partial x}|_p + \rho u_p C_p (T_p - T_r)}{k_r \frac{\Delta T}{L}} = -k^* \frac{\partial \theta}{\partial x^*}|_p + \rho^* u_p^* \theta_p \quad (1.117)$$

$$Sh = \frac{Q_{conv,m}}{Q_{mass}} = \frac{\rho D_{1,2} \frac{\partial W_2}{\partial x}|_p + \rho u_p (W_{2,p} - W_{2,r})}{\rho_0 D_{1,2,r} \frac{\Delta W_2}{L}} = \rho^* D_{1,2}^* \frac{\partial W_2^*}{\partial x^*}|_p + Le \rho^* u_p^* W_{2,p}^* \quad (1.118)$$

Dans le cas de mélanges binaires non-dilués, les flux thermique et massique sont donc toujours composés de deux termes : un terme de diffusion et un terme d'advection.

1.4 Conclusion

La formulation originale des transferts par convection naturelle dans des mélanges binaires de gaz parfaits qui a été mise en oeuvre dans le cadre de ce travail de thèse et les hypothèses introduites sont précisées dans ce premier chapitre. La modélisation des phénomènes instationnaires d'évaporation ou de condensation surfaciques, qui nécessite quelques compléments, sera exposée dans le chapitre 5 où la formulation faiblement compressible développée dans ce chapitre est entièrement conservée.

Dans les deux chapitres suivants, nous décrivons la méthode numérique employée et nous présentons des tests de validation.

1.5 ANNEXES

1.5.1 Annexe 1 : Formulation faiblement compressible.

L'objectif de la formulation faiblement compressible est de tenir compte des variations de masse volumique sous l'effet de la température et de la pression en filtrant les effets acoustiques associés, sans trop altérer la représentation des phénomènes physiques principaux, en particulier les influences des ondes de gravité qui se manifestent dès que le nombre de Rayleigh dépasse une valeur critique, dépendant de la géométrie et des conditions aux limites.

L'approche consiste à partir de la forme compressible des équations de Navier-Stokes et de l'énergie et d'appliquer la méthode des développements asymptotiques pour ne conserver que les termes dominants dans chacune des équations. Rubel et Landis (1970) [70] utilisèrent le paramètre $\epsilon = 2(T_h - T_c)/(T_h + T_c)$ et montrèrent que l'expansion converge si $\epsilon < 1$, c'est à dire pour $T_h < 3T_c$. Ce résultat n'est pas convaincant. Paolucci (1982) [57] choisit le nombre de Mach comme le petit paramètre en développant les quatre inconnues du problème sous la forme suivante :

$$v_i = Ma \left[v_i^{(0)} + Ma^2 v_i^{(1)} + O(Ma^2) \right] \quad (1.1)$$

$$T = T^{(0)} + Ma^2 T^{(1)} + O(Ma^2) \quad (1.2)$$

$$p = p^{(0)} + Ma^2 p^{(1)} + O(Ma^2) \quad (1.3)$$

$$\rho = \rho^{(0)} + Ma^2 \rho^{(1)} + O(Ma^2) \quad (1.4)$$

Equations de conservation en coordonnées cartésiennes :

Hypothèses :

- Fluide newtonien,
- Pas de production volumique de chaleur (exceptée celle due aux travaux des forces de pression et de viscosité).

Les échelles utilisées pour écrire les variables dépendantes sous forme adimensionnelles sont c_0 , p_0 , ρ_0 , T_0 pour la vitesse, la pression, la masse volumique et la température. μ_0 , k_0 , $C_{p,0}$, $C_{v,0}$ sont les échelles des propriétés thermophysiques. L et L/U_0 sont celles des longueurs et du temps, où U_0 est une vitesse caractéristique de l'écoulement ($U_0 \ll c_0$).

Les quatre équations décrivant l'évolution des variables dépendantes d'un écoulement compressible s'écrivent alors :

- Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{Ma} \frac{\partial(\rho v_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (1.5)$$

- Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{1}{Ma} \frac{\partial(\rho v_i v_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\gamma Ma} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{Ma}{Fr} \rho g_i \quad (1.6)$$

où le tenseur des contraintes visqueuses est donné par

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij}$$

- Conservation de l'énergie

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{Ma} \frac{\partial(v_j T)}{\partial x_j} \right) = \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\gamma - 1}{\gamma} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{Ma} \frac{\partial(v_j p)}{\partial x_j} \right) + \frac{\gamma - 1}{Re} \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \quad (1.7)$$

Note :

$$\frac{\gamma - 1}{\gamma} = \frac{p_o}{\rho_o C_{p,o} T_o}$$

- Equation d'état

$$p = \rho T \quad (1.8)$$

Si les propriétés physiques sont constantes, $\mu = 1$, $k = 1$, $C_p = 1$.

Les nombres adimensionnels intervenant dans ces équations sont :

- le nombre de Mach :

$$Ma = \frac{U_0}{c_0}$$

- le nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{\rho_0 U_0 L}{\mu_0}$$

- le nombre de Froude :

$$Fr = \frac{U_0^2}{g L}$$

- le nombre de Péclet :

$$Pe = \frac{\rho_0 C_{p,0} U_0 L}{k_0}$$

- le rapport des chaleurs spécifiques :

$$\gamma = \frac{C_{p,0}}{C_{v,0}}$$

1.5.1.1 Equations de conservation aux ordres $Ma^2/Fr = 0(1)$ and $Ma^2/Re = O(Ma^2)$.

A l'ordre 2, on obtient 8 équations pour les variables dépendantes $\rho^0, \rho^1 \dots T^0, T^1$. Notons ici que $Ma^2/Fr = 0(1)$ signifie que $gL/c_0^2 = O(1) \implies$ problèmes atmosphériques pour lesquels L est de l'ordre de plusieurs kilomètres.

- Equation de continuité :

0(1)

$$\frac{\partial \rho^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial(\rho^{(0)} v_j^{(0)})}{\partial x_j} = 0 \quad (1.9)$$

0(Ma^2)

$$\frac{\partial \rho^{(1)}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho^{(1)} v_j^{(0)} + \rho^{(0)} v_j^{(1)}) = 0 \quad (1.10)$$

- Equation de quantité de mouvement

0(1)

$$0 = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial p^{(0)}}{\partial x_i} + \frac{Ma^2}{Fr} \rho^{(0)} g_i \quad (1.11)$$

0(Ma^2)

$$\frac{\partial(\rho^{(0)} v_i^{(0)})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho^{(0)} v_i^{(0)} v_j^{(0)}) = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ij}^{(0)}}{\partial x_j} + \frac{Ma^2}{Fr} \rho^{(1)} g_i \quad (1.12)$$

où le tenseur des contraintes s'écrit :

$$\tau_{ij}^{(0)} = \mu^{(0)} \left(\frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j^{(0)}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu^{(0)} \frac{\partial v_k^{(0)}}{\partial x_k} \delta_{ij}$$

- Equation de l'énergie

0(1)

$$\rho^{(0)} c_p^{(0)} \left(\frac{\partial T^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial(v_j^{(0)} T^{(0)})}{\partial x_j} \right) = \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k^{(0)} \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_j} \right) + \frac{\gamma - 1}{\gamma} \left(\frac{\partial p^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial(v_j^{(0)} p^{(0)})}{\partial x_j} \right) \quad (1.13)$$

$O(Ma^2)$

$$\begin{aligned}
\rho^{(0)} c_p^{(0)} \left(\frac{\partial T^{(1)}}{\partial t} + \frac{\partial(v_j^{(0)} T^{(1)})}{\partial x_j} \right) + \left[\frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}} + \frac{c_p^{(1)}}{c_p^{(0)}} \right] \rho^{(0)} c_p^{(0)} \left(\frac{\partial T^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial(v_j^{(0)} T^{(0)})}{\partial x_j} \right) + \\
\rho^{(0)} c_p^{(0)} \frac{\partial(v_j^{(1)} T^{(0)})}{\partial x_j} = \\
\frac{1}{Pe} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(k^{(0)} \frac{\partial T^{(1)}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k^{(1)} \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_j} \right) \right] + \frac{\gamma - 1}{Re} \tau_{ij}^{(0)} \frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial x_j} \\
\frac{\gamma - 1}{\gamma} \left(\frac{\partial p^{(1)}}{\partial t} + \frac{\partial(v_j^{(1)} p^{(0)})}{\partial x_j} + \frac{\partial(v_j^{(0)} p^{(1)})}{\partial x_j} \right)
\end{aligned} \tag{1.14}$$

• Equation d'état :

$$O(1) : \quad p^{(0)} = \rho^{(0)} T^{(0)} \tag{1.15}$$

$$O(Ma^2) : \quad \frac{p^{(1)}}{p^{(0)}} = \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(0)}} + \frac{T^{(1)}}{T^{(0)}} \tag{1.16}$$

Forme dominante de l'équation de quantité de mouvement (ordre 0) :

$$0 = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial p^{(0)}}{\partial x_i} \tag{1.17}$$

La conclusion est que le terme principal du développement de la pression ne dépend que du temps, soit $p^{(0)} = p^{(0)}(t)$, ce qui signifie que les variations spatiales de la pression statique induites par le mouvement du fluide sont très faibles. On peut donc considérer que la pression s'uniformise instantanément dans tout le domaine. Dans la suite, on considèrera que $p^{(0)}$ est la pression thermodynamique, satisfaisant l'équation des gaz parfaits. Conséquence immédiate : si $p^{(0)}$ et la distribution de température sont connues, alors la loi des gaz parfaits permet de calculer immédiatement la distribution de masse volumique.

Forme dominante des équations de conservation et de l'équation d'état (ordre 1) :

Ces équations sont obtenues en négligeant les termes en $O(Ma^2)$. L'équation de quantité de mouvement est l'équation à l'ordre $O(Ma^2)$ dans laquelle $Ma^2 \rho^{(1)}$ est remplacé par $Ma^2 \rho^{(0)}$ parce que $Ma^2 \rho^{(1)}$ est à l'ordre $O(Ma^4)$.

En omettant les exposants d'ordre zéro (sauf pour la pression), on obtient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i v_j) = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{Ma^2}{Fr} \rho g_i \quad (1.19)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(v_j T)}{\partial x_j} \right) = \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\gamma - 1}{\gamma} \left(\frac{dp^{(0)}}{dt} \right) \quad (1.20)$$

$$p^{(0)}(t) = \rho(x_i, t) T(x_i, t) \quad (1.21)$$

Le problème est qu'il y a plus d'inconnues que d'équations. Cela provient de la décomposition de la pression qui introduit la pression thermodynamique comme inconnue supplémentaire.

- Pour des systèmes ouverts, la pression thermodynamique est la pression ambiante et donc $p^{(0)}(t) = 1, \forall t$.

- Si l'on considère un système fermé de volume Ω limité par une surface d'aire S , plusieurs procédures ont été suggérées, toutes basées sur la conservation de la masse.

La solution la plus simple mathématiquement et la plus simple à implémenter numériquement est celle que nous suggérons dans cette thèse. Elle a prouvé son efficacité en terme de précision, via de multiples comparaisons avec d'autres solutions publiées. Elle consiste à ne raisonner que sur le bilan intégral de conservation de la masse et présente l'avantage de se soustraire de la condition d'imperméabilité ($\vec{V} \cdot \vec{n} = 0$). On écrit donc :

$$\int_{\Omega} \rho(x_i, t) d\Omega = \int_{\Omega} \rho(x_i, 0) d\Omega \quad \forall t \quad (1.22)$$

et si $\rho(x_i, 0) = 1$ (masse volumique uniforme à l'instant initial égale à ρ_0)

$$\int_{\Omega} \rho(x_i, t) d\Omega = \Omega \quad (1.23)$$

En employant la loi des gaz parfaits, on en déduit :

$$\int_{\Omega} \frac{p^{(0)}(t)}{T(x_i, t)} d\Omega = \int_{\Omega} \frac{p(0)}{T(x_i, 0)} d\Omega \quad (1.24)$$

Comme la pression thermodynamique est supposée uniforme dans Ω :

$$p^{(0)}(t) = \frac{p(0) \int_{\Omega} T(x_i, 0) d\Omega}{\int_{\Omega} T(x_i, t) d\Omega} = \frac{p(0)}{\int_{\Omega} \frac{T(x_i, t)}{T_0} d\Omega} \quad (1.25)$$

La pression thermodynamique dépendant du temps, un calcul transitoire est nécessaire.

- La formulation proposée par Paolucci :

En multipliant l'équation de continuité par $C_p T$ et en l'additionnant à l'équation de l'énergie, en utilisant l'équation d'état, en intégrant l'équation obtenue dans Ω et en tenant compte des conditions d'imperméabilité, on arrive à l'expression suivante :

$$\frac{dp^{(0)}}{dt} = \frac{1}{\int_{\Omega} (c_p - \Gamma) d\Omega} \left[\frac{1}{Pe} \int_S k \frac{\partial T}{\partial x_j} dS + p^{(0)}(t) \int_{\Omega} v_j \frac{\partial c_p}{\partial x_j} d\Omega \right] \quad (1.26)$$

avec la condition initiale $p^{(0)}(0) = 1$. Γ a pour expression $\Gamma = (\gamma - 1)/\gamma$.

L'introduction, dans l'équation de l'énergie, de cette expression de la dérivée temporelle de la pression thermodynamique conduit à une forme intégré-différentielle.

L'approximation de Boussinesq : limite de faibles variations de masse volumique

La seule restriction requise pour établir les équations ci-dessus est que $U_0 \ll c_0$. Si les variations de masse volumique, et donc de température, depuis l'état initial sont petites, les développements suivants sont aussi admissibles :

$$\rho = \rho_0 + \rho' \quad p' - p = \rho_0 g_i x_i + p_m \quad T = T_0 + T' \quad (1.27)$$

où p_m est la pression motrice.

La forme dimensionnelle des équations de conservation est alors :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (1.28)$$

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i v_j) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(p' - p) + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (1.29)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(v_j T)}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{dp}{dt} \quad (1.30)$$

$$p(t) = \rho(x_i, t) \frac{R}{M} T(x_i, t) \quad (1.31)$$

où R est la constante universelle des gaz parfaits et M la masse molaire.

En introduisant les expansions et en se limitant à l'ordre dominant, on obtient :

$$\frac{\partial v_j}{\partial x_j} = 0 \quad (1.32)$$

$$\rho_0 \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i v_j) \right) = -\frac{\partial p_m}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \rho' g_i \quad (1.33)$$

$$\rho_0 c_p \left(\frac{\partial T'}{\partial t} + \frac{\partial (v_j T')}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad (1.34)$$

$$\rho' = -\rho_0 \beta_0 T'(x_i, t) \quad (1.35)$$

où $\beta_0 = 1/T_0$ est le coefficient d'expansion thermique d'un gaz parfait.

Ce système est exactement le système associé à l'approximation de Boussinesq.

1.5.2 Annexe 2 : Flux d'interdiffusion moléculaire, effets Dufour et Soret.

Interdiffusion moléculaire :

Le flux d'interdiffusion moléculaire provient du transport d'espèces ayant des enthalpies différentes. Il n'est donc important que si les chaleurs spécifiques des espèces sont très différentes (voir l'expression de la conductivité effective, k_M).

Effet Soret :

Lorsqu'un mélange est soumis à un gradient de température, qu'il s'agisse d'un mélange de gaz ou d'un mélange de liquides, notamment les mélanges de liquides complexes composés de polymères en solution, une séparation des espèces le long du gradient thermique est observée. Cet effet est appelé "thermodiffusion" ou effet Soret. Découvert indépendamment par Ludwig (1856) [51] et Soret (1879) [71] dans les mélanges de liquides, il n'existe toujours pas de théorie satisfaisante permettant d'établir son intensité et sa direction dans un mélange, en dehors de concepts purement phénoménologique (basés en particulier sur la thermodynamique des processus irréversibles) ou de calculs numériques basés sur la dynamique moléculaire hors-équilibre. Chapman (1916) [11] démontra à partir de la théorie cinétique des gaz qu'un gradient de température dans un mélange binaire de gaz provoque la séparation partielle de l'un des constituants. Cet effet se manifeste sans aucun mouvement du fluide (diffusion pure). L'amplitude de la séparation est caractérisée par un coefficient de thermodiffusion (coefficient Soret qui est un coefficient de transport croisé thermique-solutal) : s'il est positif, un constituant de masse molaire supérieure à celle du mélange se déplace vers les surfaces froides. Cependant, le signe de ce coefficient est imprédictible pour les liquides et difficile à mesurer expérimentalement. Il reste donc sujet à controverse.

Pour exprimer qu'un gradient de température induit un effet de déplacement de matière qui s'ajoute au gradient de concentration (loi de Fick), on exprime la densité de flux massique totale du composant "B" d'un mélange binaire par la relation :

$$\vec{J}_B = -\rho_m D_{AB} \nabla W_B - \rho_m W_B (1 - W_B) D_T \nabla T \quad (1.1)$$

avec D_T coefficient de diffusion thermique qui traduit l'effet du gradient de température sur la composition locale (positif ou négatif). On définit le coefficient Soret local par

$$S_T = \frac{D_T}{D_{AB}} = -\frac{1}{W_B(1 - W_B)} \frac{\nabla W_B}{\nabla T} \quad (1.2)$$

et un facteur de thermodiffusion par

$$\alpha_T = \bar{T} S_T \quad (1.3)$$

où \bar{T} est la valeur moyenne de la température.

Effet Dufour :

L'inverse peut se produire : c'est l'effet Dufour (1872) [18] selon lequel un gradient de température s'établit lorsque deux constituants, initialement à la même température, se mélangent par diffusion. Selon les relations d'Onsager, il y a des relations reciproques entre les effets Dufour et Soret (relations réciproques entre phénomènes irréversibles inverses).

Pour exprimer qu'un gradient de concentration induit un flux de chaleur, on exprime la densité de flux de chaleur sous la forme :

$$\vec{q} = -k_m \nabla T - k_D \rho_m \nabla W_B \quad (1.4)$$

avec k_D coefficient Dufour qui traduit l'effet du gradient de concentration sur le flux de chaleur. Cette relation peut aussi s'écrire sous la forme :

$$\vec{q} = -k_m \nabla T + \alpha_D RT \frac{M^2}{M_A M_B} \rho_m D_{AB} \nabla W_B \quad (1.5)$$

où α_D est le coefficient de diffusion thermique (adimensionnel).

Flux de chaleur et de matière :

En incluant l'effet de l'interdiffusion entre espèces et l'effet Dufour, la densité de flux de chaleur s'écrit pour un mélange binaire :

$$\vec{q} = -k_m \nabla T - \rho_m D_{A,B} [h_A \nabla W_A + h_B \nabla W_B] + \alpha_D RT \frac{M^2}{M_A M_B} \rho_m D_{AB} \nabla W_B \quad (1.6)$$

et la densité de flux massique du constituant "B" :

$$\vec{J}_B = -\rho_m D_{A,B} [\nabla W_B + \alpha_D W_B (1 - W_B) \nabla (\ln T)] \quad (1.7)$$

où les derniers termes des membres de droite de ces expressions représentent les effets Dufour et Soret.

1.5.3 Annexe 3 : Approximation de Boussinesq et forme adimensionnelle des équations de conservation.

Hypothèse :

Le développement au premier ordre de la masse volumique d'un mélange binaire de gaz parfaits s'écrit :

$$\rho = \rho_r [1 - \beta_T(T - T_r) - \beta_m(W_2 - W_{2,r})] \quad (1.1)$$

où β_T et β_m sont les coefficients d'expansion isobare thermique et massique. Ils sont définis comme suit :

$$\beta_T = - \left. \frac{1}{\rho_r} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right) \right|_{P_r} \quad (1.2)$$

$$\beta_m = - \left. \frac{1}{\rho_r} \left(\frac{\partial \rho}{\partial W_2} \right) \right|_{P_r} \quad (1.3)$$

ρ et ρ_r ayant pour expression :

$$\rho = \frac{PM}{RT} \quad \text{et} \quad \rho_r = \frac{P_r M_r}{RT_r} \quad (1.4)$$

où la masse molaire de référence s'écrit en fonction des fractions massiques des constituants prises dans les conditions de référence $W_{1,r}$ et $W_{2,r}$:

$$\frac{1}{M_r} = \frac{W_{1,r}}{M_1} + \frac{W_{2,r}}{M_2} \quad (1.5)$$

Le rapport des masses molaires des deux constituants est :

$$M^* = \frac{M_2}{M_1} \quad (1.6)$$

Les relations 1.2 et 1.3 peuvent donc se ré-écrire :

$$\beta_T = \frac{RT_r}{P_r M_r} \left(\frac{P_r M_r}{RT_r^2} \right) = \frac{1}{T_r} \quad (1.7)$$

$$\beta_m = - \left. \frac{RT_r}{P_r M_r} \left(\frac{P_r}{RT_r} \right) \left(\frac{\partial M}{\partial W_2} \right) \right|_{W_{2,r}} = \frac{1 - M^*}{(1 - M^*)W_{2,r} + M^*} \quad (1.8)$$

Conséquence de l'approximation de Boussinesq :

$$\rho = \text{constante} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (1.9)$$

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (1.10)$$

$$\bar{P} = \text{constante} \quad \text{et} \quad \frac{D\bar{P}}{Dt} = 0 \quad (1.11)$$

et

$$\Delta m = 0 \quad (1.12)$$

En géométrie cartésienne 2D, le système d'équations de conservation adimensionnelles se réduit à la forme suivante :

- Equation de continuité :

$$\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} = 0 \quad (1.13)$$

- Equation de quantité mouvement :

$$\frac{\partial(u^*)}{\partial \tau} + \frac{\partial(u^*u^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(v^*u^*)}{\partial y^*} = -\frac{\partial P'_m}{\partial x^*} + Pr \frac{\partial}{\partial x^*}(\mu^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*}) + Pr \frac{\partial}{\partial y^*}(\mu^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*}) \quad (1.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(v^*)}{\partial \tau} + \frac{\partial(u^*v^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(v^*v^*)}{\partial y^*} = & -\frac{\partial P'_m}{\partial y^*} + Pr \frac{\partial}{\partial x^*}(\mu^* \frac{\partial v^*}{\partial x^*}) + Pr \frac{\partial}{\partial y^*}(\mu^* \frac{\partial v^*}{\partial y^*}) \\ & + Pr(Ra_T \theta + Ra_m W_2^*) \end{aligned} \quad (1.15)$$

- Equation de l'énergie :

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \frac{\partial u^* \theta}{\partial x^*} + \frac{\partial v^* \theta}{\partial y^*} = \frac{\partial}{\partial x^*}(k^* \frac{\partial \theta}{\partial x^*}) + \frac{\partial}{\partial y^*}(k^* \frac{\partial \theta}{\partial y^*}) \quad (1.16)$$

- Equation des espèces :

$$\frac{\partial W_2^*}{\partial \tau} + \frac{\partial(u^*W_2^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(v^*W_2^*)}{\partial y^*} = \frac{1}{Le} \frac{\partial}{\partial x^*}(\frac{\partial W_2^*}{\partial x^*}) + \frac{1}{Le} \frac{\partial}{\partial y^*}(\frac{\partial W_2^*}{\partial y^*}) \quad (1.17)$$

Ces équations adimensionnelles font intervenir les nombres de Rayleigh thermique et massique, Ra_T et Ra_m (ou bien leur rapport $N = Ra_T/Ra_m$, appelé généralement "paramètre thermosolutal"), définis ici comme suit :

$$Ra_T = \frac{g\beta_T L^3 \Delta T}{a_r \nu_r} \quad \text{et} \quad Ra_m = \frac{g\beta_m L^3 \Delta W_2}{a_r \nu_r} \quad (1.18)$$

Note : le nombre de Rayleigh massique peut aussi être basé sur $D_{1,2,r}$ au lieu de a_r : il faut alors, dans l'équation 1.15, multiplier Ra_m par $1/Le$

1.5.4 Annexe 4 : Calculs de la pression thermodynamique et de la masse volumique adimensionnelles.

La pression thermodynamique adimensionnelle s'écrit :

$$P^* = \frac{\bar{P}}{P_0} = \frac{\rho_0 \Omega + \Delta m}{\frac{\rho_0 R T_0}{M_0} \int_0^H \int_0^L \frac{M}{RT} dx dy} = \frac{\Omega + \Delta m / \rho_0}{\int_0^H \int_0^L \frac{M}{M_0} \frac{T_0}{T} dx dy} \quad (1.1)$$

Les termes adimensionnels M/M_0 et T_0/T sont d'abord ré-écrits en fonction des variables adimensionnelles.

- terme M/M_0

$$\frac{1/M_0}{1/M} = \frac{\frac{W_{2,0}}{M_2} + \frac{1-W_{2,0}}{M_1}}{\frac{W_2}{M_2} + \frac{1-W_2}{M_1}} \quad (1.2)$$

Il peut se transformer sous la forme suivante en multipliant par M_2 et en introduisant $M^* = M_2/M_1$:

$$\frac{1/M_0}{1/M} = \left(\frac{(1 - M^*)W_{2,0} + M^*}{(1 - M^*)W_2 + M^*} \right) \quad (1.3)$$

La forme adimensionnelle de la fraction massique est ensuite introduite

$$W_2 = W_2^* \Delta W_2 + W_{2,r} \quad \text{et} \quad W_{2,0} = W_{2,0}^* \Delta W_2 + W_{2,r} \quad (1.4)$$

et l'équation 1.3 devient

$$\frac{1/M_0}{1/M} = \frac{(1 - M^*)(W_{2,0}^* \Delta W_2 + W_{2,r}) + M^*}{(1 - M^*)(W_2^* \Delta W_2 + W_{2,r}) + M^*} \quad (1.5)$$

ou encore

$$\frac{1/M_0}{1/M} = \frac{(1 - M^*) \Delta W_2 W_{2,0}^* + (1 - M^*) W_{2,r} + M^*}{(1 - M^*) \Delta W_2 W_2^* + (1 - M^*) W_{2,r} + M^*} \quad (1.6)$$

Finalement on divise l'équation par $(1 - M^*) W_{2,r} + M^*$ et on arrive à :

$$\frac{1/M_0}{1/M} = \frac{\epsilon_m W_{2,0}^* + 1}{\epsilon_m W_2^* + 1} \quad (1.7)$$

où ϵ_m est donnée par l'équation 1.103.

- terme T/T_0

En introduisant l'écart de température adimensionnel θ , ce rapport s'écrit :

$$\frac{T}{T_0} = \frac{\Delta T \theta_0 + T_r}{\Delta T \theta + T_r} \quad (1.8)$$

et compte-tenu de la définition de ϵ_T donnée par l'équation 1.102

$$\frac{T}{T_0} = \frac{\epsilon_T \theta_0 + 1}{\epsilon_T \theta + 1} \quad (1.9)$$

La pression thermodynamique adimensionnelle (équation 1.1) devient alors :

$$P^* = \frac{\bar{P}}{P_0} = \frac{\rho_0 \Omega + \Delta m}{\frac{\rho_0 R T_0}{M_0} \int_0^H \int_0^L \frac{M}{RT} dx dy} = \frac{\Omega + \Delta m / \rho_0}{\int_0^H \int_0^L \left(\frac{\epsilon_T \theta_0 + 1}{\epsilon_T \theta + 1} \right) \left(\frac{\epsilon_m W_{2,0}^* + 1}{\epsilon_m W_2^* + 1} \right) dx dy} \quad (1.10)$$

En introduisant les variables adimensionnelles x^* et y^* et en divisant par L^2 , on obtient :

$$P^* = \frac{A + \Delta m^*}{\int_0^A \int_0^1 \left(\frac{\epsilon_T \theta_0 + 1}{\epsilon_T \theta + 1} \right) \left(\frac{\epsilon_m W_{2,0}^* + 1}{\epsilon_m W_2^* + 1} \right) dx^* dy^*} \quad (1.11)$$

avec

$$\Delta m^* = \frac{\Delta m}{\rho_0 L^2} \quad (1.12)$$

- Expression de $\Delta m / \rho_0 L^2$

La variation de la masse totale peut être écrite comme suit :

$$\Delta m^* = \frac{\sum_i \int_0^t \int_0^{S_i} \rho u_P d\xi_i dt}{\rho_0 L^2} \quad (1.13)$$

La référence de la masse volumique étant ρ_0 , cette relation s'écrit aussi

$$\Delta m^* = \sum_i \int_0^t \int_0^{S_i^*} \rho^* u_P / L d\xi_i^* dt \quad (1.14)$$

En introduisant la vitesse et le temps de référence, u_c et L/u_c , l'équation 1.13 devient :

$$\Delta m^* = \sum_i \int_0^\tau \int_0^{S_i^*} \rho^* u_P^* d\xi_i^* d\tau \quad (1.15)$$

où la vitesse interfaciale adimensionnelle a pour expression :

$$u_P^* = \frac{u_P}{u_c} = \frac{-\frac{D_{1,2}}{(1-W_{2,p})} \frac{\partial W_2}{\partial \vec{n}} \Big|_p}{a_r / L} \quad (1.16)$$

Finalement, on introduit les références $D_{1,2,r}$, ΔW et L :

$$u_P^* = -\frac{D_{1,2}^*}{Le(C_w - W_{2,p}^*)} \frac{\partial W_2^*}{\partial \vec{n}^*} \Big|_p \quad (1.17)$$

où le paramètre adimensionnel C_w caractérisant le flux massique sur une paroi a pour expression :

$$C_w = \frac{1 - W_{2,r}}{\Delta W_2} \quad (1.18)$$

La pression thermodynamique adimensionnelle s'écrit donc (équation 1.107) :

$$P^* = \frac{A + \sum_i \int_0^\tau \int_0^{S_i^*} \frac{-\rho^* D_{1,2}^*}{Le(C_w - W_{2,i}^*)} \frac{\partial W_2^*}{\partial \vec{n}^*} \Big|_p d\xi_i^* d\tau}{\int_0^A \int_0^1 \left(\frac{\epsilon_T \theta_0 + 1}{\epsilon_T \theta + 1}\right) \left(\frac{\epsilon_m W_{2,0}^* + 1}{\epsilon_m W_2^* + 1}\right) dx^* dy^*} \quad (1.19)$$

Chapitre 2

Méthode de résolution numérique

2.1 Introduction

Les algorithmes de résolution numérique mis en oeuvre afin de résoudre les équations établies dans le chapitre I sont décrits dans ce chapitre.

Deux problèmes se posent : l'approximation spatiale des opérateurs aux dérivées partielles et celle, si nécessaire, des opérateurs temporels. Ces deux problèmes, soulevés depuis plus de quarante ans en ce qui concerne la convection naturelle, n'ont pas reçu de solution satisfaisante et unique à ce jour. L'objectif de ce travail de thèse n'a pas été de développer une nouvelle n^{ieme} méthode numérique : il s'agissait plutôt de rechercher, parmi celles existantes, la méthode semblant la mieux appropriée à nos objectifs. Compte-tenu de la variété des méthodes actuellement proposées, il est clair que notre choix a été plutôt arbitraire puisqu'il a reposé, d'une part, sur un code existant au laboratoire et ayant prouvé son efficacité pour les écoulements incompressibles de convection naturelle, mais demandant des modifications profondes et, d'autre part, sur une bibliographie de méthodes jugées par leurs auteurs extrêmement performantes.

L'autre alternative aurait été d'employer un code commercialisé. Notre expérience nous a conduit à rejeter cette alternative, non pas parce que les codes commercialisés donnent des solutions moins précises que celles d'un code de laboratoire mais parce que nous n'avons pas accès au langage "source" : en résumé, ces programmes (Fluent, Comsol, CFX...) sont excellents pour résoudre les équations entrant dans le cadre des modèles proposés par les sociétés de développement. Ils deviennent plutôt inefficaces pour résoudre un problème nécessitant des modifications du code de calcul. De plus, ils ne sont pas "portables" car attachés à un serveur de calcul. Néanmoins, nous avons eu le souci de comparer nos solutions préliminaires (chapitre III) avec celles données par un code commercialisé (Fluent, opérationnel au laboratoire MSME sur plusieurs ordinateurs). Les comparaisons se sont avérées très concluantes pour la convection thermique, à masse volumique constante (approximation de Boussinesq) comme à masse volumique variable (approximation faiblement compressible). Nous en avons conclu que notre code et Fluent produisent des solutions quasiment identiques, ce qui néanmoins ne prouve pas qu'elles soient précises. On a donc comparé nos solutions à celles résultant d'un exercice, simple, de comparaison pour les écoulements de convection naturelle thermique (chapitre III).

Comme le concept d'écoulement "faiblement compressible" signifie aussi effets de variations de masse volumique, le choix de la méthode de résolution pourrait aussi être fondé sur une formulation purement compressible, basée sur la masse volumique (variables ρu , ρv ...etc). La formulation basée sur la pression, quasi-systématiquement appliquée pour les écoulements incompressibles et le plus souvent sous forme conservative, reste néanmoins applicable dans le cadre d'écoulements à très faibles nombre de Mach. C'est ce qu'a révélé un récent "benchmark" (Le Quéré et al., 2005 [46]). La raison est qu'obtenir une solution basée sur la masse volumique est inefficace lorsque le nombre de Mach est très petit, bien que des techniques de pré-conditionnement des systèmes linéaires ou des schémas, en général explicites, avec limiteur de flux aient été développés depuis de nombreuses années.

En conséquence, nous avons adapté un code de calcul basé sur la formulation incompressible et sur la méthode des volumes finis. La procédure consiste principalement à mener une série de mises à jour successives de toutes les variables dépendantes, des itérations internes étant introduites pour traiter le couplage vitesse-pression, comme dans le cas incompressible.

En ce qui concerne la discrétisation spatiale, le choix de la méthode des volumes finis conduit à des systèmes d'équations algébriques un peu plus compliqués à établir que si l'on avait utilisé une méthode de différences finies. L'avantage est que les propriétés de conservation sont, par principe, beaucoup mieux assurées avec une méthode de volumes finis. La méthode des éléments finis possède aussi cette propriété mais elle est beaucoup plus difficile à mettre en oeuvre pour les problèmes considérés dans ce travail. Les coûts calcul sont aussi nettement plus importants compte tenu de la nature des systèmes d'équations algébriques à résoudre (matrices creuses de grande dimension). Les méthodes spectrales, beaucoup plus précises mais aussi beaucoup plus coûteuses, semblent limitées à des configurations académiques ne faisant pas intervenir des conditions aux limites complexes.

Pour les problèmes de convection naturelle - thermique, solutale ou thermosolutale - la littérature montre qu'il convient de s'assurer que la discrétisation spatiale est, au moins, du second ordre. La discrétisation centrée des termes de diffusion ne pose aucun problème. Par contre, assurer cette précision lors de la discrétisation des termes d'advection et de transport est moins simple, notamment quand les problèmes à résoudre sont raides. La procédure mise en oeuvre est détaillée dans ce chapitre.

Enfin, le schéma numérique employé dérivant directement d'un schéma adapté aux écoulements incompressibles, la disposition des variables sur le domaine de calcul est réalisée en adoptant une disposition de type MAC (maillages décalés ou "Mark and Cells" introduite par Harlow et Welch, 1965 [29]). Longtemps considérée comme indispensable afin d'éviter des oscillations spatiales de pression et de vitesse (Pantankar et Spalding, 1972 [59]), cette disposition n'est, aujourd'hui, plus nécessaire et des maillages collocalisés peuvent être utilisés (Fluent, Chénier (2008) [77]).

Ce chapitre est organisé de la façon suivante :

- On écrit d'abord la forme discrète des équations à résoudre sur un maillage

générique en utilisant les notations usuelles (basée sur des points cardinaux), c'est à dire en fonction des points intervenant lors de l'intégration des équations de conservation sur un volume de contrôle ou lors du calcul des propriétés physiques sur les faces ou au centre d'un volume de contrôle. Cette écriture ne dépend pas de la disposition du ou des maillages relativement aux frontières du domaine d'intégration (maillages décalés ou non).

- Le schéma d'intégration temporelle employé est décrit après : cette partie est indépendante de la première partie.
- On expose ensuite l'algorithme de couplage vitesse-pression : cette partie est totalement indépendante des parties a) et b).
- Ces formes discrètes doivent finalement être adaptées au type de maillage retenu : cet aspect technique est reporté dans l'Annexe 1 dans laquelle le lecteur trouvera la forme des équations discrètes (prêtes à être programmées) lorsqu'une disposition de type MAC est employée.

2.2 Discrétisation des équations de conservation

2.2.1 Discrétisation de la forme générale des équations adimensionnées

Chacune des équations de conservation peut s'écrire sous la forme générale suivante :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} = D \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + D \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) + S_\phi \quad (2.1)$$

où D est un nombre sans dimension et Γ un coefficient de diffusion adimensionnel. Ces coefficients et les termes de source des cinq équations de conservation résolues sont reportés dans le tableau 2.1 pour le modèle faiblement compressible et dans le tableau 2.2 pour le modèle de Boussinesq.

Eq.	ϕ	D	Γ	S_ϕ
1	1	0	0	0
2	u	Pr	μ^*	$-\partial p'_m / \partial x + S_x$
3	v	Pr	μ^*	$-\partial p'_m / \partial y - \frac{1}{Fr}(\rho - 1) + S_y$
4	θ	1	k^*	$\frac{\gamma-1}{\gamma \epsilon_T} DP / Dt$
5	W_2	$1/Le$	$D_{1,2}^*$	0

TAB. 2.1 – Coefficients et termes de source des équations du modèle "faible Mach"

Dans ce tableau, les termes de source S_x et S_y dus aux effets de compressibilité ont pour expression :

$$S_x = Pr \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{3} \mu^* \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu^* \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu^* \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \quad (2.2)$$

$$S_y = Pr \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu^* \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{3} \left(\mu^* \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \left(\mu^* \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right] \right] \quad (2.3)$$

Eq.	ϕ	D	Γ	S_ϕ
1	1	0	0	0
2	u	Pr	μ^*	$-\partial p_m / \partial x$
3	v	Pr	μ^*	$-\partial p_m / \partial y + (Ra_T \theta + Ra_m W_2^*) Pr$
4	θ	1	k^*	0
5	W_2	$1/Le$	$D_{1,2}^*$	0

TAB. 2.2 – Coefficients et termes de source du modèle "Boussinesq"

L'intégration de l'équation générale sur un volume de contrôle (Fig. 2.1 centré au point P , dont les frontières sont définies par les points e, w, n, s et d'aire $\Delta x \times \Delta y$) s'écrit en utilisant les notations de Patankar,(1980) [58] :

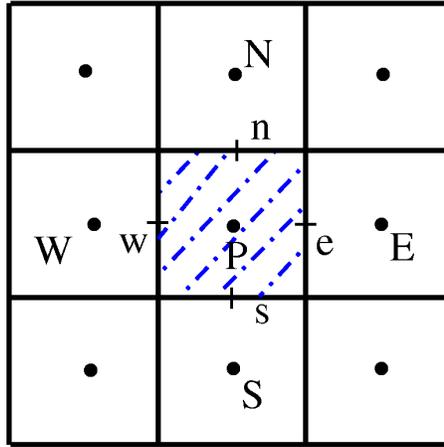


FIG. 2.1 – Volume de contrôle de la méthode des volumes finis.

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx dy + \int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} dx dy + \int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} dx dy =$$

$$D \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dy + D \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx dy + \int_s^n \int_w^e S_\phi dx dy \quad (2.4)$$

où les coordonnées des points $e \dots s$ ne sont pas les mêmes pour les variables scalaires et pour les composantes des vitesses si les grilles sont décalées.

L'intégration des termes de transport est approximée par :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} dx dy \approx \Delta y [(\rho u\phi)_e - (\rho u\phi)_w] \approx \Delta y [(\rho u)_e \phi_e - (\rho u)_w \phi_w] \quad (2.5)$$

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} dx dy \approx \Delta x [(\rho v\phi)_n - (\rho v\phi)_s] \approx \Delta x [(\rho v)_n \phi_n - (\rho v)_s \phi_s] \quad (2.6)$$

Cette approximation constitue la base de la linéarisation des termes non linéaires ($\vec{V} \otimes \vec{V}$). On écrit donc :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} dx dy + \int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho v \phi)}{\partial y} dx dy =$$

$$\Delta y [(\rho u)_e \phi_e - (\rho u)_w \phi_w] + \Delta x [(\rho v)_n \phi_n - (\rho v)_s \phi_s] =$$

$$F_e \phi_e - F_w \phi_w + F_n \phi_n - F_s \phi_s \quad (2.7)$$

où les coefficients $F_e \dots F_s$ sont reportés dans le tableau 2.3.

L'intégration des termes de diffusion conduit à :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dy + \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx dy =$$

$$\Delta y \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] + \Delta x \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] \quad (2.8)$$

Les densités de flux traversant les faces du volume de contrôle sont ensuite approximées au second ordre par des relations du type :

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} \quad (2.9)$$

où l'indice E correspond au point "est" (ou à gauche de P) du maillage sur lequel est définie la variable ϕ (le point e étant situé sur l'interface du volume de contrôle, entre E et P), δx_e représente donc la distance entre E et P , alors que Δx est la distance entre e et w .

En définitive, la forme discrète du terme de diffusion s'écrit :

$$D \left(\int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dy + \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx dy \right) =$$

$$D \left(\Delta y \left[\Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} - \Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_w} \right] + \Delta x \left[\Gamma_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta y_n} - \Gamma_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\delta y_s} \right] \right) =$$

$$D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) + D_n (\phi_N - \phi_P) - D_s (\phi_P - \phi_S) =$$

$$- (D_e + D_w + D_n + D_s) \phi_P + D_e \phi_E + D_w \phi_W + D_n \phi_N + D_s \phi_S \quad (2.10)$$

où les coefficients $D_e \dots D_s$ sont reportés dans le tableau 2.3.

Le terme de source étant un scalaire défini au centre du volume de contrôle, on peut écrire :

$$\int_s^n \int_w^e S_\phi dx dy \approx S_{\phi,P} \Delta x \Delta y \quad (2.11)$$

En définitive, la forme discrète de l'équation de transport de ϕ s'écrit sous la forme suivante :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx dy + F_e\phi_e - F_w\phi_w + F_n\phi_n - F_s\phi_s = -D_p\phi_P + D_e\phi_E + D_w\phi_W + D_n\phi_N + D_s\phi_S + S_{\phi,P}\Delta x\Delta y \quad (2.12)$$

où $D_p = D_e + D_w + D_n + D_s$.

L'équation 2.12 constitue la forme générale d'un système d'équations différentielles

$F_e = \Delta y(\rho u)_e$	$D_e = D\Delta y(\Gamma_e/\delta x_e)$
$F_w = \Delta y(\rho u)_w$	$D_w = D\Delta y(\Gamma_w/\delta x_w)$
$F_n = \Delta x(\rho v)_n$	$D_n = D\Delta x(\Gamma_n/\delta y_n)$
$F_s = \Delta x(\rho v)_s$	$D_s = D\Delta x(\Gamma_s/\delta y_s)$

TAB. 2.3 – Coefficients des équations discrétisées spatialement.

linéaires du premier ordre pour la variation temporelle de ϕ . Il reste à :

- proposer un schéma d'intégration temporel pour ramener ce système différentiel à un système linéaire .
- ce système fait intervenir 9 inconnues : $\phi_e \dots \phi_s, \phi_P \dots \phi_S$. Les quatre premières, issues des termes de transport, ne sont pas définies aux centres des volumes de contrôle. Il faut donc les exprimer en fonction de $\phi_P \dots \phi_S$.

Supposons que l'on puisse écrire $\phi_e = (\phi_E + \phi_P)/2 \dots \phi_s = (\phi_S + \phi_P)/2$. On obtient alors :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx dy = -A'_P\phi_P + A'_E\phi_E + A'_W\phi_W + A'_N\phi_N + A'_S\phi_S + S_{\phi,P}\Delta x\Delta y \quad (2.13)$$

avec

$$\begin{aligned} A'_P &= \frac{1}{2}(2D_p + F_e - F_w + F_n - F_s) \\ A'_E &= \frac{1}{2}(2D_e - F_e) \\ A'_W &= \frac{1}{2}(2D_w + F_w) \\ A'_N &= \frac{1}{2}(2D_n - F_n) \\ A'_S &= \frac{1}{2}(2D_s + F_s) \end{aligned}$$

Ce système différentiel ne fait donc intervenir que 5 inconnues aux centres des volumes de contrôle autour des points $P \dots S$. Pour le transformer en un système linéaire, il faut maintenant discrétiser la dérivée temporelle de $(\rho\phi)$ au point P . La solution la plus simple consiste à écrire :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = \frac{(\rho\phi)_P^{n+1} - (\rho\phi)_P^n}{\Delta t} \quad (2.14)$$

où Δt est le pas d'intégration temporel (qui peut varier avec n). Si tous les termes du second membre de l'équation 2.13 sont évalués au temps t^n , le schéma est explicite. Il est implicite s'ils sont tous évalués au temps t^{n+1} . On écrit donc :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx dy = [(\rho\phi)_P^{n+1} - (\rho\phi)_P^n] \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (2.15)$$

d'où pour un schéma explicite :

$$(\rho\phi)_P^{n+1} = (\rho\phi)_P^n + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y} (-A'_P \phi_P^n + A'_E \phi_E^n + A'_W \phi_W^n + A'_N \phi_N^n + A'_S \phi_S^n) + S_{\phi,P}^n \Delta t \quad (2.16)$$

ou bien

$$(\rho\phi)_P^{n+1} = (\rho\phi)_P^n + (-A_P \phi_P^n + A_E \phi_E^n + A_W \phi_W^n + A_N \phi_N^n + A_S \phi_S^n + S_{\phi,P}^n) \Delta t \quad (2.17)$$

On obtient donc $N_x \times N_y$ équations algébriques permettant de calculer les $(\rho\phi)_P^{n+1}$.

Les coefficients $A_P \dots A_S$, donnés dans le tableau 2.4, seront toujours traités de façon explicite au cours de l'intégration temporelle (linéarisation). Ils sont donc identiques pour les schémas d'intégration explicite ou implicite.

$A_P = \frac{1}{2} \left[\frac{2D}{\Delta x} \left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_e} + \frac{\Gamma_w}{\delta x_w} \right) + \frac{2D}{\Delta y} \left(\frac{\Gamma_n}{\delta y_n} + \frac{\Gamma_s}{\delta y_s} \right) + \frac{1}{\Delta x} [(\rho u)_e - (\rho u)_w] + \frac{1}{\Delta y} [(\rho v)_n - (\rho v)_s] \right]$
$A_E = \frac{1}{2\Delta x} \left(2D \frac{\Gamma_e}{\delta x_e} - (\rho u)_e \right)$
$A_W = \frac{1}{2\Delta x} \left(2D \frac{\Gamma_w}{\delta x_w} + (\rho u)_w \right)$
$A_N = \frac{1}{2\Delta y} \left(2D \frac{\Gamma_n}{\delta y_n} - (\rho v)_n \right)$
$A_S = \frac{1}{2\Delta y} \left(2D \frac{\Gamma_s}{\delta y_s} - (\rho v)_s \right)$

TAB. 2.4 – Coefficients des équations discrétisées spatialement.

Remarques :

- Δx et Δy ne sont pas constants si le maillage n'est pas uniforme. Dans la suite, cette notation générale sera adaptée à la variable traitée (scalaire ou composante de

la vitesse).

- Si le maillage est uniforme, alors $\delta x_e = \delta x_w = \Delta x$ et $\delta y_n = \delta y_s = \Delta y$.
- Les expressions de ces distances en fonction de x_i et y_j (Eqs. 2.1 et 2.2) pour des maillages non-uniformes et décalés sont données dans l'Annexe 1.
- Si le coefficient de diffusion est constant, alors $\Gamma_e = \Gamma_w = \Gamma_n = \Gamma_s = \Gamma$.
- Les indices en lettre minuscule indiquant les faces du volume de contrôle, il faut exprimer les coefficients de diffusion sur ces faces ainsi que les densités de flux massiques (ρu et ρv).
- Pour un écoulement incompressible, l'adimensionalisation conduit à $\rho = 1$.

Si l'intégration temporelle est implicite, l'équation 2.17 devient :

$$(\rho\phi)_P^{n+1} = (\rho\phi)_P^n + (-A_P\phi_P^{n+1} + A_E\phi_E^{n+1} + A_W\phi_W^{n+1} + A_N\phi_N^{n+1} + A_S\phi_S^{n+1} + S_{\phi,P}^n)\Delta t \quad (2.18)$$

équation générale d'un système linéaire pentadiagonal de dimension $N_x \times N_y$.

Remarque : Si l'écoulement est stationnaire, alors les équations 2.17 et 2.18 se réduisent au système linéaire :

$$A_P\phi_P = A_E\phi_E + A_W\phi_W + A_N\phi_N + A_S\phi_S + S_{\phi,P} \quad (2.19)$$

ce qui correspond aussi à la forme discrétisée d'une équation de Poisson lorsque $u = v = 0$.

2.3 Discrétisation des termes de source

Compte-tenu des hypothèses introduites dans le modèle, les équations de continuité et de conservation de l'espèce 2 ne contiennent pas de termes de source (Tableau 2.1).

Avec l'approche vitesse-pression, la transposition d'un code "incompressible" à un code "faiblement compressible" conduit à discrétiser les termes de source suivants dans les projections de la conservation de quantité de mouvement :

- les dérivées de la fluctuation de pression motrice (comme dans le cas incompressible)
- la partie compressible des composantes de $\nabla \cdot \bar{\tau}$
- le terme de poussée d'Archimède.

Dans l'équation de l'énergie, le seul terme de source est la dérivée temporelle de la pression thermodynamique (pression spatialement uniforme).

2.3.1 Discrétisation des termes de source d'équation du mouvement

Composante- u de la vitesse :

- Terme source S_x (équation 2.2).

L'intégration sur le volume de contrôle du terme source dû à la compressibilité conduit à :

$$\begin{aligned}
 & \int_s^n \int_w^e S_x dx dy \\
 &= Pr \Delta y \left[\left(\frac{\mu \partial u}{3 \partial x} \right)_e - \left(\frac{\mu \partial u}{3 \partial x} \right)_w - \left(\frac{2\mu \partial v}{3 \partial y} \right)_e + \left(\frac{2\mu \partial v}{3 \partial y} \right)_w \right] + Pr \Delta x \left[\left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right)_n - \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right)_s \right] \\
 &= \frac{1}{3} Pr \Delta y \left[\mu_e \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_e - \mu_w \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_w \right] - \frac{2}{3} Pr \Delta y \left[\mu_e \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)_e - \mu_w \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)_w \right] \\
 &\quad + Pr \Delta x \left[\mu_n \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)_n - \mu_s \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)_s \right] \quad (2.20)
 \end{aligned}$$

Puis, on discrétise les dérivées partielles intervenant dans le membre de droite de cette équation. On obtient la forme générale :

$$\begin{aligned}
 & \int_s^n \int_w^e S_x dx dy = \frac{1}{3} Pr \Delta y \left[\mu_e \left(\frac{u_E - u_P}{\delta x_e} \right) - \mu_w \left(\frac{u_P - u_W}{\delta x_w} \right)_w \right] \\
 & - \frac{2}{3} Pr \Delta y \left[\mu_e \left(\frac{v_{ne} - v_{se}}{\delta y_e} \right) - \mu_w \left(\frac{v_{nw} - v_{sw}}{\delta y_w} \right) \right] + Pr \Delta x \left[\mu_n \left(\frac{v_{ne} - v_{nw}}{\delta x_n} \right) - \mu_s \left(\frac{v_{se} - v_{sw}}{\delta x_s} \right) \right] \\
 & \quad (2.21)
 \end{aligned}$$

L'expression de l'équation 2.21 en fonction des coordonnées des points E, P, W, ne, nw, se, sw est donnée dans l'Annexe 1 de ce chapitre.

- Le gradient de la fluctuation de la pression motrice selon x est calculé par :

$$\frac{\partial p'_m}{\partial x} = \frac{p'_{m,E} - p'_{m,W}}{(\delta x_e + \delta x_w)} \quad (2.22)$$

Composante- v de la vitesse :

- Terme source S_y (équation 2.3).

On procède formellement de la même façon pour intégrer S_y sur le volume de contrôle :

$$\begin{aligned}
& \int_s^n \int_w^e S_y dx dy \\
&= Pr \Delta y [(\mu \frac{\partial u}{\partial y})_e - (\mu \frac{\partial u}{\partial y})_w] + Pr \Delta x [(\frac{\mu \partial v}{3 \partial y})_n - (\frac{\mu \partial v}{3 \partial y})_s - (\frac{2 \mu \partial u}{3 \partial x})_n + (\frac{2 \mu \partial u}{3 \partial x})_s] \\
&= Pr \Delta y [\mu_e (\frac{\partial u}{\partial y})_e - \mu_w (\frac{\partial u}{\partial y})_w] + \frac{1}{3} Pr \Delta x [\mu_n (\frac{\partial v}{\partial y})_n - \mu_s (\frac{\partial v}{3 \partial y})_s] \\
&\quad - \frac{2}{3} Pr \Delta x [\mu_n (\frac{\partial u}{\partial x})_n - \mu_s (\frac{\partial u}{\partial x})_s] \quad (2.23)
\end{aligned}$$

Après discrétisation de tous les termes :

$$\begin{aligned}
& \int_s^n \int_w^e S_y dx dy = Pr \Delta y [\mu_e (\frac{u_{ne} - u_{se}}{\delta y_e}) - \mu_w (\frac{u_{nw} - u_{sw}}{\delta y_w})] \\
&+ \frac{1}{3} Pr \Delta x [\mu_n (\frac{v_N - v_P}{\delta y_n}) - \mu_s (\frac{v_P - v_S}{\delta y_s})] - \frac{2}{3} Pr \Delta x [\mu_n (\frac{u_{ne} - u_{nw}}{\delta x_n}) - \mu_s (\frac{u_{se} - u_{sw}}{\delta x_s})] \\
&\quad (2.24)
\end{aligned}$$

- Le gradient de la fluctuation de la pression motrice selon y est calculé par :

$$\frac{\partial p'_m}{\partial y} = \frac{p'_{m,N} - p'_{m,S}}{(\delta x_n + \delta x_s)} \quad (2.25)$$

- Dans le terme de poussée d'Archimède, la masse volumique est évaluée au centre du volume de contrôle. Soit :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{1}{Fr} (\rho - 1) dx dy = \Delta x \Delta y \frac{1}{Fr} (\rho_P - 1) \quad (2.26)$$

Si les maillages sont décalés, le point P n'est pas le point de calcul de la masse volumique : il faut donc interpoler ρ pour obtenir ρ_P .

2.3.2 Discrétisation du terme instationnaire de pression thermodynamique dans l'équation de l'énergie

Ce terme temporel est traité explicitement. Son expression discrète s'écrit :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\gamma - 1}{\epsilon_T \gamma} \frac{d\bar{P}}{dt} dx dy = \frac{\gamma - 1}{\epsilon_T \gamma} \left(\frac{\bar{P}^n - \bar{P}^{n-1}}{\Delta t^n} \right) \Delta x \Delta y \quad (2.27)$$

2.4 Discrétisation des conditions aux limites

Les conditions aux limites sur les frontières fluide-solide peuvent s'écrire sous la forme générale :

$$a \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = b \phi + c \quad (2.28)$$

- si $a = 0$, ce sont des conditions de Dirichlet,
- si $b = 0$, $c \neq 0$, ce sont des conditions de Neuman,
- si a , b et $c \neq 0$, ce sont des conditions de Fourier.

• Traitement des variables scalaires

Pour les variables scalaires, deux points, l'un à l'intérieur, ϕ_i , et l'autre à l'extérieur, ϕ_e , du domaine de calcul sont placés de part et d'autre d'une frontière.

L'équation 2.28 peut s'écrire :

$$a \left(\frac{\phi_i - \phi_e}{\Delta \vec{n}} \right) = b (\phi_e + \phi_i)/2 + c \quad (2.29)$$

ce qui peut transformer en

$$\phi_e = \frac{\frac{a}{\Delta \vec{n}} - \frac{b}{2}}{\frac{a}{\Delta \vec{n}} + \frac{b}{2}} \quad , \quad \phi_i = \frac{c}{\frac{a}{\Delta \vec{n}} + \frac{b}{2}} \quad (2.30)$$

où $\Delta \vec{n}$ représente la distance normale à une frontière, elle peut être positive ou négative.

• Traitement des vitesses pariétales

A partir de la figure 2.7, on peut constater que, si les maillages sont décalés, les composantes normales de la vitesse sont calculées sur les frontières du domaine : vitesses $u_p(1)$ à $u_p(N_y + 1)$ sur les parois verticales, vitesses $v_p(1)$ à $v_p(N_x + 1)$ sur les parois horizontales.

Pour ces composantes de vitesse, la formule 2.28 peut s'écrire :

$$a \left(\frac{\phi_i - \phi_p}{\Delta \vec{n}} \right) = b \phi_p + c \quad (2.31)$$

où ϕ_p et ϕ_i sont les valeurs de la composante normale de la vitesse le long d'une paroi et sur la première ligne intérieure. On en déduit :

$$\phi_p = \frac{\frac{a}{\Delta \vec{n}}}{\frac{a}{\Delta \vec{n}} + b} \quad , \quad \phi_i = \frac{c}{\frac{a}{\Delta \vec{n}} + b} \quad (2.32)$$

2.5 Interpolation des propriétés physiques

Les mélanges considérés étant newtoniens, leurs propriétés physiques ne dépendent que des variables thermodynamiques T , W et \bar{P} . Ces variables dépendantes sont calculées au centre des volumes de contrôle alors que, par principe, les flux sont calculés aux centres de leurs faces : il faut donc exprimer les propriétés physiques aux points e , n , s et w en fonction de celles calculables aux points E , N , S et W . Comme la procédure utilisée est la même dans chacune des directions, il suffit de donner les expressions des coefficients de diffusion en un point, e par exemple. Avec un modèle faiblement compressible, il est aussi nécessaire de calculer la masse volumique aux centres des faces.

- Viscosité dynamique

On utilise une interpolation linéaire pour calculer les valeurs de la viscosité intervenant dans les termes de sources (Eqs. 2.2 et 2.3). En notant x_P , x_e et x_E les abscisses des points P , e et E on écrit alors :

$$\frac{\mu_e - \mu_P}{x_e - x_P} = \frac{\mu_E - \mu_P}{x_E - x_P} \quad (2.33)$$

et donc

$$\mu_e = \mu_P + (\mu_E - \mu_P) \left(\frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} \right) = \mu_P + (\mu_E - \mu_P) \left(\frac{\Delta x/2}{\delta x_e} \right) \quad (2.34)$$

- Conductivité thermique et coefficient de diffusion massique.

La conductivité thermique et le coefficient de diffusion massique sont des coefficients de flux (loi de Fourier et de Fick). Pour assurer la continuité des flux thermique et massique aux interfaces des volumes de contrôle, on écrit sur l'interface "e" (par exemple) :

$$q_e = k_e \frac{T_E - T_P}{\delta x_e} = k_P \frac{T_e - T_P}{\Delta x/2} = k_E \frac{T_E - T_e}{\delta x_e - \Delta x/2} \quad (2.35)$$

La conductivité thermique est donc estimée aux interfaces à l'aide de la moyenne harmonique :

$$\frac{1}{k_e} = \frac{\Delta x/\delta x_e}{k_E} + \frac{1 - \Delta x/2\delta x_e}{k_P} \quad (2.36)$$

qui devient lorsque le maillage est uniforme et collocalisé :

$$\frac{2}{k_e} = \frac{1}{k_E} + \frac{1}{k_P} \quad (2.37)$$

De même, le coefficient de diffusion massique à l'interface "e" s'écrit

$$\frac{1}{D_e} = \frac{\Delta x/\delta x_e}{D_E} + \frac{1 - \Delta x/2\delta x_e}{D_P} \quad (2.38)$$

- Masse volumique.

Une équation en moyenne linéaire est établie pour calculer de la masse volumique aux noeuds où sont calculées les composantes des vitesses. Soit :

$$\frac{\rho_e - \rho_P}{x_e - x_P} = \frac{\rho_E - \rho_P}{x_E - x_P} \quad (2.39)$$

et donc

$$\rho_e = \rho_P + (\rho_E - \rho_P) \left(\frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} \right) \quad (2.40)$$

2.6 Méthode d'intégration de la variation de la masse du mélange.

Toute la masse du constituant transférée dans la cavité entre les instants $t = 0$ et t s'obtient par l'intégration temporelle et spatiale des flux surfaciques sur toutes les mailles s_k entourant le domaine.

$$\Delta m_v(t) = \int_0^t \int_{\Delta s_k} \rho u \, ds_k dt \approx \sum_1^n \sum_k \rho u(s_k, t^n) \Delta s_k \Delta t \quad (2.41)$$

où $k = 1 \dots (N_x + N_y)$ (N_x et N_y définissant le maillage), l'exposant "n" caractérise une itération temporelle et s_k est le point de coordonnée curviligne sur l'une des quatre parois (figure 2.2).

Une méthode des trapèzes a été utilisée pour effectuer l'intégration numérique temporelle de la masse du constituant transférée depuis ou sur une maille pendant l'intervalle de temps Δt (de l'itération $n - 1$ à l'itération n). Soit :

$$\Delta m_v(s_k, \Delta t) = \frac{1}{2} (\rho^n u^n + \rho^{n-1} u^{n-1})|_{paroi} \Delta t \quad (2.42)$$

donc la masse totale transférée pendant Δt s'écrit :

$$\Delta m_v(\Delta t) = \sum_k \Delta m_v(s_k, \Delta t) \Delta s_k \quad (2.43)$$

L'équation 2.41 peut donc aussi s'écrire :

$$\Delta m_v(t^n) = \Delta m_v(t^{n-1}) + \Delta m_v(\Delta t) \quad (2.44)$$

2.7 Intégration temporelle : méthode des directions alternées

La méthode des directions alternées ou méthode ADI due à Peaceman et Rachford (1955) [63] (Alternating Direction Implicit method), inconditionnellement stable pour les équations de diffusion linéaires bidimensionnelles ou tridimensionnelles, consiste en un double (ou triple en 3D) balayage spatial basé sur l'introduction

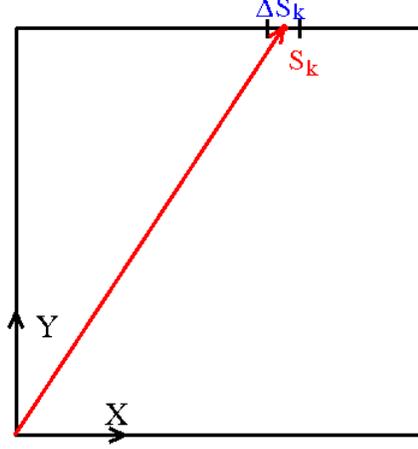


FIG. 2.2 – Position du point de coordonnée s_k sur les parois de la cavité.

d'une étape temporelle intermédiaire qui permet de ramener un système pentadiagonal en deux systèmes tridiagonaux pouvant être résolus par une méthode directe très efficace : l'algorithme de Thomas (voir Annexe 4).

Partant de l'équation générale :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + S_\phi \quad (2.45)$$

que l'on ré-écrit sous la forme :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho u - \Gamma\frac{\partial}{\partial x}\right)\phi + \frac{\partial}{\partial y}\left(\rho v - \Gamma\frac{\partial}{\partial y}\right)\phi = S_\phi \quad (2.46)$$

on définit deux opérateurs H et V (H pour horizontal et V pour vertical) :

$$H = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho u - \Gamma\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad (2.47)$$

$$V = \frac{\partial}{\partial y}\left(\rho v - \Gamma\frac{\partial}{\partial y}\right) \quad (2.48)$$

Pour ramener les systèmes d'équations différentielles du premier ordre en temps, résultant de la discrétisation spatiale, en une série de systèmes tridiagonaux à résoudre à chaque pas de temps, l'intégration temporelle est effectuée en deux étapes (pas de temps $\delta t/2$) en introduisant les variables intermédiaires ϕ^* et ρ^* :

$$\frac{\rho^* \phi^* - \rho^n \phi^n}{\delta t/2} + H^n \phi^* = -V^n \phi^n + S_\phi^n \quad (2.49)$$

$$\frac{\rho^{n+1} \phi^{n+1} - \rho^* \phi^*}{\delta t/2} + V^n \phi^{n+1} = -H^n \phi^* + S_\phi^n \quad (2.50)$$

où les opérateurs et le terme de source sont évalués à partir de valeurs calculées au pas de temps précédent.

Les champs de masse volumique à l'étape intermédiaire " * " et au temps " n + 1 " sont calculés par la formule de Taylor au premier ordre en temps. Soit

$$\rho^* = \rho^n + 0.5\delta t^n \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad \text{et} \quad \rho^{n+1} = \rho^* + 0.5\delta t^{n+1} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.51)$$

On en déduit :

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\delta t^{n+1}} = \frac{\rho^n - \rho^{n-1}}{\delta t^n} \quad (2.52)$$

donc

$$\rho^{n+1} = \rho^n \left(1 + \frac{\delta t^{n+1}}{\delta t^n}\right) - \rho^{n-1} \frac{\delta t^{n+1}}{\delta t^n} \quad (2.53)$$

et

$$\rho^* = \frac{\rho^n + \rho^{n+1}}{2} \quad (2.54)$$

Le système d'équations 2.49 et 2.50 peut aussi s'écrire (indice supérieur " n + 1 " de δt omis) :

$$\left(\frac{\rho^*}{\delta t/2} + H^n\right)\phi^* = \left(\frac{\rho^n}{\delta t/2} - V^n\right)\phi^n + S_\phi^n \quad (2.55)$$

$$\left(\frac{\rho^{n+1}}{\delta t/2} + V^n\right)\phi^{n+1} = \left(\frac{\rho^*}{\delta t/2} - H^n\right)\phi^* + S_\phi^n \quad (2.56)$$

2.7.1 Evaluation l'erreur de discrétisation temporelle.

Si on combine les deux équations 2.55 et 2.56 en éliminant les valeurs intermédiaires ϕ^* , on trouve :

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\rho^*}{0.5\delta t} + H^n\right)\left(\frac{\rho^{n+1}}{0.5\delta t} + V^n\right)\phi^{n+1} - \left(\frac{\rho^*}{0.5\delta t} + H^n\right)S_\phi \\ & = \left(\frac{\rho^*}{0.5\delta t} - H^n\right)\left(\frac{\rho^n}{0.5\delta t} - V^n\right)\phi^n + \left(\frac{\rho^*}{0.5\delta t} - H^n\right)S_\phi \end{aligned} \quad (2.57)$$

Cette équation peut se transformer comme suit :

$$\begin{aligned} & \left[\rho^{n+1} + 0.5\delta t V^n + 0.5\delta t \frac{\rho^{n+1}}{\rho^*} H^n + \frac{H^n V^n}{\rho^*} (0.5\delta t)^2\right]\phi^{n+1} \\ & = \left[\rho^n - 0.5\delta t V^n - 0.5\delta t \frac{\rho^n}{\rho^*} H^n + \frac{H^n V^n}{\rho^*} (0.5\delta t)^2\right]\phi^n + S_\phi \delta t \end{aligned} \quad (2.58)$$

ou encore

$$\begin{aligned} \frac{\rho^{n+1}\phi^{n+1} - \rho^n\phi^n}{\delta t} + \frac{V^n(\phi^{n+1} + \phi^n)}{2} + \frac{H^n(\rho^{n+1}\phi^{n+1} + \rho^n\phi^n)}{2\rho^*} \\ = S_\phi + \frac{0.5\delta t H^n V^n (\phi^n - \phi^{n+1})}{2\rho^*} \end{aligned} \quad (2.59)$$

Finalement, l'équation 2.57 devient

$$\begin{aligned} \frac{\rho^{n+1}\phi^{n+1} - \rho^n\phi^n}{\delta t} + \frac{V^n(\phi^{n+1} + \phi^n)}{2} + \frac{H^n(\phi^{n+1} + \phi^n)}{2} \\ = S_\phi + \frac{0.5\delta t H^n V^n (\phi^n - \phi^{n+1})}{2\rho^*} + \frac{0.5\delta t (\phi^n - \phi^{n+1})}{2} H^n \end{aligned} \quad (2.60)$$

Comme

$$\phi^n - \phi^{n+1} = -O(\delta t) \quad (2.61)$$

cette équation peut s'écrire aussi sous la forme de Crank-Nicolson avec une erreur à l'ordre 2 en temps :

$$\frac{\rho^{n+1}\phi^{n+1} - \rho^n\phi^n}{\delta t} + \frac{V^n(\phi^{n+1} + \phi^n)}{2} + \frac{H^n(\phi^{n+1} + \phi^n)}{2} = S_\phi - O(\delta t^2) \quad (2.62)$$

2.7.2 Forme finale de l'équation discrète

Après toutes ces opérations, on obtient d'abord :

$$\begin{aligned} H^n\phi = F_e\phi_e - F_w\phi_w - D_e(\phi_E - \phi_P) + D_w(\phi_P - \phi_W) \\ = (a_E + a_W)\phi_P - a_E\phi_E - a_W\phi_W \end{aligned} \quad (2.63)$$

$$\begin{aligned} V^n\phi = F_n\phi_n - F_s\phi_s - D_n(\phi_N - \phi_P) + D_s(\phi_P - \phi_S) \\ = (a_N + a_S)\phi_P - a_N\phi_N - a_S\phi_S \end{aligned} \quad (2.64)$$

où les coefficients $D_e\dots D_w$ et $F_e\dots F_w$ sont donnés dans le tableau III. Les coefficients $a_E\dots a_W$ sont donnés par les équations 2.11 à 2.14.

En définitive, les équations 2.55 et 2.56 peuvent s'écrire sous forme de deux systèmes tridiagonaux correspondant aux deux étapes de la méthode ADI :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\rho_p^* \Delta \Omega}{0.5 \Delta t} + a_E + a_W\right) \phi_P^* - a_E \phi_E^* - a_W \phi_W^* \\ = a_N \phi_N^n + a_S \phi_S^n + \left[\frac{\rho_p^n \Delta \Omega}{0.5 \Delta t} - (a_N + a_S)\right] \phi_P^n + S_\phi \Delta \Omega \end{aligned} \quad (2.65)$$

et

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\rho_p^{n+1} \Delta \Omega}{0.5 \Delta t} + a_N + a_S \right) \phi_P^{n+1} - a_N \phi_N^{n+1} - a_S \phi_S^{n+1} \\ & = a_E \phi_E^* + a_W \phi_W^* + \left[\frac{\rho_p^* \Delta \Omega}{0.5 \Delta t} - (a_E + a_W) \right] \phi_P^* + S_\phi \Delta \Omega \quad (2.66) \end{aligned}$$

où $\Delta \Omega$ représente l'aire d'une maille associée à la variable ϕ .

2.7.3 Choix du pas de temps

Pour un problème instationnaire non-linéaire, le nombre de Courant-Friedrichs-Lewy, (1928) [15] (nombre de CFL), défini pour une résolution explicite d'une équation de transport, est un indicateur précieux sur la qualité des solutions transitoires obtenues. L'emploi de méthodes d'intégration temporelle implicites (non-conditionnellement stables pour des équations non linéaires) permet d'obtenir des solutions stationnaires précises avec des CFL de l'ordre de 30 mais les solutions instationnaires sont fortement dégradées. Cette technique, utilisable avec Fluent par exemple (Laaroussi, 2008 [39]), est très efficace pour réduire les temps calculs lorsque les équations de conservation sont résolues séquentiellement et lorsqu'une solution stationnaire existe. La méthode des directions alternées employée dans le cadre de ce travail est semi-implicite. Cela signifie que le gain de temps calcul obtenu par la résolution de systèmes tridiagonaux a un revers : le pas de temps maximal est nécessairement plus petit que celui possible avec une méthode implicite. Cette contrainte est donc pénalisante lorsque seule la solution stationnaire est recherchée, notamment dans le cadre de l'approximation de Boussinesq.

Dans le cas des écoulements faiblement compressibles simulés numériquement à partir d'une formulation en variables primitives (u , v et p'_m), l'intérêt d'un schéma implicite est moindre parce que la masse volumique est toujours traitée explicitement. Néanmoins, on peut supposer que la contrainte sur le pas de temps est réduite par rapport à celle du schéma ADI. Nous nous sommes donc toujours basés sur la condition CFL suivante pour estimer le pas de temps :

$$\max \left(\frac{u_{i,j}^n \Delta t^n}{\Delta x_i} + \frac{v_{i,j}^n \Delta t^n}{\Delta y_i} \right) \leq 1 \quad (2.67)$$

D'un point de vue pratique, satisfaire cette condition lorsque le pas de temps n'est pas constant et lorsque le maillage n'est pas uniforme demande un effort de programmation : pour un maillage donné, il faut calculer à chaque pas de temps le champ de CFL et vérifier que sa valeur maximale ne dépasse pas une certaine valeur (de l'ordre de 5 avec un schéma ADI). Si cette valeur est dépassée, il faut alors réduire le pas de temps de l'itération suivante.

2.7.4 Critère de convergence vers la solution stationnaire

Pour chaque variable (u , v , θ , W_2), la convergence vers une solution stationnaire (si elle existe) est basée sur la norme $L2$. Pour chaque variable ϕ , on calcule à chaque

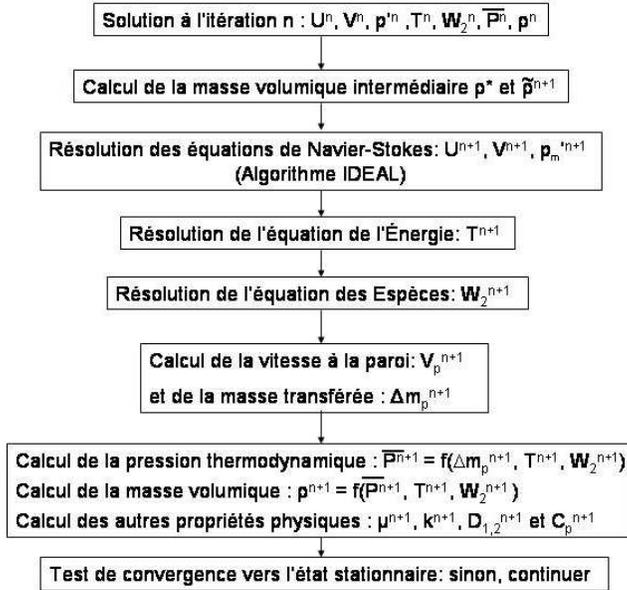


FIG. 2.3 – Schéma de résolution du modèle faible Mach.

pas de temps l'écart :

$$E = \frac{1}{N_x N_y} \sqrt{\sum_{i,j} (\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n)^2} \quad (2.68)$$

L'état stationnaire est supposé atteint lorsque la relation suivante est satisfaite :

$$E_u + E_v + E_\theta + E_{W_2} \leq \epsilon \quad (2.69)$$

La valeur de ϵ a été fixée à 10^{-6} pour tous les cas admettant une solution stationnaire.

2.8 Algorithme global de résolution des équations de conservation

Le processus pour résoudre le système d'équations est le suivant :

On part de la solution obtenue au temps t^n .

1. On calcule d'abord des premières approximations de la masse volumique (équations 2.53 et 2.54) parce que la méthode numérique est basée sur une résolution en variables primitives et non pas sur ρu , ρv , $\rho \theta$... Les masses volumique intermédiaires ρ^* et $\bar{\rho}^{n+1}$ sont obtenues.
2. On résoud ensuite les équations du mouvement (conservations de la masse et de la quantité de mouvement) en utilisant, à cette étape, l'algorithme IDEAL pour traiter

le couplage vitesse-pression. On obtient u^{n+1} , v^{n+1} et $p_m^{\prime n+1}$.

3. Résolution de l'équation de l'énergie $\implies \theta^{n+1}$

4. Résolution de l'équation de conservation de l'espèce "2" $\implies W_2^{n+1}$

5. Calcul des vitesses normales aux parois et de la variation de la masse totale dans la cavité entre les temps t^n et t^{n+1}

6. Calcul de la pression thermodynamique, de la masse volumique et des autres propriétés thermophysiques au temps t^{n+1}

7. Test de convergence global (équation 2.69). S'il n'est jamais satisfait : deux causes possibles.

a) le pas de temps utilisé pour la boucle temporelle (boucle externe) est trop grand (la méthode ADI n'est pas inconditionnellement stable pour la boucle externe)

b) la solution stationnaire n'existe pas (nombres de Froude ou de Rayleigh super-critiques, conditions aux limites dépendant du temps)

2.9 Algorithme de couplage vitesse-pression : IDEAL

L'algorithme IDEAL (Inner Doubly Iterative Efficient Algorithm for Linked Equations) a été proposé récemment par Sun et al., (2008-2009) [73], [74], [75] et [76] (université Jiaotong de Xi'an, Chine). Cet algorithme a été testé pour une grande variété de problèmes de convection forcée ou de convection naturelle stationnaires, en géométries cartésiennes 2D [73] et [74] ou 3D [75] et [76]. Entrant dans la famille des algorithmes de correction de pression appliqués à une résolution séquentielle de l'équation de continuité et des projections sur les axes de coordonnées de l'équation de conservation de quantité de mouvement, ses auteurs ont eu pour objectif principal de trouver un algorithme permettant d'améliorer la convergence (et donc de réduire les coûts de calcul) des multiples améliorations de SIMPLE (une dizaine tels que SIMPLER, SIMPLEC, PISO, CLEAR...) pour des problèmes raides. Pour être résolu avec une bonne précision, il faut nécessairement utiliser des maillages très fins compte-tenu de la précision théorique de la discrétisation spatiale (au mieux du second ordre). Il s'avère alors que la convergence de ces algorithmes de couplage vitesse-pression se dégrade fortement et que la conservation de la masse devient difficile à satisfaire avec une erreur inférieure à $\approx 10^{-5}$. Les raisons sont multiples, dont la dégradation du conditionnement (ou diminution du nombre de condition) des systèmes linéaires générés. Cette dégradation est d'autant plus nette que l'algorithme de couplage est, par construction, entâché d'une erreur ne permettant pas aux composantes de vitesse calculées de bien satisfaire, in fine, la conservation de la masse. Ce qui typiquement le cas avec SIMPLE.

Compte-tenu de la forme du modèle faiblement compressible proposé dans ce travail, satisfaire la conservation de la masse à tout instant avec une excellente précision est indispensable. Si l'objectif principal des travaux de Sun et al. est la réduction des coûts de calculs requis pour obtenir une solution stationnaire précise, les nôtres sont de calculer très précisément la masse du mélange de gaz en régime instationnaire. Nous visons de satisfaire à tout instant l'équation de continuité avec une précision de l'ordre de $\approx 10^{-9}$.

IDEAL est une nouvelle modification de SIMPLE. Cet algorithme est supposée

satisfaire idéalement le couplage vitesse-pression, c'est à dire que la pression et la vitesse satisfont le mieux possible les équations de continuité et de quantité de mouvement à la sortie de la boucle itérative interne. Au vu de notre expérience, IDEAL permet effectivement de beaucoup mieux satisfaire la conservation de la masse que SIMPLE et SIMPLER, algorithmes également programmés dans le code de calcul et utilisés au début de la préparation de la thèse. Afin de mieux comprendre les différences entre IDEAL et ces deux algorithmes, le lecteur pourra se reporter à l'annexe I où ils sont décrits. En plus de cette propriété, il évite d'introduire des coefficients de sous-relaxation dans le calcul de la correction de pression, coefficients difficiles à déterminer empiriquement dans le cas de problèmes raides.

Comme tous les autres algorithmes de couplage vitesse-pression générés afin d'éviter les deux approximations principales introduites dans SIMPLE (champ de pression initial "arbitraire", résolution incomplète de l'équation du mouvement lors du calcul des corrections de vitesse, voir l'appendice I), l'objectif d'IDEAL, basé sur deux boucles itératives, est de :

- 1/ Trouver la pression initiale la plus cohérente possible avec le champ de vitesse initial (u_0, v_0) . Dans notre cas, ce champ de vitesse est celui calculé au pas de temps précédent puisque les équations sont toujours résolues sous leur forme instationnaire (soit $u_0 = u^n$ et $v_0 = v^n$). Si le champ de pression initial ($P_0 = P^n$) était très proche de sa valeur finale (c'est à dire si u_0, v_0 et P_0 vérifiaient presque exactement le système d'équations), on pourrait résoudre l'équation de quantité de mouvement afin de calculer de nouvelles valeurs (intermédiaires) des composantes de vitesse avec une très petite erreur. En définitive, une plus grande vitesse de convergence et une meilleure stabilité devraient être assurées parce que les oscillations inhérentes à SIMPLE seraient supprimées sans avoir recours à des coefficients de sous-relaxation excessifs (typiquement de l'ordre de 0,6 lorsque les termes de transport sont de l'ordre de grandeur des termes de diffusion et de l'ordre de 0,8 – 0,9 pour les problèmes raides).
- 2/ Pour que vitesse et pression satisfassent le mieux possible les équations du mouvement à la sortie de la boucle itérative interne, il faut toujours résoudre complètement l'équation de conservation de la quantité mouvement lors du calcul des corrections de vitesse (c'est à dire éviter la seconde approximation introduite dans SIMPLE). A ce niveau, IDEAL propose une amélioration meilleure que celles introduites dans les autres algorithmes (SIMPLER, SIMPLEC, PISO...).

Deux boucles itératives similaires sont introduites dans l'algorithme IDEAL. La première boucle sert à trouver un champ de pression P^* tel que u^*, v^* et P^* vérifient au mieux les équations de continuité et du mouvement. Ces calculs sont effectués en conservant les valeurs des coefficients des systèmes linéaires calculés à partir des vitesses initiales ($u_0 = u^n$ et $v_0 = v^n$). Le but de la deuxième boucle est d'actualiser les champs de vitesse et de pression lorsque le temps est incrémenté de Δt^{n+1} .

L'algorithme de la première boucle

Comme avec SIMPLER, des vitesses temporaires (t) sont composées de pseudo-vitesses qui sont calculées de la même façon :

$$u_P^t = \hat{u}_P + [P_P^t - P_E^t] \frac{A_u}{a_P} \quad v_P^t = \hat{v}_P + [P_P^t - P_N^t] \frac{A_v}{a_P} \quad (2.70)$$

avec

$$a_P \hat{u}_P = \sum a_{nb} u_{nb}^0 + b_u \quad (2.71)$$

$$a_P \hat{v}_P = \sum a_{nb} v_{nb}^0 + b_v \quad (2.72)$$

Avec ces pseudo-vitesses, on peut calculer une pression temporaire P^t en utilisant l'équation de continuité pour les vitesses u^t et v^t . Soit :

$$a_P P_P^t = a_E P_E^t + a_W P_W^t + a_N P_N^t + a_S P_S^t + b_{p^t} \quad (2.73)$$

avec

$$b_{p^t} = \left(\frac{\rho_P^n - \rho_P^{n+1}}{\Delta t} \right) \Delta X \Delta Y + \Delta Y [(\rho \hat{u})_w - (\rho \hat{u})_e] + \Delta X [(\rho \hat{v})_s - (\rho \hat{v})_n] \quad (2.74)$$

Une fois la pression P^t obtenue, les vitesses temporaires sont modifiées en utilisant l'équation 2.70. Comme les pseudo-vitesses sont calculées à partir des vitesses initiales, les solutions satisfont donc explicitement les équations de quantité de mouvement et de continuité. Si on s'arrête là, la pression P^t peut être encore loin de la solution exacte. Pour améliorer cette solution, un processus itératif pour renouveler les valeurs initiales est mis en route. On revient au début en prenant la solution u^t , v^t et P^t comme valeurs initiales mais on garde les mêmes valeurs des coefficients. Les pseudo-vitesses sont mises à jour avec ces nouvelles données.

$$a_P \hat{u}_P^t = \sum a_{nb} \hat{u}_{nb}^t + b_u \quad (2.75)$$

$$a_P \hat{v}_P^t = \sum a_{nb} \hat{v}_{nb}^t + b_v \quad (2.76)$$

donc, les vitesses peuvent être encore améliorées avec ces valeurs. Si le même processus est répété au cours de N_1 itérations, on devrait obtenir une solution qui satisfait quasiment toutes les équations. La pression obtenue à ce niveau est sauvegardée en la supposant exacte.

On peut ensuite résoudre l'équation de quantité de mouvement avec ce champ de pression pour trouver les vitesses.

L'algorithme de la deuxième boucle

L'objectif de la deuxième boucle est de trouver une solution convergée en vitesse et pression qui doit satisfaire toutes les équations. Le processus de la deuxième boucle est identique à celui de la première boucle : la seule différence est que les composantes u^* et v^* sont prises comme valeurs initiales. Les pseudo-vitesses sont mises à jour par une méthode itérative. A partir des équations 2.75 et 2.76, l'effet des composantes de vitesse u^* et v^* aux points voisins est bien pris en compte. Cela

a pour conséquence de rendre le schéma quasiment implicite. En bouclant ce processus N_2 fois jusqu'à atteindre une erreur résiduelle très faible, on peut considérer que les champs de pression et de vitesse deviennent cohérents.

Les deux boucles d'IDEAL se ressemblent mais l'objectif est complètement différent : la première consiste à trouver la pression P^* la plus correcte possible. Ensuite, on peut résoudre l'équation de quantité de mouvement avec cette pression. La deuxième boucle consiste alors à coupler vitesses et pression pour trouver une solution satisfaisant les équations de continuité et de quantité de mouvement avec une précision avoisinant le zéro machine.

Algorithme IDEAL

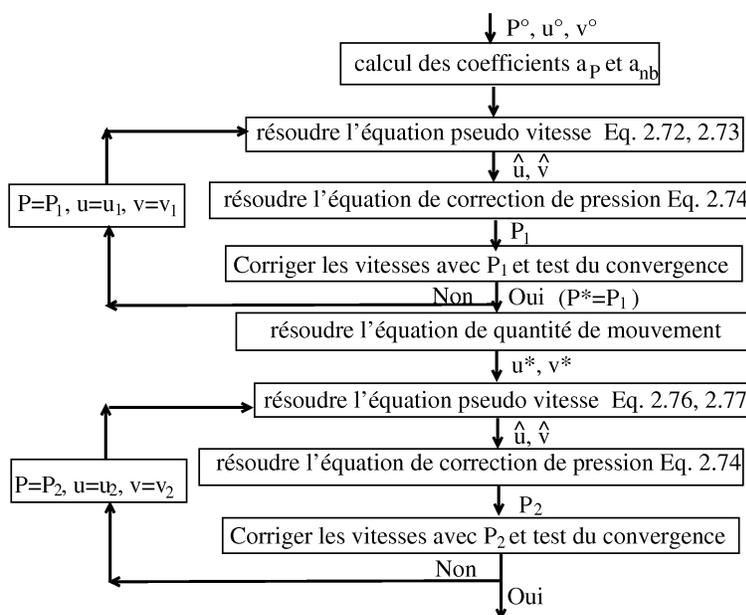


FIG. 2.4 – Organigramme de l'algorithme IDEAL

1. Initialisation par u_0 et v_0
2. Calcul des coefficients avec u_0 et v_0
3. Calcul des pseudo-vitesses temporaires \hat{u}^t et \hat{v}^t
4. Calcul de la pression temporaire P_1^t
5. Correction des vitesses avec P_1^t
6. Retour à l'étape 3 jusqu'à atteindre un résidu $R_1 \implies$ on obtient P^*
7. Résoudre l'équation de quantité de mouvement pour u^* et v^* en prenant P^*
8. Calcul des pseudo-vitesses temporaires \hat{u}^t et \hat{v}^t
9. Calcul de la pression temporaire P_2^t
10. Correction des vitesses avec P_2^t
11. Retour à l'étape 8 jusqu'à atteindre un résidu $R_2 \ll R_1 \implies$ on obtient u^{n+1} , v^{n+1} et p_m^{n+1} .

12. Conserver ces solutions comme valeurs initiales pour le pas de temps suivant.

2.9.1 Utilisation de la méthode ADI pour résoudre l'équation de la fluctuation de pression motrice.

L'équation elliptique de la fluctuation de pression motrice p'_m est déduite de l'équation de continuité (Eq. 2.13). Elle peut aussi s'écrire :

$$H p'_m + V p'_m = S_{p'} \quad (2.77)$$

Avec les notations du paragraphe précédent, p'_m est égale à P_1^t au cours de la première boucle itérative et à P_2^t au cours de la seconde.

Pour résoudre ce système d'équations algébriques pentadiagonal (en 2D), la méthode ADI est utilisée comme méthode de résolution itérative d'un système linéaire (Lascaux et Théodor, 1986 [41]). Un opérateur $\Delta I = 1/(0.5 \delta t')$ est introduit dans le processus de résolution. $\delta t'$ n'a pas le sens d'un temps réel et peut prendre une valeur très supérieure à Δt car l'équation de la pression est linéaire : il s'ensuit que la méthode ADI est inconditionnellement stable.

L'équation de la fluctuation de pression est donc résolue par le double balayage :

$$(H + \Delta I)p_m^{l*} = (\Delta I - V)p_m^n + S_{p'} \quad (2.78)$$

$$(V + \Delta I)p_m^{n+1} = (\Delta I - H)p_m^{l*} + S_{p'} \quad (2.79)$$

Le critère de convergence est basé sur la norme $L2$ (Eq. 2.68) avec des résidus $R_1 \approx 10^{-6}$ pour la première boucle interne et $R_2 \approx 10^{-9}$ pour la seconde.

2.10 Conclusion

Nous avons profondément modifié un code de calcul existant au laboratoire MSME (équipe TCM). Ce code, basé sur la méthode des volumes finis appliquée à des maillages structurés et décalés, avait fait la preuve de son efficacité pour résoudre des problèmes de convection naturelle ou mixte en régime instationnaire. Les approximations de Boussinesq et de propriétés physiques constantes étaient admises. Notre contribution au développement de ce code a été de :

- étendre la méthode numérique au traitement des équations de conservation écrites dans le cadre de l'approximation faiblement compressible pour l'étude de la convection naturelle en cavité de mélanges binaires de gaz parfaits,
- introduire des procédures de calcul des variations de toutes les propriétés physiques,

- implémenter un nouvel algorithme pour traiter plus efficacement le couplage vitesse-pression,
- introduire une méthode de calcul de l'évolution de la masse de gaz contenue dans la cavité qui satisfait la loi des gaz parfaits.

Nous avons ainsi contribué à élaborer un code de calcul qui devrait permettre de simuler numériquement toute une série de problèmes nouveaux. Après l'avoir validé sur un certain nombre de cas tests (chapitre III), nous présenterons quelques résultats originaux dans les chapitres IV et V.

2.11 ANNEXES

ANNEXE 1 : Maillage du domaine d'intégration.

La résolution du système d'équations couplées, dont les variables dépendantes sont notées $(u, v, \phi$ et $\rho)$, est effectuée sur trois grilles décalées : les variables dépendantes scalaires sont calculées sur la grille principale et les composantes de la vitesse le sont sur des grilles décalées (Harlow et Welch, 1965 [29]).

Le maillage recouvrant le domaine d'intégration et comportant $N_x \times N_y$ mailles (et donc $(N_x + 1) \times (N_y + 1)$ noeuds) est défini par :

$$x_i = \frac{(i-1)}{N_x} - \frac{\xi_x}{2\pi} \sin\left[\frac{2\pi(i-1)}{N_x}\right], \quad i = 1, N_x + 1 \quad (2.1)$$

$$y_j = \frac{(j-1)A}{N_y} - \frac{\xi_y A}{2\pi} \sin\left[\frac{2\pi(j-1)}{N_y}\right] \quad j = 1, N_y + 1 \quad (2.2)$$

où x_i et y_j sont les coordonnées des noeuds et ξ_x et ξ_y sont les coefficients d'expansion. Ils varient entre -1 et 1 . Lorsque $0 \leq \xi \leq 1$, le maillage sinusoidal est symétrique, resserré près des parois. Par contre, il est resserré au centre de la cavité si $-1 \leq \xi \leq 0$. Les dimensions des mailles sont notées $\Delta x_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ et $\Delta y_{j+1} = y_{j+1} - y_j$.

Avec la méthode des volumes finis collocalisée, toutes les variables dépendantes sont calculées au centre des mailles (points $P_{i,j}$ de coordonnées $(x_{i-1} + x_i)/2$ et $(x_{j-1} + y_j)/2$ sur la figure 2.5).

Si la méthode n'est pas collocalisée, afin d'éviter des oscillation de pression, il faut aussi définir deux maillages décalés pour les deux composantes de vitesse. Cette aspect est traité dans la suite de cette Annexe.

Discretisation des équations sur des maillages décalés

(a) Quantités scalaires

Une maille de calcul des variables dépendantes scalaires $(p'_m, \theta, W_2, \bar{P}, \rho)$ et des coefficients de diffusion est représentée ci-dessous (figure 2.6) :

(b) Composante-x de la vitesse

Ce terme doit être intégré sur une maille décalée appartenant au maillage de la composante u de la vitesse de surface $\Delta\Omega = \delta x(i)\Delta Y(J)$ (figure 2.7). On l'écrit d'abord sous la forme :

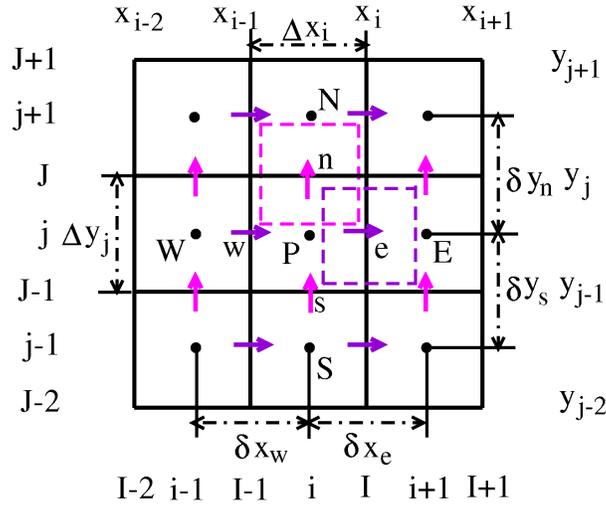


FIG. 2.5 – Maillage décalé

	N	S	E	W	P	Δx_i	Δy_i	
u	$\frac{x_i}{2}$ $\frac{y_j+y_{j+1}}{2}$	$\frac{x_i}{2}$ $\frac{y_{j-2}+y_{j-1}}{2}$	$\frac{x_{i+1}}{2}$ $\frac{y_{j-1}+y_j}{2}$	$\frac{x_{i-1}}{2}$ $\frac{y_{j-1}+y_j}{2}$	$\frac{x_i}{2}$ $\frac{y_{j-1}+y_j}{2}$	$\frac{x_{i+1}-x_{i-1}}{2}$	$y_j - y_{j-1}$	
v	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ y_{j+1}	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ y_{j-1}	$\frac{x_i+x_{i+1}}{2}$ y_j	$\frac{x_{i-2}+x_{i-1}}{2}$ y_j	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ y_j	$x_i - x_{i-1}$	$\frac{y_{j+1}-y_{j-1}}{2}$	
T	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ $\frac{y_j+y_{j+1}}{2}$	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ $\frac{y_{j-2}+y_{j-1}}{2}$	$\frac{x_i+x_{i+1}}{2}$ $\frac{y_{j-1}+y_j}{2}$	$\frac{x_{i-2}+x_{i-1}}{2}$ $\frac{y_{j-1}+y_j}{2}$	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ $\frac{y_{j-1}+y_j}{2}$	$x_i - x_{i-1}$	$y_j - y_{j-1}$	
	n	s	e	w	δx_e	δx_w	δy_n	δy_s
u	x_i y_j	x_i y_{j-1}	$\frac{x_i+x_{i+1}}{2}$ $\frac{y_{j-1}+y_j}{2}$	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ $\frac{y_{j-1}+y_j}{2}$	$x_{i+1} - x_i$	$x_i - x_{i-1}$	$\frac{y_{j+1}-y_{j-1}}{2}$	$\frac{y_j-y_{j-2}}{2}$
v	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ $\frac{y_j+y_{j+1}}{2}$	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ $\frac{y_j+y_{j-1}}{2}$	x_i y_j	x_{i-1} y_j	$\frac{x_{i+1}-x_{i-1}}{2}$	$\frac{x_i-x_{i-2}}{2}$	$y_{j+1} - y_j$	$y_j - y_{j-1}$
T	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ y_j	$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}$ y_{j-1}	x_i $\frac{y_{j-1}+y_j}{2}$	x_{i-1} $\frac{y_{j-1}+y_j}{2}$	$\frac{x_{i+1}-x_{i-1}}{2}$	$\frac{x_i-x_{i-2}}{2}$	$\frac{y_{j+1}-y_{j-1}}{2}$	$\frac{y_j-y_{j-2}}{2}$

TAB. 2.5 – Coordonnées des points des maillages décalés en fonction de x_i et y_j

où les 6 dérivées partielles peuvent aussi s'exprimer en fonction des indices et distances représentés sur la figure 2.7 par :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_e &= \frac{u(I+1, j) - u(I, j)}{\Delta X(I+1)} \\ \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_w &= \frac{u(I, j) - u(I-1, j)}{\Delta X(I)} \\ \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)_e &= \frac{v(i+1, J) - v(i+1, J-1)}{\Delta Y(J)} \\ \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)_w &= \frac{v(i, J) - v(i, J-1)}{\Delta Y(J)} \end{aligned}$$

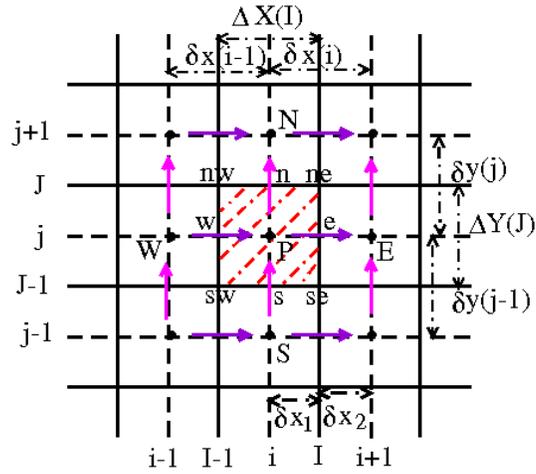


FIG. 2.6 – Maillage des quantités scalaires

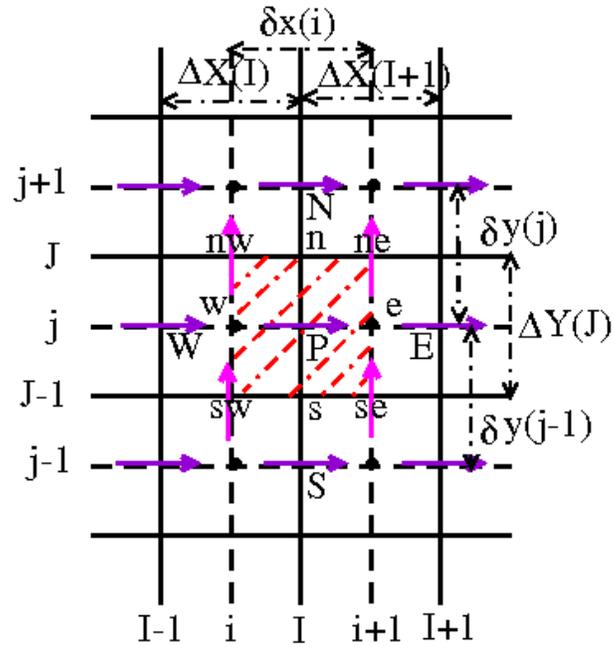


FIG. 2.7 – Maillage pour la composante horizontale de vitesse

$$\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_n = \frac{v(i+1, J) - v(i, J)}{\delta x(i)}$$

$$\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_s = \frac{v(i+1, J-1) - v(i, J-1)}{\delta x(i)}$$

(c) Composante-y de la vitesse

On procède formellement de la même façon pour intégrer l'équation 2.3 sur le volume de contrôle $\Delta\Omega = \Delta X(I)\delta y(j)$ (figure 2.8) correspondant à la composante

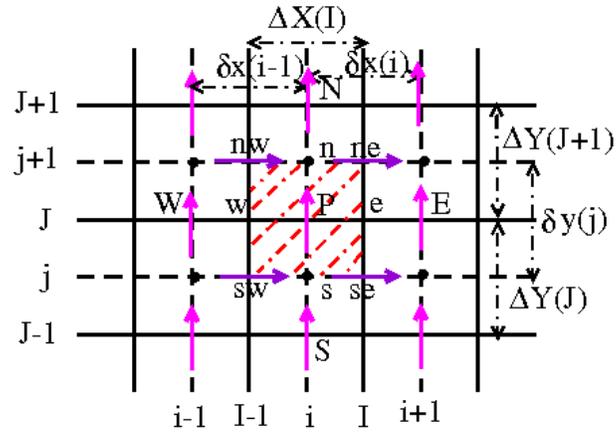


FIG. 2.8 – Maillage pour la composante verticale de vitesse

v . Soit :

Discrétisation des dérivées partielles de u et de v :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_e &= \frac{u(I, j+1) - u(I, j)}{\delta y(j)} \\ \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_w &= \frac{u(I-1, j+1) - u(I-1, j)}{\delta y(j)} \\ \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_n &= \frac{u(I, j+1) - u(I-1, j+1)}{\Delta X(I)} \\ \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_s &= \frac{u(I, j) - u(I-1, j)}{\Delta X(I)} \\ \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)_n &= \frac{v(i, J+1) - v(i, J)}{\Delta Y(J+1)} \\ \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)_s &= \frac{v(i, J) - v(i, J-1)}{\Delta Y(J)} \end{aligned}$$

Annexe 2 : Discrétisation des termes d'advection et de transport

Les termes d'advection et de transport font intervenir des coefficients du type (ρu) et (ρv) sur les faces des volumes de contrôle au lieu de u et v dans le cas incompressible (Tableau 2.4)

Si l'on écrit par exemple :

$$(\rho u)_e \approx \rho_e u_e \approx \left(\frac{\rho_E + \rho_P}{2} \right) u_e \quad (2.1)$$

alors le schéma de discrétisation des termes de transport dérive immédiatement de celui utilisé dans le cas incompressible.

Pour renforcer la stabilité numérique des schémas centrés ou décentrés du second ordre (CDS, UDS2 ou QUICK par exemple), il faut assurer une dominance diagonale des matrices (Hayase et al. 1992 [30]). La discrétisation des termes convectifs a donc été mise en oeuvre de telle sorte que la structure principale des équations discrétisées soit celle du schéma amont du premier ordre (UDS1), dont les termes correspondant sont évalués implicitement alors que les termes supplémentaires générés par la discrétisation du second ordre sont regroupés dans des termes de source évalués explicitement. Soit :

$$F_e \phi_e = [F_e \phi_e]^{UDS1} + ([F_e \phi_e]^{CDS} - [F_e \phi_e]^{UDS1})$$

Discrétisation des termes convectifs pour le schéma du premier ordre amont (UDS1)

Ce schéma consiste simplement à estimer la valeur de ϕ à l'interface d'un volume de contrôle par la valeur du noeud amont selon la direction de la vitesse de l'écoulement. Si on considère l'interface e , la valeur de ϕ sur cette interface prend la valeur amont du maillage si la vitesse est positive ou, au contraire, la valeur aval du point de calcul si la vitesse est négative. Cela se traduit par l'expression suivante :

$$\begin{aligned} [F_e \phi_e]^{UDS1} &= \phi_P[[F_e, 0]] - \phi_E[[-F_e, 0]] \\ [F_w \phi_w]^{UDS1} &= \phi_W[[F_w, 0]] - \phi_P[[-F_w, 0]] \\ [F_n \phi_n]^{UDS1} &= \phi_P[[F_n, 0]] - \phi_N[[-F_n, 0]] \\ [F_s \phi_s]^{UDS1} &= \phi_S[[F_s, 0]] - \phi_P[[-F_s, 0]] \end{aligned}$$

Remarque : l'opérateur $[[\]]$ signifie que l'on prend la valeur absolue maximale entre les deux valeurs entre crochets.

Les termes convectifs dans l'équation 2.12 se transforment alors en :

$$\begin{aligned} [F_e \phi_e - F_w \phi_w + F_n \phi_n - F_s \phi_s]^{UDS1} \\ = \phi_P[[F_e, 0]] - \phi_E[[-F_e, 0]] - \phi_W[[F_w, 0]] + \phi_P[[-F_w, 0]] \\ + \phi_P[[F_n, 0]] - \phi_N[[-F_n, 0]] - \phi_S[[F_s, 0]] + \phi_P[[-F_s, 0]] \quad (2.2) \end{aligned}$$

en groupant les coefficients pour le point P, on obtient :

$$\begin{aligned}
& [F_e\phi_e - F_w\phi_w + F_n\phi_n - F_s\phi_s]^{UDS1} \\
& = \phi_P([F_e, 0] + [-F_w, 0] + [F_n, 0] + [-F_s, 0]) \\
& \quad - \phi_E[-F_e, 0] - \phi_W[F_w, 0] - \phi_N[-F_n, 0] - \phi_S[F_s, 0] \quad (2.3)
\end{aligned}$$

Discrétisation des termes convectifs au deuxième ordre (CDS)

Dans le cas du schéma centré du second ordre (CDS), ϕ à une interface donnée est estimée par une interpolation linéaire entre les valeurs aux noeuds voisins de cette interface, indépendamment du sens de la vitesse de l'écoulement. Dans ce cas, on peut écrire :

$$\begin{aligned}
([F_e\phi_e]^{CDS} - [F_e\phi_e]^{UDS1}) & = (F_e \frac{(\phi_E + \phi_P)}{2} - \phi_P[F_e, 0] + \phi_E[-F_e, 0]) \\
& = -(\frac{|F_e|}{2}\phi_P - \frac{|F_e|}{2}\phi_E) \quad (2.4)
\end{aligned}$$

et de façon similaire pour les autres termes :

$$\begin{aligned}
([F_w\phi_w]^{CDS} - [F_w\phi_w]^{UDS1}) & = (F_w \frac{(\phi_P + \phi_W)}{2} - \phi_W[F_w, 0] + \phi_P[-F_w, 0]) \\
& = -(\frac{|F_w|}{2}\phi_W - \frac{|F_w|}{2}\phi_P) \quad (2.5)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
([F_n\phi_n]^{CDS} - [F_n\phi_n]^{UDS1}) & = (F_n \frac{(\phi_N + \phi_P)}{2} - \phi_P[F_n, 0] + \phi_N[-F_n, 0]) \\
& = -(\frac{|F_n|}{2}\phi_P - \frac{|F_n|}{2}\phi_N) \quad (2.6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
([F_s\phi_s]^{CDS} - [F_s\phi_s]^{UDS1}) & = (F_s \frac{(\phi_P + \phi_S)}{2} - \phi_S[F_s, 0] + \phi_P[-F_s, 0]) \\
& = -(\frac{|F_s|}{2}\phi_S - \frac{|F_s|}{2}\phi_P) \quad (2.7)
\end{aligned}$$

Les termes de source générés par le schéma de discrétisation des termes de transport sont :

$$\begin{aligned}
S_{sch} & = ([F_e\phi_e]^{CDS} - [F_e\phi_e]^{UDS1}) + ([F_w\phi_w]^{CDS} - [F_w\phi_w]^{UDS1}) \\
& \quad + ([F_n\phi_n]^{CDS} - [F_n\phi_n]^{UDS1}) + ([F_s\phi_s]^{CDS} - [F_s\phi_s]^{UDS1}) \\
& = \frac{|F_e|}{2}(\phi_P - \phi_E) - \frac{|F_w|}{2}(\phi_W - \phi_P) + \frac{|F_n|}{2}(\phi_P - \phi_N) - \frac{|F_s|}{2}(\phi_S - \phi_P) \quad (2.8)
\end{aligned}$$

Forme générale de la discrétisation spatiale

En remplaçant tous les termes dans l'équation 2.12, on obtient :

$$\begin{aligned}
 \int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx dy + \phi_P([F_e, 0] + [-F_w, 0] + [F_n, 0] + [-F_s, 0]) \\
 - \phi_E[-F_e, 0] - \phi_W[F_w, 0] - \phi_N[-F_n, 0] - \phi_S[F_s, 0] = \\
 - \phi_P(D_e + D_w + D_n + D_s) + D_e\phi_E + D_w\phi_W + D_n\phi_N + D_s\phi_S \\
 + \int_s^n \int_w^e (S_\phi + S_{sch}) dx dy \quad (2.9)
 \end{aligned}$$

Soit

$$\begin{aligned}
 \int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx dy \\
 + \phi_P([F_e, 0] + [-F_w, 0] + [F_n, 0] + [-F_s, 0] + D_e + D_w + D_n + D_s) = \\
 \phi_E(D_e + [-F_e, 0]) + \phi_W(D_w + [F_w, 0]) + \phi_N(D_n + [-F_n, 0]) \\
 + \phi_S(D_s + [F_s, 0]) + \int_s^n \int_w^e (S_\phi + S_{sch}) dx dy \quad (2.10)
 \end{aligned}$$

où les coefficients $a_E \dots a_W$ ont pour définition :

$$a_E = D_e + [-F_e, 0] \quad (2.11)$$

$$a_W = D_w + [F_w, 0] \quad (2.12)$$

$$a_N = D_n + [-F_n, 0] \quad (2.13)$$

$$a_S = D_s + [F_s, 0] \quad (2.14)$$

En introduisant le coefficient a_P correspondant au centre d'une maille et défini par :

$$a_P = [F_e, 0] + [-F_w, 0] + [F_n, 0] + [-F_s, 0] + D_e + D_w + D_n + D_s \quad (2.15)$$

l'équation générale de transport devient :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx dy + \phi_P a_P = \phi_E a_E + \phi_W a_W + \phi_N a_N + \phi_S a_S + \int_s^n \int_w^e (S_\phi + S_{sch}) dx dy \quad (2.16)$$

ANNEXE 3 : Algorithmes SIMPLE et SIMPLER

a) SIMPLE, Patankar et Spalding, 1972 [59]

En variables primitives, le traitement du couplage vitesse-pression présente des difficultés à cause de l'absence d'équation explicite gouvernant le champ de pression statique lorsque l'hypothèse d'incompressibilité est introduite. Après avoir discrétisé les équations de conservation de la quantité de mouvement sur tout le domaine de calcul, le terme de pression est déplacé dans le terme source et la pression devient alors un paramètre à ajuster de façon à satisfaire l'équation de continuité. En effet, pour que le champ de vitesse obtenu en résolvant les équations du mouvement vérifie la conservation de la masse, il faut que le champ de pression initial soit correct. L'algorithme SIMPLE a pour fonction de déterminer itérativement un terme correctif à ajouter à la pression initiale et, ainsi, de déterminer un nouveau champ de pression en tout point du domaine. La vitesse est ensuite corrigée.

Les équations pour les composantes u et v de la vitesse peuvent s'écrire sous une autre forme en séparant le gradient de pression du terme source. Le terme instationnaire est intégré dans les coefficient a_p et b . Avec la pression initiale de l'itération n , P^* , l'équation 2.16 dans l'ANNEXE 2 pour les vitesses est transformée sur un maillage décalé en

$$a_P u_P^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + b_u + A_u (P_P^* - P_E^*) \quad (2.1)$$

$$a_P v_P^* = \sum a_{nb} v_{nb}^* + b_v + A_v (P_P^* - P_N^*) \quad (2.2)$$

où A_u et A_v sont les aires des interfaces d'une maille de contrôle pour les deux composantes de vitesse.

La solution intermédiaire u^* et v^* ne satisfait que l'équation de quantité de mouvement, la conservation de la masse n'étant pas assurée à cause de l'hypothèse faite sur la pression. Des corrections de pression et de vitesse sont donc nécessaires : elles consistent à coupler toutes les équations. Blosch et al.(1993) [9] montrent que satisfaire l'équation de continuité est la condition de convergence la plus importante et la plus contraignante lorsqu'une méthode de couplage de vitesse et de pression est employée. Pour obtenir une solution exacte, une correction de pression P' et des corrections de vitesses u' et v' sont introduites. La pression et les composantes de vitesse corrigées peuvent s'exprimer sous la forme :

$$P = P^* + P', \quad u = u^* + u', \quad v = v^* + v'$$

La solution "exacte" de l'équation de quantité de mouvement s'écrit :

$$a_P (u_P^* + u_P') = \sum a_{nb} (u_{nb}^* + u_{nb}') + b_u + A_u [(P_P^* + P_P') - (P_E^* + P_E')] \quad (2.3)$$

$$a_P (v_P^* + v_P') = \sum a_{nb} (v_{nb}^* + v_{nb}') + b_v + A_v [(P_P^* + P_P') - (P_N^* + P_N')] \quad (2.4)$$

Après soustraction des équations 2.1 et 2.2 des équations 2.3 et 2.4, on obtient des équations de correction pour les composantes u' et v' dans lesquelles les termes de source ont disparus. Soient :

$$a_P u'_p = \sum a_{nb} u'_{nb} + A_u (P'_P - P'_E) \quad (2.5)$$

$$a_P v'_p = \sum a_{nb} v'_{nb} + A_v (P'_P - P'_N) \quad (2.6)$$

On remarque que deux effets interviennent pour corriger les vitesses : l'un est dû à l'influence des points voisins et l'autre provient de la correction de pression. Avec l'algorithme SIMPLE, on considère que le premier effet est négligeable.

Il s'agit de la première approximation, essentielle, pour mettre en oeuvre l'algorithme SIMPLE.

$$\sum a_{nb} u'_{nb} = 0 \quad \text{et} \quad \sum a_{nb} v'_{nb} = 0$$

donc les équations 2.5 et 2.6 deviennent :

$$u'_P = [P'_P - P'_E] \frac{A_u}{a_P} \quad (2.7)$$

$$v'_P = [P'_P - P'_N] \frac{A_v}{a_P} \quad (2.8)$$

et

$$u_P = u_P^* + [P'_P - P'_E] \frac{A_u}{a_P} \quad (2.9)$$

$$v_P = v_P^* + [P'_P - P'_N] \frac{A_v}{a_P} \quad (2.10)$$

$$P_P = P_P^* + P'_P \quad (2.11)$$

Maintenant, la procédure pour trouver la correction de pression P' constitue le problème principal. Si on suppose que le champ de vitesse final satisfait exactement l'équation de continuité, on peut écrire que

$$\left(\frac{\rho_P^{n+1} - \rho_P^n}{\Delta t} \right) \Delta X \Delta Y + \Delta Y [(\rho u)_e - (\rho u)_w] + \Delta X [(\rho v)_n - (\rho v)_s] = 0 \quad (2.12)$$

On remplace u , v par u^* , v^* et P' dans cette équation et on regroupe tous les termes connus dans un terme source, $b_{p'}$

$$a_p P'_P = a_E P'_E + a_W P'_W + a_N P'_N + a_S P'_S + b_{p'} \quad (2.13)$$

avec

$$b_{p'} = \left(\frac{\rho_P^n - \rho_P^{n+1}}{\Delta t} \right) \Delta X \Delta Y + \Delta Y [(\rho u^*)_w - (\rho u^*)_e] + \Delta X [(\rho v^*)_s - (\rho v^*)_n] \quad (2.14)$$

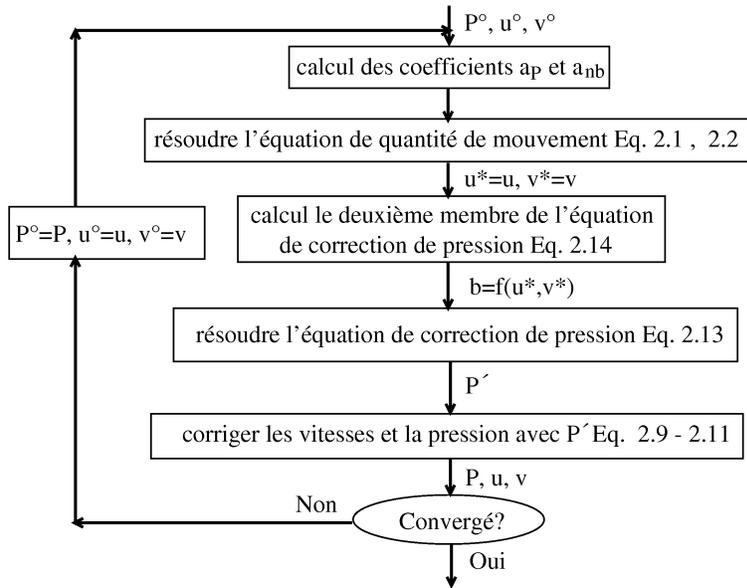


FIG. 2.9 – Organigramme de l’algorithme SIMPLE

Description schématique de l’algorithme SIMPLE

La méthode étant itérative, on décrit ici le processus de calcul entre deux itérations.

1. initialiser u_0 et v_0
2. supposer connu un champ de pression P^*
3. calculer les coefficients de l’équation de quantité de mouvement
4. résoudre l’équation de quantité de mouvement afin de trouver les vitesses u^*, v^*
5. avec ces vitesses u^*, v^* , calculer le deuxième membre de l’équation de pression
6. résoudre l’équation de continuité pour trouver la correction de pression
7. avec cette correction de pression, corriger pression et vitesse.
8. recommencer une nouvelle iteration en prenant les solutions calculées comme valeurs initiales si la solution n’a pas convergé au sens d’un critère à définir.

Les approximations de l’algorithme SIMPLE

Aux étapes 1 et 2, la vitesse et la pression initiales sont supposées indépendantes. Cette hypothèse est inconsistente.

A l’étape 7, l’effet des points voisins sur la correction de vitesse est négligé afin de simplifier le processus de correction de pression, qui génère un schéma semi-implicite. Cette deuxième approximation donne une vitesse corrigée qui satisfait uniquement l’équation de continuité et produit un peu d’instabilité et une mauvaise convergence du processus itératif. Il a été constaté que cette approximation engendre une surestimation de la correction de pression ce qui conduit donc à sous-relaxer la

correction de pression afin de stabiliser le calcul.

Ces deux approximations n'influent pas sur la solution finale si l'algorithme converge mais elles influent sur la stabilité et sur le taux de convergence. Cet algorithme constitue le fondement de nombreux autres algorithmes proposés au cours des trente dernières années, dont SIMPLER qui est l'un des plus utilisés.

b) SIMPLER, Patankar, 1981 [60]

Patankar (1981) [60] a proposé un nouvel algorithme, SIMPLER, basé sur SIMPLE afin d'améliorer la première approximation de SIMPLE, autrement dit le couplage entre les champs de vitesse et de pression initiaux.

Les équations 2.1 et 2.2 peuvent se transformer en :

$$u_P^* = \frac{\sum a_{nb}u_{nb}^* + b_u}{a_P} + [P_P^* - P_E^*] \frac{A_u}{a_P} \quad (2.15)$$

$$v_P^* = \frac{\sum a_{nb}v_{nb}^* + b_v}{a_P} + [P_P^* - P_N^*] \frac{A_v}{a_P} \quad (2.16)$$

Les termes $\frac{\sum a_{nb}u_{nb}^* + b_u}{a_P}$ et $\frac{\sum a_{nb}v_{nb}^* + b_v}{a_P}$ ayant l'une unité d'une vitesse, on peut les définir comme étant des pseudo-vitesses \hat{u} et \hat{v} telles que :

$$u_P^* = \hat{u}_P + [P_P^* - P_E^*] \frac{A_u}{a_P} \quad v_P^* = \hat{v}_P + [P_P^* - P_N^*] \frac{A_v}{a_P} \quad (2.17)$$

Les pseudo-vitesses sont calculées à partir de l'équation 2.17. Soit

$$a_P \hat{u}_P = \sum a_{nb} \hat{u}_{nb} + b_u \quad (2.18)$$

$$a_P \hat{v}_P = \sum a_{nb} \hat{v}_{nb} + b_v \quad (2.19)$$

Pour la pression P^* , on peut toujours utiliser, comme dans SIMPLE, l'équation de continuité pour les composantes u^* et v^* :

$$\left(\frac{\rho_P^{n+1} - \rho_P^n}{\Delta t} \right) \Delta X \Delta Y + \Delta Y [(\rho u^*)_e - (\rho u^*)_w] + \Delta X [(\rho v^*)_n - (\rho v^*)_s] = 0 \quad (2.20)$$

$$a_p P_P^* = a_E P_E^* + a_W P_W^* + a_N P_N^* + a_S P_S^* + b_{p^*} \quad (2.21)$$

avec

$$b_{p^*} = \left(\frac{\rho_P^n - \rho_P^{n+1}}{\Delta t} \right) \Delta X \Delta Y + \Delta Y [(\rho \hat{u})_w - (\rho \hat{u})_e] + \Delta X [(\rho \hat{v})_s - (\rho \hat{v})_n] \quad (2.22)$$

On obtient alors une pression P^* liée au champ de vitesse.

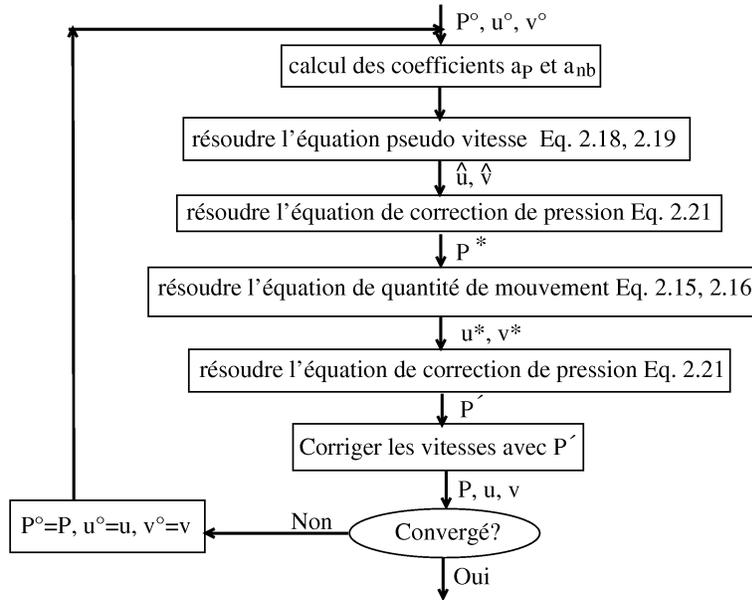


FIG. 2.10 – Organigramme de l’algorithme SIMPLER

Description schématique de l’algorithme SIMPLER

1. calculer les coefficients a_P , a_{nb} à partir des vitesses initiales, u_0 et v_0
2. calculer les pseudo vitesses \hat{u} et \hat{v}
3. avec ces vitesses, calculer la pression P^*
4. résoudre l’équation de quantité de mouvement afin d’obtenir les vitesses u^* et v^*
5. utiliser u^* et v^* pour déterminer la correction de pression P'
6. corriger les vitesses u et v en utilisant P'
7. Conserver les champs u , v et P^* pour la prochaine itération

Les approximations de l’algorithme SIMPLER

La pression P^* calculée à partir de l’équation 2.21 avec les composantes des vitesses calculées à partir des équations 2.15 et 2.16 ne satisfait que l’équation de quantité de mouvement et de continuité explicitement. Il peut encore exister une grande différence entre la solution exacte et P^* . Avec l’algorithme SIMPLER, P^* est conservée comme une solution finale à ce niveau d’itération. Cette approximation diminue un peu la vitesse de convergence et génère des instabilités pour des problèmes à hauts nombres de Reynolds ou de Rayleigh. Donc, il y a encore quelques efforts à faire pour améliorer l’algorithme

Annexe 4 : Algorithme de Thomas

Pour résoudre un système linéaire tridiagonal, l'algorithme de Thomas est très efficace. Il est basé sur une méthode directe qui ramène la matrice à une matrice triangulaire supérieure ne comportant que la diagonale principale et une seule diagonale supérieure.

L'équation générique du système tridiagonal à n équations s'écrit :

$$a_k\phi_{k-1} + b_k\phi_k + c_k\phi_{k+1} = f_k \quad (2.1)$$

avec $a_1 = 0$ et $c_n = 0$.

On définit la récurrence suivante (pour $1 \leq k \leq n$) :

$$\phi_k = p_k\phi_{k+1} + q_k \quad (2.2)$$

avec $p_n = 0$.

On introduit l'équation 2.2 pour exprimer ϕ_{k-1} dans l'équation 2.1 et, après avoir ordonné les variables ϕ , on obtient :

$$\phi_k = \frac{-c_k}{a_k p_{k-1} + b_k} \phi_{k+1} + \frac{f_k - a_k q_{k-1}}{a_k p_{k-1} + b_k} \quad (2.3)$$

En posant :

$$p_k = \frac{-c_k}{(a_k p_{k-1} + b_k)} \quad (2.4)$$

$$q_k = \frac{f_k - a_k q_{k-1}}{(a_k p_{k-1} + b_k)} \quad (2.5)$$

avec $q_1 = f_1/b_1$ et $q_n = f_n/b_n$

Les $n - 1$ coefficients $-p_k$ ($1 \leq k \leq n - 1$) sont les coefficients de la surdiagonale du système linéaire triangularisé et les n coefficients q_k sont les composantes du vecteur second membre. La résolution s'effectue par "remontée" en utilisant la récurrence :

$$\phi_n = q_n \quad (2.6)$$

$$\phi_{n-1} = p_{n-1}\phi_n + q_{n-1} \quad (2.7)$$

Chapitre 3

Validations du code de calcul

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons des comparaisons avec des solutions publiées récemment ou avec des solutions calculées en utilisant un code commercialisé disponible au laboratoire (ANSYS-Fluent) ainsi que des tests de précision et de convergence. Différents problèmes de convection naturelle dans des cavités fermées sont considérées : convection purement thermique transitoire ou stationnaire basée sur l'approximation faiblement compressible, convection instationnaire, basée sur l'approximation de Boussinesq, en régime supercritique dans le cas d'une cavité allongée (en comparant nos solutions à des solutions de référence issues de tests de comparaison internationaux), convection thermosolutale à masse volumique variable. Une étude de la convergence de l'algorithme IDEAL est décrite à la fin de ce chapitre.

3.2 Cavité carrée différentiellement chauffée.

Nous avons d'abord étudié des écoulements de convection naturelle thermique dans une cavité carrée pour de grands écarts de température. Les solutions de référence étant peu nombreuses, les comparaisons sont limitées à des solutions obtenues avec le code Fluent en régime stationnaire (déjà validé dans la thèse de Laaroussi (2008) [39]) et en régime transitoire lorsque l'approximation faiblement compressible est utilisée. Des comparaisons sont ensuite effectuées avec la solution de référence publiée dans le cadre d'un exercice de comparaison (Le Quéré et al. (2005) [46]) en tenant compte des variations de la viscosité et de la conductivité thermique de l'air calculées par la loi de Sutherland.

Un schéma de la cavité à section carrée différentiellement chauffée verticalement est présenté sur la figure 3.1. Les parois verticales sont maintenues à températures uniformes chaude et froide et les parois horizontales sont supposées être adiabatiques. Pour cette géométrie de base, les paramètres adimensionnels caractérisant l'écoulement sont le nombre de Rayleigh thermique ($Ra_T = 10^6$ ou 10^7), le nombre de Prandtl fixé à $Pr = 0,71$, le paramètre hors-Boussinesq thermique défini conventionnellement, $\epsilon_T = \Delta T / (T_h - T_c) = 1,2$ (soit 2 fois la valeur non conventionnelle utilisée dans le test de comparaison) et $\gamma = 1,4$, rapport des chaleurs spécifiques de l'air. Notons ici que le nombre de Prandtl peut être considéré comme constant,

même pour de grands écarts de température, parce que la loi de Sutherland est employée.

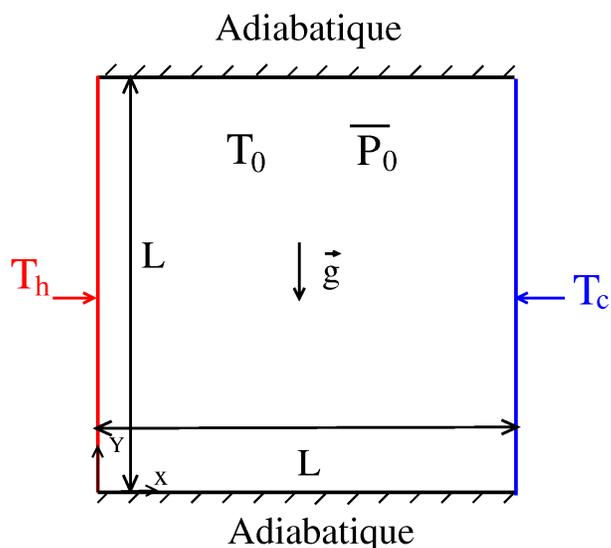


FIG. 3.1 – Schéma de la cavité différentiellement chauffée ($A = 1$)

3.2.1 Comparaisons avec Fluent

Comme Fluent est écrit en variables dimensionnelles, il faut adapter les données physiques afin d'obtenir les paramètres adimensionnels souhaités. Ces données sont reportées dans le tableau 3.1 où l'on remarque que nous avons choisi de ne modifier que la valeur de l'accélération de la pesanteur afin d'obtenir le nombre de Rayleigh souhaité (en fait le nombre de Froude). Nous avons aussi légèrement modifié les données physiques pour que $Pr = 0,71$ (comme dans l'exercice de comparaison) alors que sa valeur réelle à $T_0 = 600\text{ K}$ est plutôt $Pr = 0,68$.

La vitesse de référence (thermique) est $u_0 = \alpha/L \approx 7,07 \cdot 10^{-4}\text{ m/s}$. On en déduit

Donnees 'physiques'	Fluent
$T_h(K)$	960
$T_c(K)$	240
$T_0(K)$	600
$P_0(Pa)$	101325
$L(m)$	0.1
$g(m/s^2)$	2.96002345
$\rho_0(kg/m^3)$	0.5883369
$k(w/(mK))$	0.04180085
$\mu(kg/(ms))$	2.954564×10^{-5}
$C_p(j/(kgK))$	1004.5
$M(kg/kmol)$	28.966

TAB. 3.1 – Grandeurs dimensionnelles introduites dans le calcul Fluent pour obtenir $Ra_T = 10^6$, $Pr = 0.71$, et $\epsilon_T = 1.2$ (Propriétés physiques constantes)

que la référence temporelle est $t_r = L/U_0 = 141,4$ s. Le nombre de Nusselt est construit sur le flux de conduction, $k\Delta T/L = 292,6$ W/m² (valeur gigantesque pour de l'air, due à la différence de température suggérée dans le "benchmark").

Les paramètres des schémas numériques retenus sont reportés dans le tableau 3.2 pour Fluent et dans le tableau 3.3 pour notre code. Pour comparer les solutions, on a choisi le même nombre de mailles (mais Fluent est collocalisé). Le pas de temps est beaucoup plus grand avec Fluent parce que l'intégration temporelle est implicite. Dans les deux cas, le critère de convergence vers l'état stationnaire n'étant pas le même, les temps de calculs indiqués dans les tableaux 3.2 et 3.3 sont les temps nécessaires pour atteindre le temps adimensionnel $\tau = 0,22$ auquel la solution peut être considérée comme stationnaire. L'option "gaz parfait" (ou "ideal gas") signifie qu'un modèle à masse volumique variable est activé dans Fluent. Pour une précision des solutions équivalente (voir dans la suite), on en déduit que les temps de calculs sont de l'ordre de 4 fois moins importants avec notre code. On doit cependant souligner que ce test n'est pas suffisamment représentatif et qu'un rapport de temps de calcul aussi faible n'est pas déterminant (Fluent est parallélisé, notre code est portable...etc).

Paramètres numériques de la solution Fluent	
Maillage uniforme	128 × 128
Δt	7,069 10 ⁻³
Couplage V-P	<i>SIMPLE</i>
Coefficients de sous-relaxation	
Pression	0,3
Densité	1
Body force	1
Quantité de mouvement	0,7
Energie	1
Schéma spatial	<i>QUICK</i>
Schéma temporel	<i>2^{eme} ordre implicite</i>
Résidu temporel (continuité)	10 ⁻⁹
Résidu stationnaire (continuité,u,v,T)	10 ⁻¹⁰
Densité :	<i>gaz parfait</i>
Temps de calcul pour atteindre $\tau = 0,22$	350 min

TAB. 3.2 – Paramètres de calcul avec Fluent pour $Ra_T = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1.2$

3.2.1.1 Régime transitoire

Les évolutions de la pression thermodynamique et du nombre de Nusselt moyen sont tracées sur les figures 3.2 et 3.3 où nous pouvons constater que les variations de pression sont quasiment confondues. En ce qui concerne le nombre de Nusselt, les deux solutions ont les mêmes allures mais elles sont légèrement décalées dans le temps. Cet écart provient de la différence entre les schémas d'intégration temporels. L'étude des influences des résidus temporels et stationnaires et du pas de temps sera présentée dans la suite de ce chapitre.

Paramètres numériques du code	
Maillage uniforme	128×128
$\Delta\tau$	$5 \cdot 10^{-5}$
Couplage V-P	<i>IDEAL</i>
Coefficients de sous-relaxation	1
Schéma spatial	<i>Hybride</i>
Schéma temporel	<i>ADI</i>
Résidu temporel (continuite)	10^{-9}
Résidu stationnaire (u + v + T)	10^{-6}
Densité	gaz parfait
Temps de calcul pour atteindre $\tau = 0.22$	89 min

TAB. 3.3 – Paramètres numériques utilisés dans notre code pour la comparaison avec Fluent dans le cas $Ra_T = 10^6$, $Pr = 0,71$, et $\epsilon_T = 1,2$

En régime fortement convectif ($10^5 \leq Ra \leq 10^8$) dans une cavité différentiellement chauffée, le régime stationnaire s'établit après amortissement d'une suite de structures oscillatoires monopériodiques (jusqu'à $Ra \approx 10^7$ pour une cavité carrée remplie d'air) si la solution initiale est celle d'un fluide immobile (ce que montre la figure 3.3 pour $Ra = 10^6$). Cette phase oscillatoire a été étudiée par Patterson et Imberger (1980) [61] à partir d'une analyse d'ordre de grandeur. Leurs résultats ont ensuite été confirmés numériquement dans de nombreux travaux (par exemple, Lauriat (1981) [44] ou Lauriat et Altimir (1985) [45]). Pour une cavité carrée, la période adimensionnelle des oscillations est très proche de $\tilde{p} = 2\pi\sqrt{2/Ra_T Pr}$.

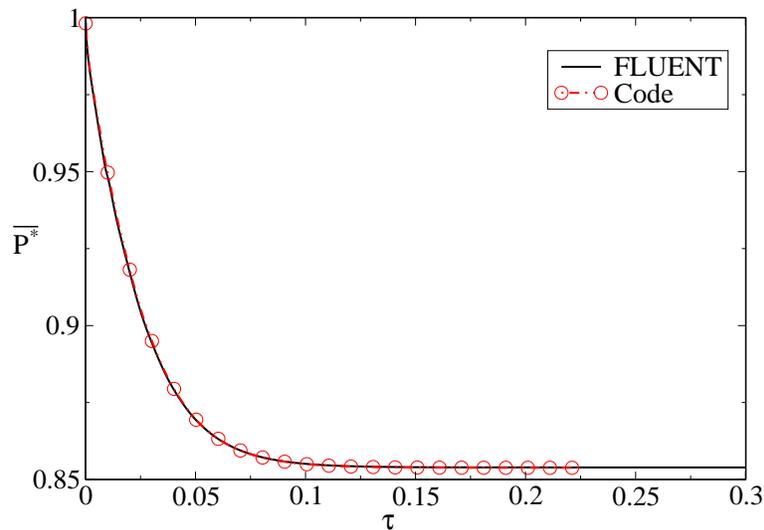


FIG. 3.2 – Comparaison de l'évolution de la pression thermodynamique dans le cas $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$.

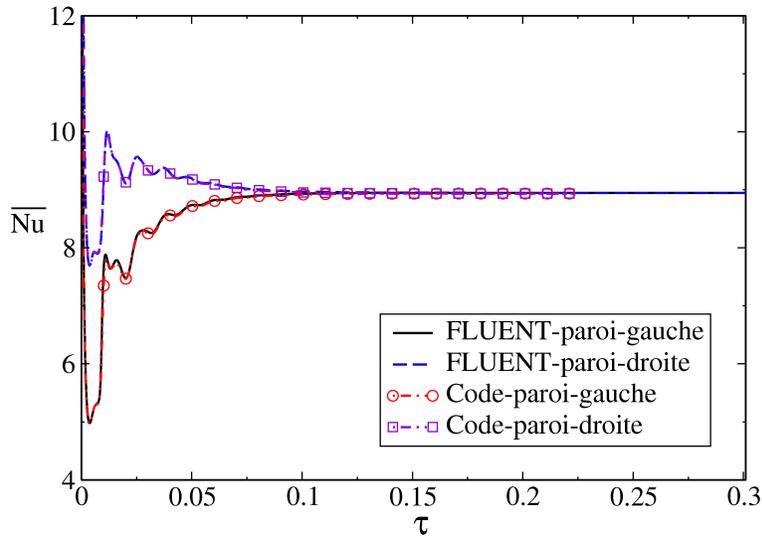


FIG. 3.3 – Comparaisons entre les évolutions du nombre de Nusselt dans le cas $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$

Afin de comparer les solutions transitoires obtenues par les deux codes, les champs de température et des composantes de vitesses calculées aux instants $\tau = 0,05$ et $\tau = 0,1$ sont présentés sur les figures 3.4 à 3.6. Dans tous les cas, on observe une très bonne superposition de ces champs bien que les structures des maillages ne soient pas les mêmes (décalés et collocalisés).

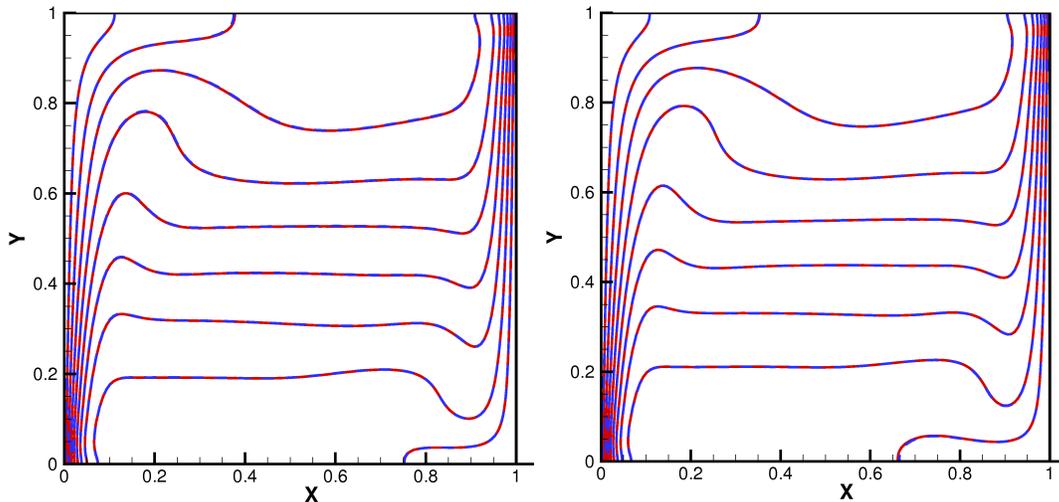


FIG. 3.4 – Comparaisons des champs de température (traits pleins pour notre code et traits en pointillés pour Fluent) aux instants $\tau = 0,05$ (gauche) et $\tau = 0,1$ (droite) pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$.

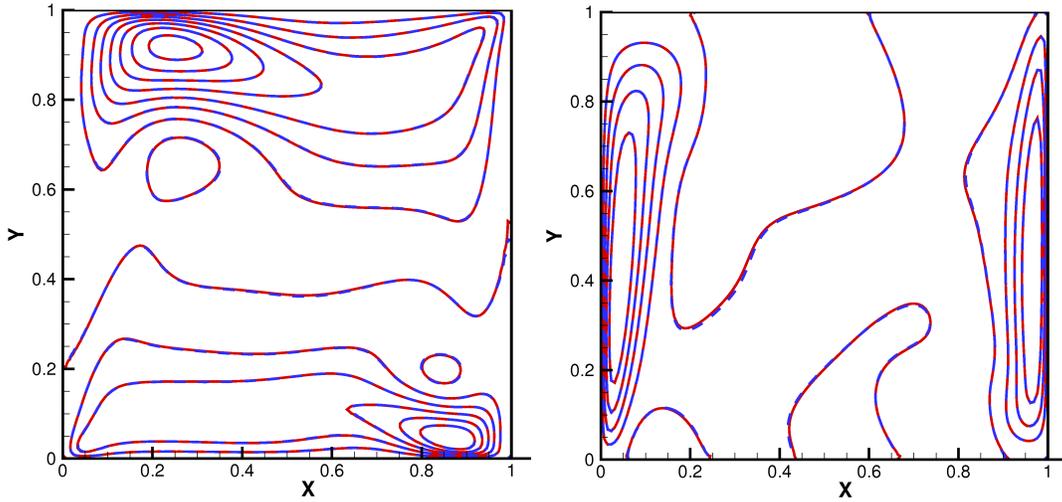


FIG. 3.5 – Comparaisons des champs des composantes horizontale et verticale de la vitesse (traits pleins pour notre code et traits en pointillés pour Fluent) à l’instant $\tau = 0,05$ pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$.

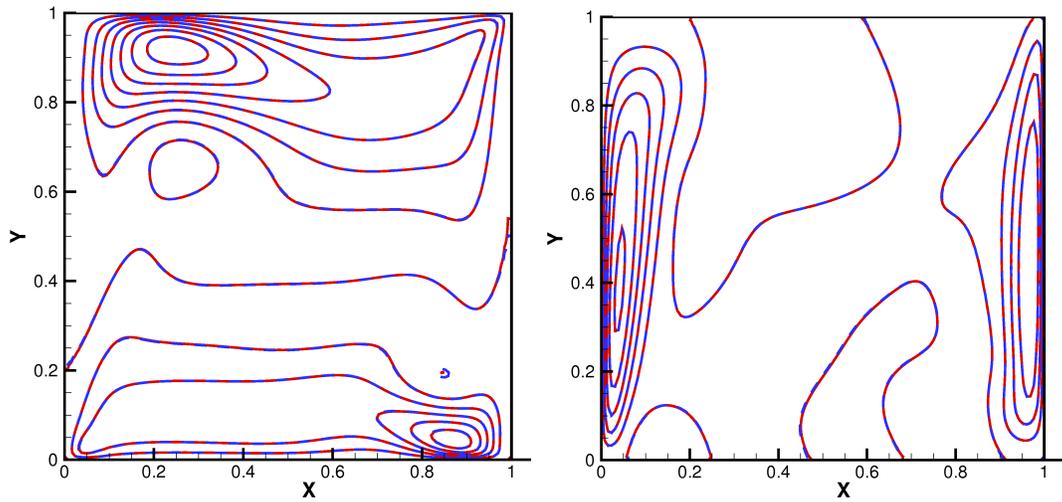


FIG. 3.6 – Comparaisons des champs des composantes horizontale et verticale de la vitesse (traits pleins pour notre code et traits en pointillés pour Fluent) à l’instant $\tau = 0,1$ pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$.

3.2.1.2 Solution stationnaire

Pour les simulations ayant convergé vers un état stationnaire (selon le critère de convergence choisi), on présente des comparaisons entre les profils de température et les composantes de vitesse dans les plans médians horizontaux et verticaux (figure 3.7 et 3.8). Les profils des nombres de Nusselt locaux sur les parois verticales sont reportés sur la figure 3.9. On observe que ces profils sont, graphiquement (et compte-tenu de la taille des figures), en bon accord. Les deux solutions montrent que les effets hors-Boussinesq, qui se traduisent en particulier par la perte de centrosymétrie des champs des variables, sont relativement marginaux en régime per-

manent, ce que montre aussi la solution de référence (2005) [46]. La raison est que la température initiale est égale à la moyenne des températures de parois, ce qui contribue à atténuer les effets de variations de masse volumique : la masse volumique moyenne ne varie que d'environ 15% entre l'état initial et l'état final (pression thermodynamique décroissant de $\overline{P^*} = 1$ à $\overline{P^*} \approx 0,85$ comme le montre le tableau 3.4).

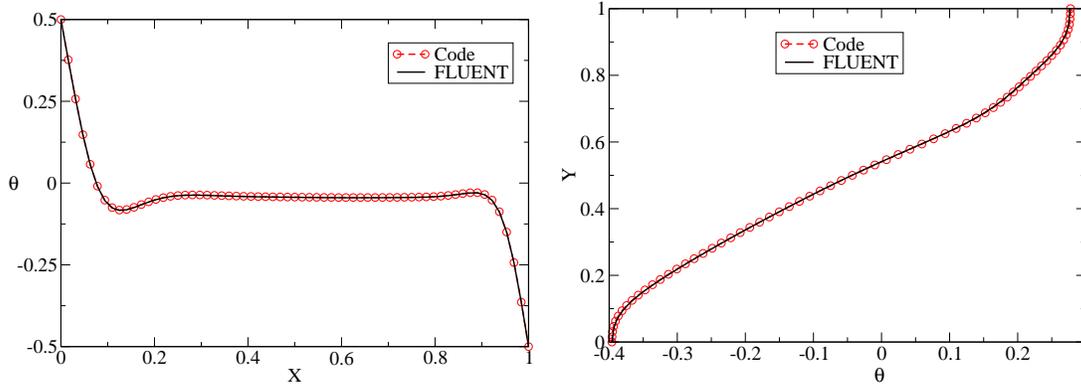


FIG. 3.7 – Comparaisons entre les profils de température dans les plans médians (horizontal et vertical) à l'état stationnaire pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1, 2$.

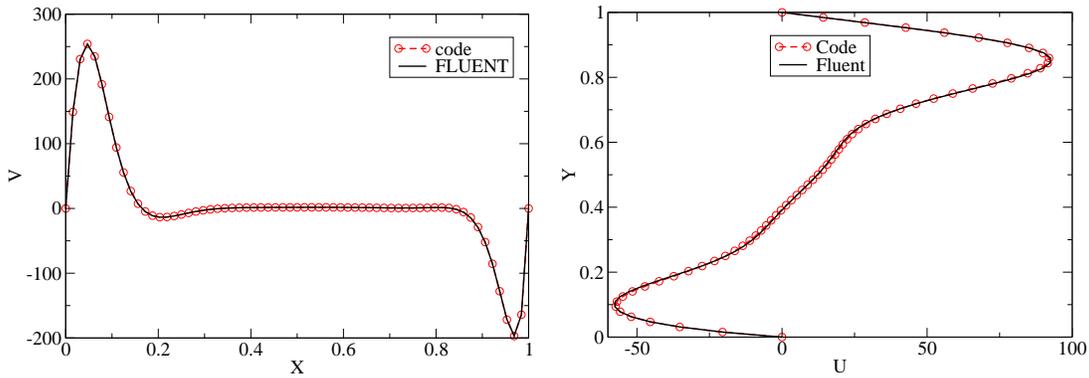


FIG. 3.8 – Comparaison entre les profils des composantes de vitesse dans les plans médians (horizontal et vertical) à l'état stationnaire

Les valeurs de la pression thermodynamique et du nombre de Nusselt sont reportées dans le tableau 3.4. On observe que les pressions sont identiques et que les différences entre les nombres de Nusselt moyens ne dépassent pas 0,2%.

<i>Solution</i>	$\overline{P^*}$	\overline{Nu}_{gauche}	\overline{Nu}_{droite}
FLUENT	0,8539	8,9428	8,9428
Code	0,8538	8,9349	8,9349

TAB. 3.4 – Comparaison entre la pression thermodynamique et les nombres de Nusselt moyens pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1, 2$.

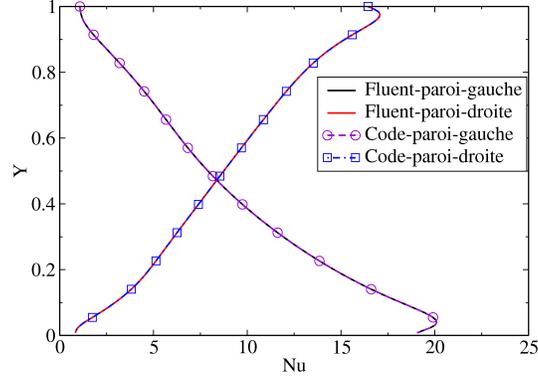


FIG. 3.9 – Comparaison entre les profils des nombres de Nusselt locaux sur les deux parois verticales à l'état stationnaire pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$.

3.2.2 Comparaison avec la solution de référence et étude de maillage

Dans cette partie, les solutions de l'exercice de comparaison [46] sont prises comme références pour la validation du code et l'étude du maillage. Trois cas correspondant à $Ra_T = 10^6$ (conductivité et viscosité dynamique constantes ou variables) et $Ra_T = 10^7$ (conductivité et viscosité dynamique variables) sont considérés. Les paramètres adimensionnels fixés sont : $A = 1$, $Pr = 0.71$, $\epsilon_T = 1.2$, $\gamma = 1.4$ et $\theta_0 = 0$.

3.2.2.1 Propriétés physiques constantes pour $Ra_T = 10^6$

Pour tester la convergence du maillage, des calculs ont été effectués avec des maillages uniformes compris entre 64×64 et 512×512 (tableau 3.5) et des maillages non-uniformes (tableau 3.6) avec des expansions $\xi_x = 0.7$ et $\xi_y = 0.3$.

Lorsque le nombre de mailles uniformes augmente de 64×64 à 512×512 , la solution converge vers la solution de référence. Pour les maillages non-uniformes, l'écart à la solution de référence est encore réduit et le tableau 3.6 montre qu'il est inférieur à 0.04% pour un maillage 256×256 , maillage qui sera utilisé pour la plupart des calculs discutés dans les deux chapitres suivants.

Les profils des composantes de vitesses dans les plans médians horizontaux et verticaux (figure 3.10) et des nombres de Nusselt locaux (figure 3.11) sont comparés à ceux donnés par Darbandi et al., 2007 [16]. Ces figures montrent une excellente concordance (compte tenu de la taille de ces figures).

A partir des solutions obtenues sur les différents maillages, on peut analyser l'ordre de la convergence spatiale. La figure 3.12 montre le taux de convergence sur le nombre de Nusselt moyen. L'écart absolu E entre la simulation \overline{Nu} et le résultat de Vierendeelset al. (2001) [78], \overline{Nu}_r , est défini comme suit :

$$E = |\overline{Nu} - \overline{Nu}_r| = |\overline{Nu} - 8,8598| \quad \text{pour } Ra = 10^6 \quad (3.1)$$

Maillage	\overline{P}^*	\overline{Nu}	Nu_{max} ($x^* = 0$)	Nu_{min} ($x^* = 0$)	Nu_{max} ($x^* = 1$)	Nu_{min} ($x^* = 1$)
$\xi_x = 0.0, \xi_y = 0.0$						
64×64	0.8479	9.1376	21.477	1.088	18.044	0.784
96×96	0.8520	8.9906	20.478	1.082	17.487	0.821
128×128	0.8538	8.9349	20.098	1.078	17.075	0.835
256×256	0.8557	8.8789	19.720	1.075	16.552	0.850
512×512	0.8562	8.8646	19.628	1.074	16.410	0.854
Vierendeels et al.						
2048×2048	0.8563	8.8598	19.596	1.0734	16.362	0.8551

TAB. 3.5 – Comparaisons entre nos résultats (maillage uniforme) et ceux de Vierendeels et al. (2001) [78] en convection purement thermique et en supposant les propriétés physiques constantes ($A = 1, Pr = 0,71, Ra_T = 10^6, \epsilon_T = 1,2, \gamma = 1,4, \theta_0 = 0$.)

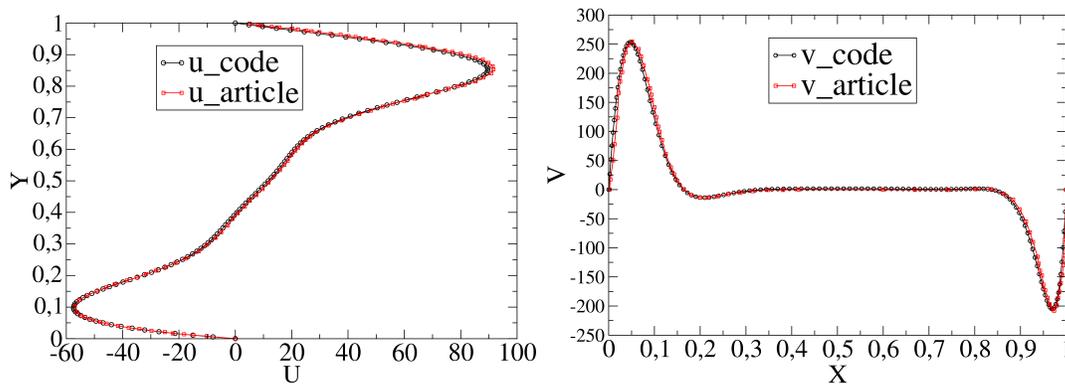


FIG. 3.10 – Comparaison entre les profils des composantes de vitesse dans les plans médians (horizontal et vertical) à l'état stationnaire avec ceux de Darbandi et al. (2007) [16] dans le cas $Ra = 10^6, Pr = 0.71$ et $\epsilon_T = 1.2$.

On peut constater que la convergence spatiale obtenue est quasiment quadratique ($O(h^2)$) pour un maillage uniforme (pente de $\log(E)$ en fonction de $\log(N)$ égale à 1,957) et qu'elle reste sensiblement quadratique pour un maillage variable (pente 1,936) qui permet d'obtenir un écart beaucoup faible avec la solution de Vierendeels et al. (2001) [78].

3.2.2.2 Conductivité et viscosité dynamique variant selon la loi de Sutherland pour $Ra_T = 10^6$ et $Ra_T = 10^7$.

Dans cette partie on a toujours $A = 1, Pr = 0,71, \epsilon_T = 1,2, \gamma = 1,4, \theta_0 = 0$, ce qui signifie que les dimensions de la cavité sont multipliées par $10^{1/3}$ lorsque Ra est augmenté de 10^6 à 10^7 . Les solutions de référence sont celles du "benchmark" [46]. Les relations de Sutherland s'écrivent sous forme dimensionnelle :

$$\frac{\mu(T)}{\mu_{ref}} = \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{1.5} \frac{(T_{ref} + T_s)}{(T + T_s)} \quad (3.2)$$

Maillage	\overline{P}^*	\overline{Nu}	Nu_{max} ($x^* = 0$)	Nu_{min} ($x^* = 0$)	Nu_{max} ($x^* = 1$)	Nu_{min} ($x^* = 1$)
$\xi_x = 0.7, \xi_y = 0.3$						
64×64	0.8555	8.8871	19.888	1.085	16.700	0.808
96×96	0.8559	8.8721	19.721	1.078	16.506	0.861
128×128	0.8561	8.8667	19.665	1.076	16.439	0.859
256×256	0.8563	8.8615	19.614	1.074	16.382	0.856
512×512	0.8563	8.8603	19.601	1.074	16.368	0.855
Vierendeels et al.						
2048×2048	0.8563	8.8598	19.596	1.0734	16.362	0.8551
Accary and Raspo						
120×120	0.8568	8.8581	–	–	–	–

TABLE 3.6 – Comparaisons entre nos résultats (maillage non uniforme) et ceux de Vierendeels et al. (2001) [78] et d’Accary et Raspo (2006) [1] à propriétés physiques constantes pour $A = 1$, $Pr = 0,71$, $Ra_T = 10^6$, $\epsilon_T = 1,2$, $\gamma = 1,4$, $\theta_0 = 0$.

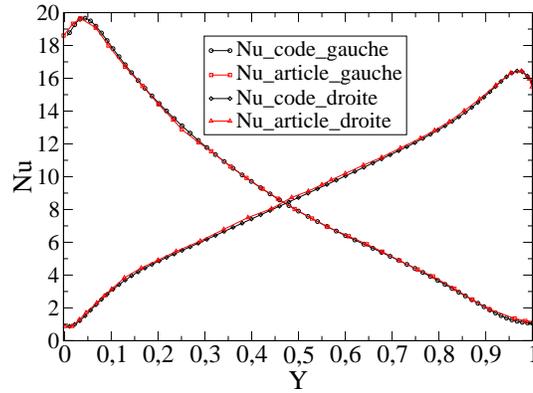


FIG. 3.11 – Comparaisons des profils des nombres de Nusselt locaux sur les deux parois verticales avec ceux de Darbandi et al. (2007) [16] dans le cas $Ra = 10^6$, $Pr = 0.71$ et $\epsilon_T = 1.2$.

$$k(T) = \mu(T) \frac{C_p}{Pr} \quad (3.3)$$

avec

$$T_{ref} = 273k, \quad T_s = 110.5k, \quad C_p = 1004.5JKg^{-1}s^{-1}, \quad R = 287JKg^{-1}K^{-1}, \text{ et } Pr = 0.71$$

En prenant comme grandeurs adimensionnelles

$$\mu^* = \frac{\mu}{\mu_0}, \quad k^* = \frac{k}{k_0}, \quad k_0 = \frac{\mu_0 C_p}{Pr}, \quad \theta = \frac{T - T_0}{T_c - T_f}, \quad \epsilon = \frac{\Delta T}{T_0} = \frac{\Delta T}{(T_c + T_h)/2}$$

l’équation 3.2 devient :

$$\mu^* = \frac{(1 + 2\epsilon T^*)^{1.5} (1 + \frac{T_s}{T_0})}{(2\epsilon T^* + 1 + \frac{T_s}{T_0})} \quad (3.4)$$

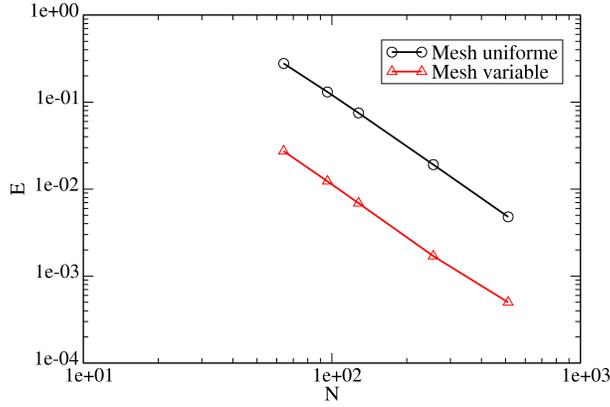


FIG. 3.12 – Convergence de la discrétisation spatiale sur des maillages uniformes ou variables pour $Ra = 10^6$ ($N = N_x = N_y$ compris entre $N = 64$ et $N = 512$).

Comme

$$k(T^*)k(T_0) = \mu(T^*)\mu(T_0)\frac{Cp}{Pr} \quad (3.5)$$

on en déduit l'égalité :

$$k(T^*) = \mu(T^*) \quad (3.6)$$

Les tableaux 3.7 et 3.8 montrent que les solutions calculées avec un maillage 256×256 sont en excellent accord avec celles de Vierendeels et al. (2001) [46].

Maillage	$\overline{P^*}$	\overline{Nu}	Nu_{max} ($x^* = 0$)	Nu_{min} ($x^* = 0$)	Nu_{max} ($x^* = 1$)	Nu_{min} ($x^* = 1$)
$\xi_x = 0.7, \xi_y = 0.3$						
64×64	0.9223	8.7241	20.675	1.078	15.994	0.780
128×128	0.9239	8.6961	20.372	1.069	15.632	0.763
256×256	0.9243	8.6890	20.294	1.067	15.547	0.739
Vierendeels et al.						
2048×2048	0.9245	8.6866	20.2704	1.0667	15.5194	0.7575

TAB. 3.7 – Comparaisons entre nos résultats et ceux de Vierendeels et al. (2001) [46] en convection thermique faiblement compressible, conductivité et viscosité dynamique dépendant de la température selon la loi de Sutherland. Cas $A = 1, Pr = 0,71, Ra_T = 10^6, \epsilon_T = 1,2, \gamma = 1,4, \theta_0 = 0$.

3.3 Convection instationnaire dans une cavité d'allongement $A = 8$

Ce problème de convection thermique dans une cavité de grand allongement a aussi suscité un exercice de comparaison internationale (Christon et al. (2002)[12]).

Maillage	\overline{P}^*	\overline{Nu}	Nu_{max} ($x^* = 0$)	Nu_{min} ($x^* = 0$)	Nu_{max} ($x^* = 1$)	Nu_{min} ($x^* = 1$)
$\xi_x = 0.7, \xi_y = 0.3$						
64×64	0.9159	16.4549	50.951	1.493	38.966	1.190
128×128	0.9209	16.2977	47.471	1.464	35.490	1.118
256×256	0.9222	16.2554	46.644	1.457	34.561	1.096
Vierendeels et al.						
2048×2048	0.9226	16.2410	46.379	1.454	34.272	1.089

TAB. 3.8 – Comparaisons entre nos résultats et ceux de Vierendeels et al. (2001) [46] en convection thermique faiblement compressible, conductivité et viscosité dynamique dépendant de la température selon la loi de Sutherland. Cas $A = 1, Pr = 0,71, Ra_T = 10^7, \epsilon_T = 1,2, \gamma = 1,4, \theta_0 = 0$.

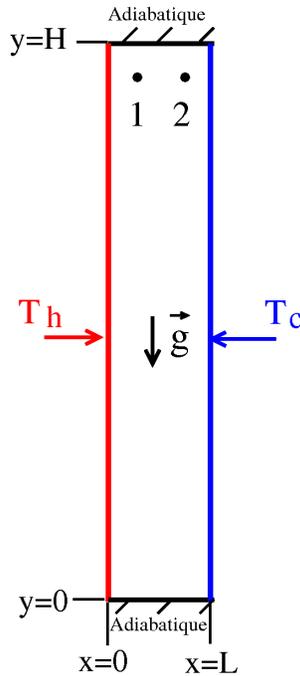


FIG. 3.13 – Géométrie de la cavité différentiellement chauffée d’allongement $A = 8$

La modélisation est basée sur l’approximation de Boussinesq. L’objectif de cet exercice était de déterminer les propriétés du régime périodique à $Ra = 3,4 \cdot 10^5$ (nombre de Rayleigh basé sur la largeur de la cavité) et de comparer les valeurs moyennes sur une durée d’intégration temporelle recouvrant plusieurs périodes ainsi que les amplitudes de signaux, en régime périodique établi, en des points donnés. Les contributions à cet exercice sont basées sur des méthodes de haute précision (méthode spectrale, méthode de différences finies d’ordre 4) et sur la méthode des éléments finis. Il s’agit d’un problème beaucoup plus difficile à traiter que celui considéré précédemment, notamment parce que la qualité du schéma d’intégration temporel est déterminante, comme cela a été noté dans la thèse de Barrios-Pina (2010) [2].

Ce problème nous permet de tester notre code en régime transitoire, ce qui présente un intérêt puisque les solutions présentées dans les deux chapitres qui suivent requièrent une bonne précision temporelle, du fait de la modélisation transitoire adoptée pour calculer la variation de la masse du mélange.

3.3.1 Description du problème

La géométrie 2D de la cavité, remplie d'air ($Pr = 0,71$), est schématisée sur la figure 3.13. Les propriétés physiques sont supposées constantes et la condition initiale est celle d'un fluide immobile à une température égale à la moyenne des températures des parois chaude et froide. Les équations de conservation sont rendues adimensionnelles en choisissant comme vitesse de référence $u_0 = \sqrt{g\beta L\Delta T}$ et donc comme pression et temps de référence, $P_r = \rho_0 u_0^2$, et $t_r = L/u_0$. Ce qui conduit au système suivant :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{V} = 0 \\ \frac{D\vec{V}}{D\tau} = -\nabla p + \left(\frac{Pr}{Ra}\right)^{1/2} \nabla^2 \vec{V} + \vec{k} \theta \\ \frac{D\theta}{D\tau} = \frac{1}{(PrRa)^{1/2}} \nabla^2 \theta \end{cases} \quad (3.7)$$

Les valeurs moyennes sont calculées à partir de la relation :

$$\bar{\phi} = \frac{1}{n\tau} \int_t^{t+n\tau} \phi_{x,y} dt \quad (3.8)$$

où n est le nombre de période.

L'écoulement est stable jusqu'à un nombre de Rayleigh critique $Ra_c = 306186$ qui correspond à l'apparition du premier mode instable avec une brisure de la symétrie de l'écoulement de base (Xin et Le Quéré (2002) [85]). A $Ra = 3,4 \cdot 10^5$, les solutions présentées dans l'exercice de comparaison montrent que l'écoulement de base est centro-symétrique et que les fluctuations mono-périodiques le sont aussi (période adimensionnelle de valeur $\approx 3,41$).

3.3.2 Résultats

La solution asymptotique étant périodique, les comparaisons s'effectuent à partir de l'enregistrement de grandeurs (vitesse, pression, température ...) aux deux points P_1 et P_2 (figure 3.13) de coordonnées $(x_1 = 0,181, y_1 = 7,37)$ et $(x_2 = 0,819, y_2 = 7,37)$. Comme dans la thèse de Barrios-Pina (2010) [2], deux maillages non uniformes ont été utilisés : le plus grossier comporte 68×131 mailles (coefficients d'expansion $\xi_x = 0,683$ et $\xi_y = 0,307$) et le plus fin 100×260 mailles (coefficients d'expansion $\xi_x = 0,67$ et $\xi_y = 0,305$). Le pas de temps adimensionnel est égal à 10^{-4} . Une période est donc parcourue en plus de $3,4 \cdot 10^4$ pas de temps. Les calculs des moyennes sont effectués après le temps adimensionnel $\tau = 1000$. La figure 3.14 montre que l'écoulement atteint un régime quasiment établi après un temps adimensionnel de

l'ordre de $\tau = 500$. En comparant les figures 3.14 et 3.15, on constate que la valeur de la période est peu sensible au maillage mais que les amplitudes des fluctuations de température diffèrent sensiblement ($\approx 6\%$).

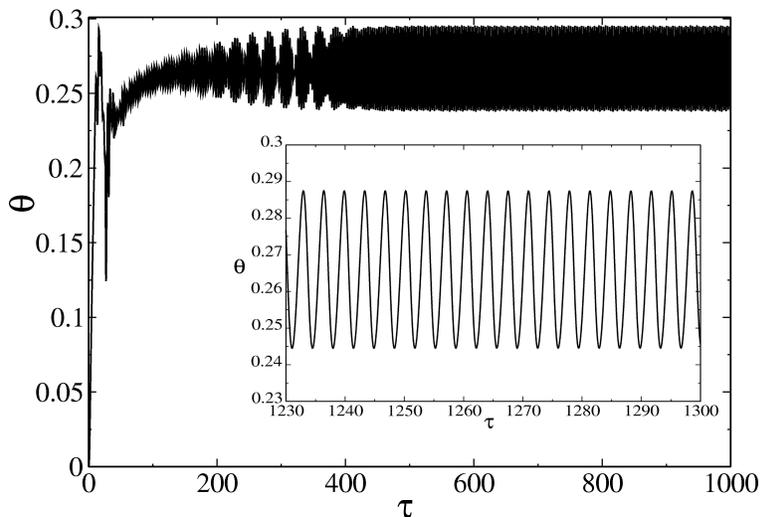


FIG. 3.14 – Evolution de la température au point 1 pour le maillage 68×132

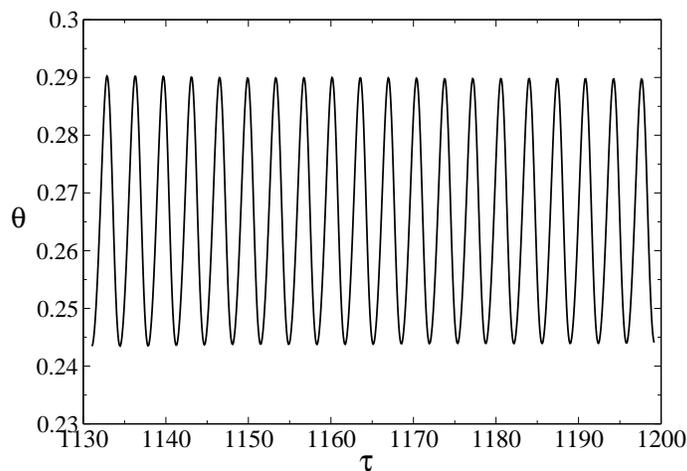


FIG. 3.15 – Evolution de la température au point 1 pour le maillage 100×260

Les résultats calculés au point 1 sont comparés dans le tableau 3.9 aux résultats de Barrios-Pina (2010) [2] (méthode de volumes finis d'ordre 2), de Xin et Le Quéré (2002) [85] (méthode spectrale) et Johnston et Krasny (2002) [32] (méthode de différences finies d'ordre 4). Les écarts entre les valeurs moyennes temporelles (résultant d'intégrations sur 20 périodes) de la vitesse ($\overline{u_1}$), de la température ($\overline{\theta_1}$) et du nombre de Nusselt (\overline{Nu}) et de la période des fluctuations sont inférieurs à

Solution	$\overline{u_1}$	u'_1	$\overline{\theta}$	θ'	Période
maillage(68 × 132), $\Delta\tau = 10^{-4}$	0.054242	0.054251	0.265204	0.042898	3.45633
maillage(100 × 260), $\Delta\tau = 10^{-4}$	0.056073	0.057859	0.265477	0.045626	3.40993
Barrios-Pina(67 × 131)	0.058400	0.069935	0.265797	0.054811	3.45842
Barrios-Pina(99 × 259)	0.056481	0.054110	0.265374	0.042600	3.45922
Xin et Le Quéré(48 × 180)	0.056356	0.054828	0.265480	0.042740	3.41150
Johnston et Krasny(97 × 769)	0.056160	0.054520	0.264700	0.042680	3.42200
	Nu	Nu'	$\overline{\Delta P}$	$\Delta P'$	
maillage(68 × 132), $\Delta\tau = 10^{-4}$	4.57760	0.007240	0.002131	0.019747	
maillage(100 × 260), $\Delta\tau = 10^{-4}$	4.57775	0.007630	0.001919	0.021288	
Barrios-Pina(67 × 131)	4.58948	0.009177	0.001891	0.024488	
Barrios-Pina(99 × 259)	4.58469	0.007120	0.001861	0.019942	
Xin et Le Quéré(48 × 180)	4.57946	0.007100	0.001850	0.020380	
Johnston et Krasny(97 × 769)	4.56700	0.007130	0.001375	0.020040	

TAB. 3.9 – Comparaisons des solutions au point 1 dans le cas $Ra = 3,4 \cdot 10^5$, $Pr = 0.71$ et $A = 8$.

0,5%. Ils sont plus importants sur la très faible différence de pression motrice existant entre les points 1 et 2 et sur les amplitudes des fluctuations, ce qui est aussi le cas pour toutes les valeurs données par les différents auteurs. De façon générale, nos résultats concordent le mieux avec ceux de Xin et Le Quéré. Les solutions moyennes et les amplitudes calculées sur le maillage grossier sont légèrement sous-estimées, contrairement aux résultats de Barrios-Pina (2010) [2].

Les champs moyens sont reportés sur la figure 3.16. Compte-tenu de l'espace mémoire requis pour stocker les champs à chaque pas de temps, les moyennes n'ont été calculées que sur une seule période. On remarque que la propriété de centrosymétrie est bien respectée. Compte-tenu de la taille et de la précision des tracés, ces figures sont en parfait accord avec celles présentées par Barrios-Pina (2010) [2]. La pression motrice réduite est arbitrairement choisie nulle au centre de la cavité, comme suggéré dans l'exercice de comparaison.

3.4 Convection thermosolutale

En convection thermosolutale, les variations de la pression et la masse volumique sont dues aux effets thermiques et solutaux, qui peuvent être du même ordre de grandeur dans les mélanges non dilués. Dans cette partie, on compare des solutions numériques stationnaires à une solution thermodynamiquement exacte en procédant de la façon suivante : à l'instant initial, la cavité est remplie par un mélange uniforme défini par les quatre variables thermodynamiques, données ici sous forme adimensionnelle : $\overline{P^*} = 1$, $\rho_0^* = 1$, θ_0 et $W_{2,0}^*$.

A $\tau > 0$, les conditions aux limites thermique et massique sont brusquement modifiées sur les deux parois verticales et maintenues constantes. Soient $W_{2,p}^* = W_{2,0}^* + \Delta W_2^*$ et $\theta_p = \theta_0 + \Delta\theta$. Comme le gaz porteur (espèce "1") est supposé ne pas dif-

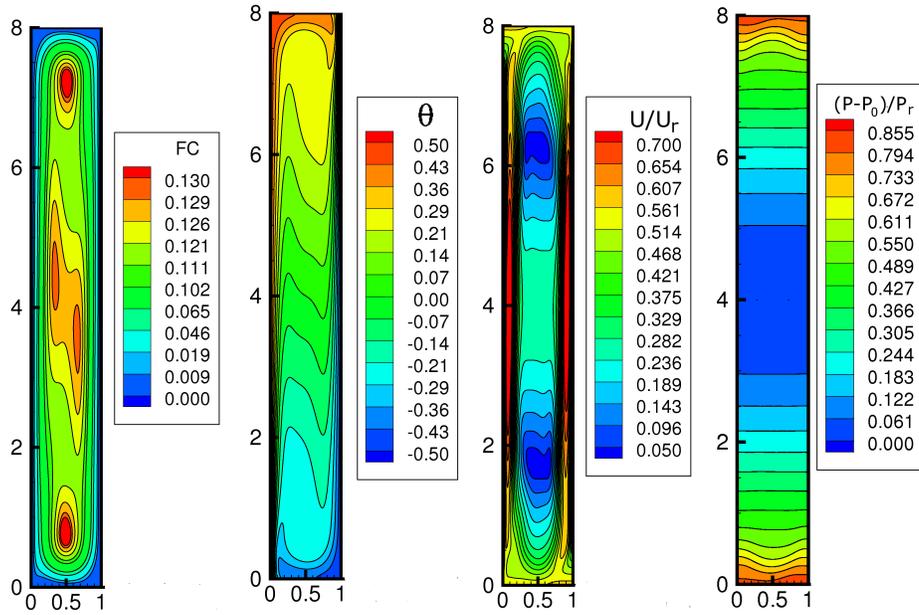


FIG. 3.16 – Champs moyens de fonction de courant, température, vitesse horizontale et pression statique dans le cas $Ra = 3,4 \cdot 10^5$, $Pr = 0,71$ et $A = 8$ traité dans le cadre de l'approximation de Boussinesq.

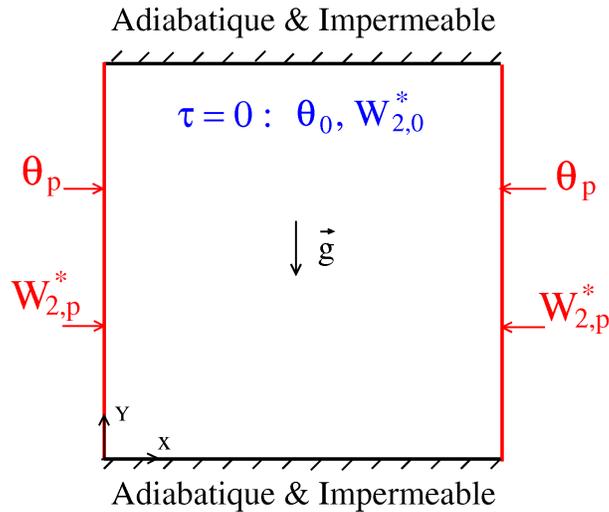


FIG. 3.17 – Schéma de la cavité dans le cas de la convection thermosolutale.

fuser dans les parois, sa masse reste constante alors que la masse de l'espèce "2" varie de sorte que sa fraction massique réduite devienne uniformément égale à $W_{2,p}^*$ au bout d'un certain temps : le régime massique stationnaire est alors atteint. De même, la température du mélange devient uniformément égale à θ_p lorsque le régime thermique stationnaire est atteint. Les durées des régimes transitoires thermiques et massiques sont du même ordre si $Le = 1$. Dans l'état stationnaire, à $\tau = \tau_\infty$, le mélange est immobile et il est caractérisé par les variables thermodynamiques \bar{P}_∞^* , ρ_∞^* , θ_∞ et $W_{2,\infty}^*$ que l'on peut calculer exactement.

Entre les instants $\tau = 0$ et τ_∞ , le mélange convecte, intensivement au début du régime transitoire puis faiblement à la fin où les transferts thermique et solutaux deviennent purement diffusifs. On connaît donc exactement les solutions initiale et stationnaire : par rapport à la thermodynamique, le calcul numérique permet, en particulier, de calculer la durée du régime transitoire, fonction des paramètres adimensionnels intervenant dans la formulation du problème.

A titre d'exemple, on considère la cavité carrée représentée sur la figure 3.17. A l'état initial, elle est remplie uniquement par le gaz porteur uniformément froid : $\theta_0 = -0,5$ et $W_{2,0}^* = -0,5$ (ou $W_{2,0} = 0$). A $\tau > 0$, l'espèce "2" plus lourde, $M^* = M_2/M_1 = 2$, commence à diffuser par les deux parois latérales qui sont chauffée brutalement à une température $\theta_p = 0,5$. Les forces thermiques et solutales sont donc opposées. La pression thermodynamique augmente donc sous le double effet de la diffusion massique et de l'accroissement de la température. L'augmentation de la fraction massique à la paroi est ΔW_2 . Les solutions numériques présentées dans le tableau 3.10 sont comparées avec la solution exacte donnée, pour un mélange binaire de deux gaz parfaits, par :

$$\bar{\rho}^*(\infty) = \frac{1}{1 - \Delta W_2} \quad , \quad \bar{P}^*(\infty) = \rho^*(\infty) \left(\frac{1 + 0,5\epsilon_T}{1 - 0,5\epsilon_T} \right) \left(\frac{1 + 0,5\epsilon_m}{1 - 0,5\epsilon_m} \right) \quad (3.9)$$

Les résultats reportées dans le tableau 3.10 pour trois valeurs de la fraction massique

Cas	ΔW_2	ϵ_m	ϵ_T	Fr	C_w	$\rho^*(\infty)$	$\rho^*(\infty)$ exacte	$\bar{P}^*(\infty)$	$\bar{P}^*(\infty)$ exacte	Erreur %
1	0.2	-0.105	0.1818	$1.05 \cdot 10^{-7}$	4.5	1.2501	1.25	1.3501	1.350	0.01
2	0.4	-0.222	0.3333	$2.22 \cdot 10^{-7}$	2	1.667	1.667	1.8672	1.8667	0.02
3	0.6	-0.3529	0.4615	$3.529 \cdot 10^{-7}$	1.167	2.501	2.50	2.8016	2.80	0.06

TAB. 3.10 – Comparaisons entre les valeurs stationnaires de la masse volumique et de la pression thermodynamique avec la solution exacte basée sur la loi des gaz parfaits (équation 3.9). Les autres paramètres utilisés dans les simulations numériques sont : $A = 1$, $Le = 1$, $Pr = 1$, $M^* = 2$, $\gamma = 1,4$, $\theta_0 = -0,5$, $W_{2,0}^* = -0,5$. Les calculs sont effectués avec un pas de temps adimensionnel initial $\Delta\tau_0 = 10^{-6}$.

ΔW_2 , qui influe sur les valeurs de ϵ_m et C_w , montrent que la solution thermodynamique est bien obtenue avec une précision de 0,06% dans le cas le plus défavorable, correspondant à de grandes variations de masse volumique et de pression.

Si on augmente ΔW_2 et ΔT , l'écoulement devient plus intense et l'erreur de convergence vers la solution stationnaire est un peu plus grande, mais toujours inférieure à 0.1%. L'origine de cette erreur semble provenir du schéma d'intégration temporel utilisé parce que les gradients spatiaux étant nuls en régime permanent, le maillage ne doit pas avoir d'influence notable (le maillage retenu dans cette partie est grossier : 64×64).

La formulation étant purement instationnaire, le pas de temps doit être suffisamment petit pour que le CFL ne dépasse des valeurs trop grandes ($CFL < 30$) dans la

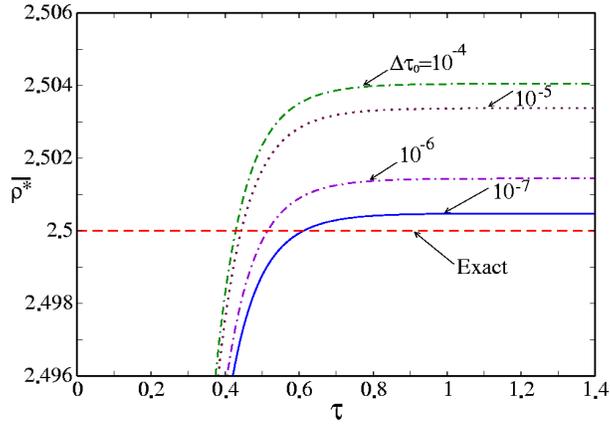


FIG. 3.18 – Influence du pas de temps sur l'évolution de la masse volumique du mélange pour le cas 3 reporté dans le tableau 3.10

phase initiale pendant laquelle la convection est très intense. A l'approche de l'état stationnaire, les transferts deviennent diffusifs et la méthode *ADI* est alors inconditionnellement stable. Cependant, si les solutions transitoires sont entachées d'erreurs importantes, elles se maintiennent en s'approchant de la solution stationnaire parce que le calcul de la pression thermodynamique, et donc de la masse volumique, est basé sur la conservation de la masse totale et résulte d'une suite d'intégrations temporelles : si elle n'est pas bien calculée, la solution stationnaire est erronée.

Le remède consiste à employer un très petit pas de temps dans la phase initiale puis de l'augmenter en suivant une progression de type $\Delta\tau(n) = C^n \Delta\tau_0$ où $\Delta\tau_0$ est le premier pas de temps. Comme on effectue plusieurs milliers de pas de temps, le coefficient C doit être très proche de l'unité. Après plusieurs essais, on a retenu $C = 1,001$ (car $1,001^{10^4} \approx 2,2 \cdot 10^4$), ce qui correspond à un pas de temps final de l'ordre de 20,000 fois le pas de temps initial. Si, comme pour les valeurs reportées dans le tableau 3.10 on prend $\Delta\tau_0 = 10^{-6}$, la convergence temporelle peut être supposée théoriquement satisfaisante parce que $\Delta\tau_\infty \approx 10^{-2}$ et que nous sommes assurés que l'ordre de convergence temporel est au moins en $O(\Delta\tau_\infty)$, soit de l'ordre de 1%. Ce que montre le tableau 3.10.

Cependant, les solutions discutées dans les deux chapitres suivants requièrent une meilleure résolution spatiale (256×256 , comme on l'a montré dans les paragraphes précédents) ce qui signifie que les temps calculs pourraient devenir prohibitifs si le pas de temps était trop fortement réduit pour tenir compte de l'effet de cette meilleure résolution spatiale sur le *CFL*. Nous avons donc reconsidéré le cas 3 du tableau 3.10 en retenant un maillage 256×256 pour étudier l'influence de $\Delta\tau_0$ sur la valeur de la masse volumique stationnaire (en maintenant $C = 1,001$ car l'ordre de grandeur du nombre de pas de temps est $\approx 10^4$). La figure 3.18 montre que la valeur théorique est alors atteinte avec une bonne précision si $\Delta\tau_0 = 10^{-7}$, valeur que l'on retiendra dans la suite. Il est noter que le temps de calcul n'est pas du tout proportionnel à $\Delta\tau_0$ parce que de trop grandes valeurs du pas de temps initial conduisent à une augmentation considérable du nombre d'itérations internes dans l'algorithme de traitement du couplage vitesse-pression.

En définitive, diminuer $\Delta\tau_0$ de 10^{-4} à 10^{-7} n'augmente les coûts calcul que d'un facteur quatre et assure une erreur de convergence bien inférieure à 1%, ce que montre la figure 3.19 où l'écart $E = \bar{\rho} - \rho^*(\infty)_{exacte}$ est tracé en fonction de $\Delta\tau_0$ (notons que les valeurs numériques de $\bar{\rho}_\infty$ convergent toujours vers $\rho^*(\infty)_{exacte}$ par valeur supérieure, ce que nous ne pouvons pas expliquer).

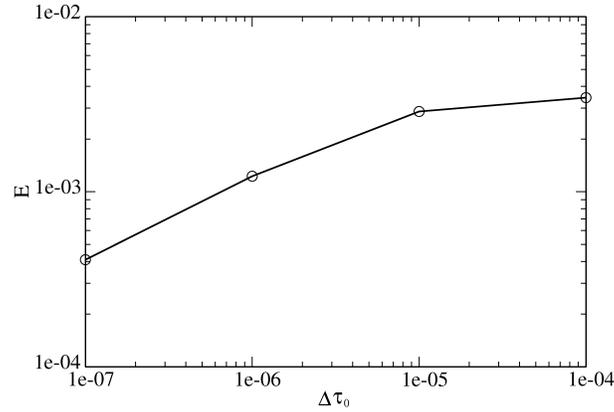


FIG. 3.19 – Influence du pas de temps sur l'erreur absolue commise dans le calcul de la masse volumique adimensionnelle en régime stationnaire ($\rho^*(\infty)_{exacte} = 2,5$)

3.5 Etude du nombre d'itérations internes des deux boucles de l'algorithme IDEAL

3.5.1 Stabilité et vitesse de convergence

L'étude des performances de l'algorithme IDEAL a été effectuée sur un cas purement thermique basé sur la formulation faiblement compressible, ($Ra = 10^6$, $Pr = 0.71$, $\epsilon = 1.2$), cas représentatif de ceux que nous considérerons dans la suite. Comme il existe une solution stationnaire non triviale, dont la précision a été étudiée au début de ce chapitre par comparaisons avec la solution donnée par Fluent et avec la solution de référence [46], nous comparons les solutions obtenues avec les algorithmes SIMPLER (implémenté dans la version initiale de notre code) et IDEAL.

L'intérêt d'IDEAL ne réside pas fondamentalement dans une amélioration de la précision des solutions stationnaires parce que l'algorithme de couplage vitesse-pression n'influe pas sur la qualité théorique de la solution : il suffit de se donner les moyens de satisfaire, in fine, l'équation de continuité avec une très bonne précision ... ce qui peut demander beaucoup d'efforts et des temps de calculs considérables. Une fois consenti un effort de programmation, l'intérêt d'IDEAL ne peut se justifier que par une meilleure convergence dans le couplage vitesse-pression (donc satisfaire $\nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0$ le plus près possible du zéro machine à tout instant) et par une simplicité d'utilisation.

Ne pas avoir à introduire des facteurs de sous-relaxation, indispensables avec SIMPLE et SIMPLER (et autres modifications de SIMPLE), et ne pas avoir l'attention rivée sur la courbe de convergence de l'équation de continuité représente un "confort" d'utilisation considérable. Ce confort a une contre-partie : il demande de fixer le nombre d'itérations internes de chacune des boucles d'IDEAL. On pourrait supposer que cela est équivalent à fixer des paramètres de sous-relaxation : il n'en est rien car le calcul ne converge pas si les facteurs de sous-relaxation de SIMPLER sont mal choisis (et leurs valeurs dépendent de la "raideur" du problème à traiter) alors qu'il suffit de surdimensionner le nombre maximal d'itérations internes des deux boucles, N_1 et N_2 , pour qu'IDEAL converge, du moins dans toutes les configurations que nous avons traitées. Le même constat a été reporté de façon indépendante par Desrayaud (2009) [17] dans le cas de la convection naturelle dans une conduite verticale. Pour ne pas consommer inutilement des ressources CPU, il suffit d'arrêter le nombre d'itérations internes en fixant un critère de convergence. Comme la première boucle ne sert qu'à adapter au mieux la pression initiale au champ de vitesse initial, son critère de convergence peut être assez éloigné du zéro machine. Par contre, celui de la seconde boucle doit être le plus près possible du zéro machine.

Si les systèmes d'équations pentadiagonales établis pour calculer les corrections de pression au cours des deux boucles internes (chapitre II) avaient été résolus par une méthode directe (ce qui très coûteux), il aurait été plus facile de fixer N_1 et N_2 . Nous utilisons une méthode de résolution itérative (*ADI*) pour les résoudre et cette technique complique un peu la tâche, bien que les équations de correction de pression (stationnaires) soient de type Poisson, c'est à dire que la méthode *ADI* est inconditionnellement stable.

Le problème principal est le coût du traitement instationnaire de l'ensemble du système d'équations de conservation dû au calcul instationnaire de la pression thermodynamique qui conditionne la précision globale des résultats. Le *CFL* intervient à ce niveau.

Des tests ont été effectués avec notre programme, version SIMPLER et version IDEAL, pour trois maillages (64×64 à 256×256) et des pas de temps de la boucle externe (boucle temporelle) adaptés à la résolution spatiale afin que le *CFL* ne soit pas excessivement grand. Les valeurs du nombre de Nusselt moyen stationnaire sont reportées dans le tableau 3.11. On constate qu'elles ne dépendent que de la résolution spatiale et non de la valeur du pas de temps (ce qui était attendu). L'algorithme IDEAL converge dans tous les cas alors que SIMPLER requiert des pas de temps de 10 à 100 fois plus petits selon la résolution spatiale. En termes de coûts calculs, IDEAL s'avère donc très performant, notamment lorsque le maillage est raffiné, comme le montrent les temps de calcul reportés dans les colonnes 3 et 4 du tableau 3.11 (temps de calcul en secondes sur la même machine, un processeur utilisé, 3,3 GHz, mémoire vive utile $\approx 0,9 Mo$).

3.5.2 Critère *CFL* sur la résolution transitoire

Avant d'étudier l'effet des critères de convergence retenus pour les boucles internes, nous déterminons la valeur du pas de temps externe (ou du *CFL*) maximum

Maillage	Pas de temps	SIMPLER	IDEAL	\overline{Nu}
64 * 64	1e - 3	---	19 s	9.1376
64 * 64	1e - 4	244 s	125 s	9.1376
128 * 128	5e - 4	---	390 s	8.9350
128 * 128	1e - 4	---	1.4 10 ³ s	8.9350
128 * 128	5e - 5	1.9 10 ³ s	2.2 10 ³ s	8.9350
256 * 256	1e - 4	---	8.8 10 ³ s	8.8615
256 * 256	1e - 5	---	7.1 10 ⁴ s	8.8615
256 * 256	1e - 6	2.97 10 ⁵ s	9.3 10 ⁵ s	8.8615

TAB. 3.11 – Comparaison des solutions stationnaires obtenues avec les algorithmes SIMPLER et IDEAL. Les temps de calcul sont reportés dans les colonnes 3 et 4. Les tirés signifient que la solution ne converge pas.

pour obtenir une solution transitoire indépendante du pas de temps.

Les solutions calculées sont comparées à celle obtenues avec Fluent sur un maillage 64×64 et en utilisant un schéma d'intégration temporel implicite du second ordre, c'est à dire théoriquement moins sensible au pas de temps que notre code. Les évolutions du nombre de Nusselt moyen sur la paroi chaude et de la pression thermodynamique sont comparées sur les figures 3.20. On constate que notre solution transitoire converge vers celle de Fluent si le pas de temps ne conduit pas à un CFL excessif (tableau 3.12), c'est à dire pour $\Delta\tau \leq 10^{-4}$ (notons que le pas de temps est maintenu constant car l'intensité de la convection est ici maximale en régime permanent). Un pas de temps $\Delta\tau \leq 10^{-3}$ ($CFL = 20$ à l'instant $\tau = 0, 1$) conduit à des erreurs appréciables en régime transitoire, tant sur le nombre de Nusselt que sur la pression thermodynamique, mais elles s'atténuent à mesure que l'on s'approche de la solution stationnaire parce que, dans ce cas test, la masse totale est constante.

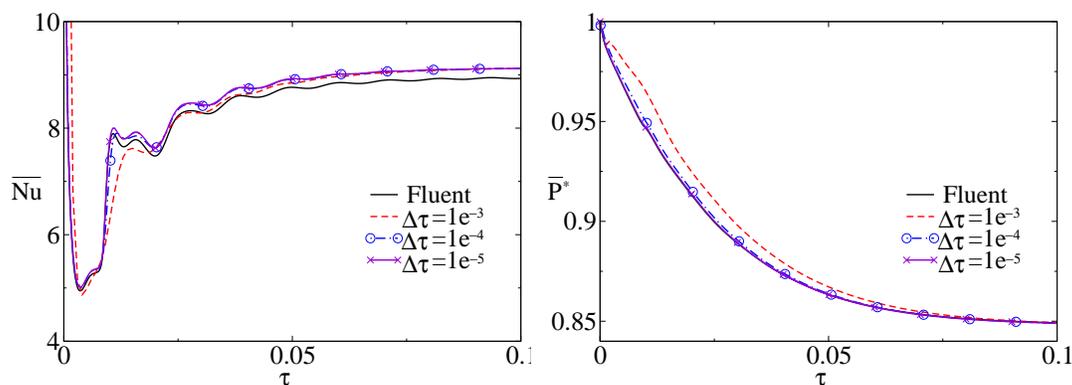


FIG. 3.20 – Influence du pas de temps sur les évolutions du nombre de Nusselt moyen sur la paroi chaude et de la pression thermodynamique.

<i>Maillage</i>	<i>Pas temps</i>	<i>CFL</i>	P^*	$Nu_{X^*=0}$	$Nu_{X^*=1}$
64 * 64	1e - 3	20	0.8493	9.1170	9.1626
64 * 64	1e - 4	2	0.8490	9.1217	9.1577
64 * 64	1e - 5	0.2	0.8490	9.1223	9.1572
64 * 64	1e - 6	0.02	0.8490	9.1225	9.1572

TAB. 3.12 – Influence du pas de temps (ou du *CFL* à l’instant $\tau = 0, 1$) sur la pression thermodynamique et sur les nombres de Nusselt moyens sur les parois chaude ($X^* = 0$) et froide ($X^* = 1$) à l’instant $\tau = 0, 1$.

3.5.3 Choix des critères de convergence pour les deux boucles internes d’IDEAL

Résoudre correctement le problème de la convergence des boucles internes d’IDEAL est essentiel. Si les critères sont trop petits, le temps de calcul est augmenté inutilement, notamment dans la première boucle, et, s’ils sont trop grands, la précision de la solution se dégrade, notamment en régime transitoire. Le nombre total d’itérations à effectuer ($N = N_1 + N_2$) dépend d’abord du pas de temps (ou du *CFL*) de la boucle temporelle (boucle externe). Comme avec SIMPLER, la mise à jour des vitesses et de la fluctuation de pression de t^n à t^{n+1} est d’autant plus difficile à satisfaire que le pas de temps est grand. Compte-tenu des résultats discutés dans le paragraphe précédent, on effectue donc l’étude pour un *CFL* de l’ordre de 1.

Comme nous l’avons indiqué dans le chapitre 2, le but de la première boucle est de trouver une pression initiale satisfaisant au mieux l’équation de continuité avec les composantes de vitesse $u_0 = u^n$ et $v_0 = v^n$ mais avec la masse volumique intermédiaire (voir le schéma de résolution, figure 2.3). Sa fonction est de stabiliser le schéma. Le critère de convergence de la deuxième boucle agit sur la conservation de la masse à l’instant t^{n+1} : l’objectif est que la condition $\nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0$ soit beaucoup mieux satisfaite qu’avec SIMPLER (c’est à dire de passer de $\approx 10^{-5}$ à $\approx 10^{-9}$) afin de garantir une bonne précision de la solution temporelle tout en diminuant les coûts de calculs.

Dans la suite, nous allons donc montrer quels sont les effets des choix de ces deux critères dans le cas de la convection naturelle thermique et en considérant le problème du paragraphe précédent : maillage 64×64 , pas de temps $\Delta\tau = 10^{-4}$.

- Critère *R1* : Si on diminue le critère de la première boucle *R1* en passant de 10^{-3} à 10^{-6} mais en conservant $R2 = 10^{-9}$, la solution transitoire est toujours la même, ce qui confirme que *R2* contrôle la précision.
- Critère *R2* : $R2 = 10^{-9}$ étant très faible, un grand nombre d’itérations s’avère nécessaire pour satisfaire ce critère. On se demande donc si on peut augmenter *R2* pour économiser du temps calcul, tout en gardant une précision élevée.

$R1 = 10^{-3}$ est choisi pour la première boucle et on fait trois simulations avec *R2* égal à 10^{-4} , 10^{-6} et 10^{-9} . Les trois évolutions du nombre de Nusselt moyen sur la paroi chaude sont tracées sur la figure 3.21. Cette figure montre que la résolution instationnaire avec $R2 = 10^{-6}$ est identique à celle obtenue avec 10^{-9} mais que

$R2 = 10^{-4}$ est trop grand. On en conclût que $R2$ doit être inférieur à 10^{-6} .

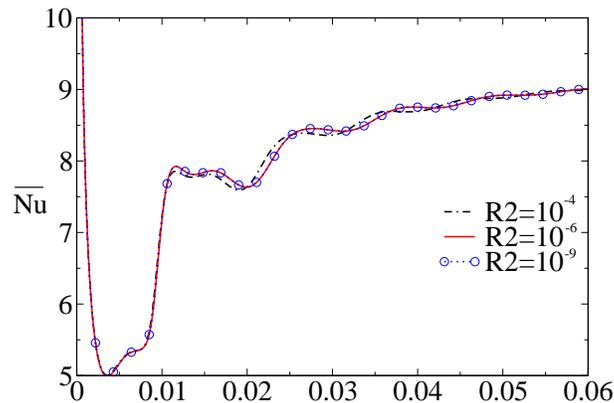


FIG. 3.21 – Influence de la valeur du critère de convergence de la deuxième boucle d’IDEAL sur l’évolution du nombre de Nusselt moyen sur la paroi chaude.

Nous considérons maintenant un problème beaucoup plus difficile à résoudre :

Lorsque les conditions initiales sont celles d’un fluide immobile et isotherme, des ondes de gravité dues au brusque changement des conditions aux limites thermiques s’amortissent très lentement ce qui signifie que la convergence vers l’état stationnaire nécessite des calculs coûteux lorsque le nombre de Rayleigh est supérieur à $Ra \approx 10^6$. Comme nous disposons d’une solution de référence, nous considérons donc un problème plus difficile à résoudre avec une précision de l’ordre de 1% sur un maillage grossier (64×64). On considère donc le cas hors-Boussinesq du tableau 3.8. Le pas adimensionnel d’intégration temporelle de la boucle externe est fixé à 10^{-5} afin que le CFL soit de l’ordre de l’unité. Comme on recherche une solution assez précise, bien que le maillage soit grossier, on fixe le résidu de la deuxième boucle à $R2 = 10^{-9}$ afin que la conservation de la masse soit correctement satisfaite.

Procéder de cette façon implique que la solution finale ne peut pas être beaucoup modifiée parce que la deuxième boucle pilote la précision des calculs. L’intérêt de ce paragraphe est de déterminer comment résoudre un problème raide en réduisant les temps de calcul (question essentielle en simulation numérique : trouver une solution précise au moindre coût).

A cette fin, la seule solution possible est de diminuer le nombre d’itérations de la première boucle (donc d’augmenter la valeur du critère de convergence de cette boucle) jusqu’à ce que le nombre d’itérations de la seconde ne soit pas trop augmenté : c’est donc un problème d’optimisation assujetti à un critère de précision (l’objectif d’IDEAL étant d’être plus efficace que les autres algorithmes de couplage vitesse-pressure). On a donc diminué le critère de convergence de la première boucle de $R1 = 10^{-4}$ à $R1 = 10^{-7}$. Les résultats sont présentés sur les figures 3.22 à 3.24.

- Les nombres d’itérations des deux boucles convergent toujours vers l’unité lorsque

la solution s'approche du régime stationnaire.

- Le nombre d'itérations de la première boucle est toujours inférieur à celui de la seconde.
- Pour $10^{-4} \leq R1 \leq 10^{-7}$, $N1$ varie de 2 à 20 au début du régime transitoire.
- $N2$ diminue lorsque $N1$ augmente comme le montrent les figures 3.22 et 3.23.
- La figure 3.24 montre que de choisir comme nombres maximums d'itération des deux boucles $N1 = 20$ et $N2 = 50$ semble être suffisant.

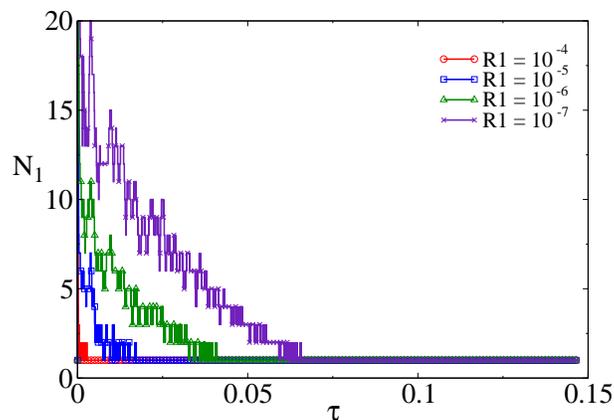


FIG. 3.22 – Evolution du nombre d'itérations de la première boucle de l'algorithme IDEAL ($A = 1$, $Pr = 0,71$, $Ra = 10^7$, $\epsilon_T = 1, 2$, propriétés physiques variables).

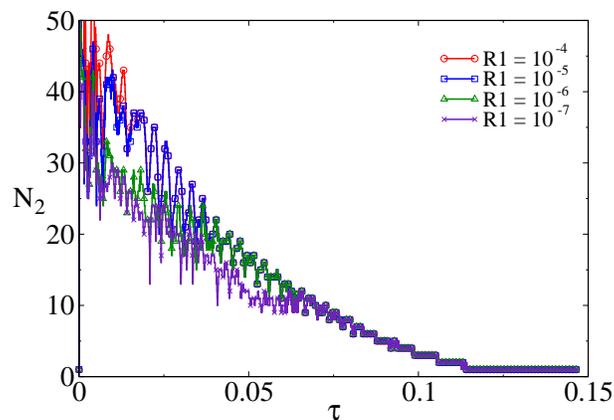


FIG. 3.23 – Evolution du nombre d'itérations de la deuxième boucle de l'algorithme IDEAL ($A = 1$, $Pr = 0,71$, $Ra = 10^7$, $\epsilon_T = 1, 2$, propriétés physiques variables).

Si seule la solution stationnaire est recherchée, les temps de calcul peuvent être réduits en augmentant d'un facteur de l'ordre de 10 le pas de temps de la boucle externe, $\Delta\tau$, jusqu'à atteindre des CFL de l'ordre de 20. Cette procédure n'est pas

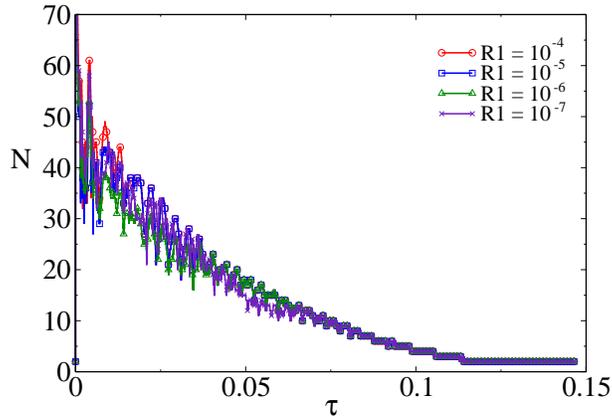


FIG. 3.24 – Evolution du nombre total d’itérations de l’algorithme IDEAL ($A = 1$, $Pr = 0,71$, $Ra = 10^7$, $\epsilon_T = 1,2$, propriétés physiques variables).

recommandée lorsque la formulation faiblement compressible est utilisée parce que notre modèle requiert des simulations précises de l’évolution du champ de masse volumique et de la pression thermodynamique. Par contre, des simulations de la convection naturelle stationnaire basée sur l’approximation de Boussinesq ne nécessitent pas une grande précision des solutions temporelles, le pas de temps de la boucle *ADI* externe n’étant alors qu’un moyen de résoudre itérativement un ensemble de systèmes d’équations linéaires ou linéarisées. L’algorithme IDEAL a été développé dans ce contexte en l’associant à une méthode de résolution temporelle implicite (Sun et al., 2008 [73] à [76]).

Comme la fonction de la première boucle est de stabiliser le schéma, un choix d’un résidu $R1$ très faible n’est pas forcément nécessaire. Dans l’article de Sun et al., 2008b [74]), il est indiqué que 4 itérations internes suffisent pour stabiliser les calculs (du moins pour les cas peu raides qu’ils ont traités). Cependant, il n’y a aucune raison de fixer le nombre d’itérations (sauf un nombre maximal évitant que des calculs non convergents se poursuivent pendant une durée infinie). Quand la solution tend vers l’état stationnaire, le processus de calcul devient plus stable et le nombre total d’itérations à effectuer à chaque pas de temps diminue, comme le montre la figure 3.24 dans le cas de la cavité différentiellement chauffée. Le nombre total d’itérations est très grand au début puis il chute rapidement au cours de l’évolution. Quand on se rapproche de l’état stationnaire, une ou deux itérations internes suffisent (comme avec SIMPLER).

Si $R1$ est diminué de 10^{-3} à 10^{-7} , le nombre d’itérations internes de la première boucle augmente mais celui de la seconde diminue car la solution de la première boucle est meilleure. L’évolution du nombre total d’itérations des deux boucles représenté sur la figure 3.24 montre que la valeur de N pour $R1 = 10^{-6}$ et $R1 = 10^{-7}$ sont quasiment du même ordre. En définitive, un résidu $R1 = 10^{-6}$ semble optimal lorsque le CFL est très grand.

En conclusion, un pas de temps beaucoup plus élevé peut être retenu pour les

problèmes stationnaires, avec des résidus $R1 = 10^{-3}$ et $R2 = 10^{-6}$. Pour les simulations transitoires, un pas de temps plus faible doit être choisi (basé sur le *CFL*) et les résidus des deux boucles doivent être ramenés à $R1 \leq 10^{-6}$ et $R2 \leq 10^{-9}$.

3.6 Conclusion

Ce chapitre porte sur la validation de l'approche numérique mise en oeuvre au cours de la préparation de cette thèse. Plusieurs problèmes classiques de convection naturelle (effet thermique ou thermosolutal) en cavité fermée ont été traités. Le modèle de Boussinesq et le modèle faiblement compressible ont été considérés, en régime stationnaire ou en régime instationnaire. Les tests présentés dans ce chapitre sont parmi les plus significatifs que nous avons réalisés mais ils ne recouvrent qu'une petite partie des nombreuses comparaisons effectuées.

Les comparaisons présentées dans ce chapitre montrent que nous sommes capables de retrouver des solutions de référence pour des problèmes "raides", en régime stationnaire comme en régime transitoire. Nous avons aussi montré que nos solutions sont en parfait accord avec celles fournies par un code commercialisé (ce qui montre en outre qu'il n'est pas nécessaire de développer un code si le modèle existe déjà dans un autre code... à condition toutefois de savoir correctement utiliser le code). Le code, vectorisé, ne faisant appel à aucune bibliothèque de programme (en dehors du post-traitement), est aussi totalement "portable".

Chapitre 4

Convection thermosolutale dans une cavité

Nomenclature

a	diffusivité thermique [$m^2 s^{-1}$]
A	allongement, $A = H/L$
C_p	chaleur spécifique [$J K^{-1} kg^{-1}$]
C_w	paramètre intervenant dans la vitesse adimensionnelle normale
$D_{1,2}$	coefficient de diffusion massique [$m^2 s^{-1}$]
Fr	nombre de Froude, $Fr = a_r^2/gL^3$
g	accélération gravitationnelle [$m s^{-2}$]
h	enthalpie [$J kg^{-1}$]
H	hauteur de la cavité [m]
\bar{I}	tenseur unité
\mathbf{J}	vecteur densité de flux massique [$kg m^{-2} s^{-1}$]
k	conductivité thermique [$W m^{-1} K^{-1}$]
L	largeur de la cavité [m]
Le	nombre de Lewis, $Le = a_r/D_{12,r}$
m	masse du mélange [kg]
\dot{m}	flux massique [$kg s^{-1}$]
M	masse molaire [$kg/kmol$]
M^*	rapport des masses molaires, $M^* = M_2/M_1$
\mathbf{n}	vecteur unitaire à dS
Nu	nombre de Nusselt local
p'_m	partie fluctuante de la pression motrice [Pa]
\bar{P}	pression thermodynamique [Pa]
Pr	nombre de Prandtl du mélange binaire dans des conditions de référence $Pr = \mu_r/\rho_r a_r$
R	constante universelle des gaz parfaits, $R = 8.315 kJ kmol^{-1}$
Ra_m	nombre de Rayleigh solutal, $Ra_m = \rho_r g \beta_m \Delta W L^3 / a_r \mu_r$
Ra_T	nombre de Rayleigh thermique, $Ra_T = \rho_r g \beta_T \Delta T L^3 / a_r \mu_r$
Sc	nombre de Schmidt, $Sc = \mu_r / \rho_r D_{12,r}$
Sh	nombre de Sherwood local
t	temps [s]
T	température [K]

$\vec{V} = (u, v)$	vecteur vitesse [$m s^{-1}$]
W	fraction massique
(x, y)	coordonnées cartésiennes [m]

Symboles grecques

β_M	coefficient d'expansion massique
β_T	coefficient d'expansion thermique, $\beta_T = 1/T_r$ [K^{-1}]
ΔT	différence de température, $\Delta T = (T_h - T_c)$ [K]
ΔW_2	différence de fraction massique, $\Delta W_2 = W_{2,h} - W_{2,c}$
ϵ_m	paramètre hors-Boussineq massique, $\epsilon_m = (1 - W_{2,r})/\Delta W_2$
ϵ_T	paramètre hors-Boussineq thermique, $\epsilon_T = \Delta T/T_r$
γ	rapport des chaleurs spécifiques, $\gamma = C_p/C_v$
μ	viscosité dynamique du mélange [$N m^{-1} s^{-1}$]
ν	viscosité cinématique du mélange [$m^2 s^{-1}$]
Ψ	fonction de courant
ρ	masse volumique [$kg m^{-3}$]
τ	temps adimensionnel, $\tau = a_r t/L^2$
$\bar{\tau}$	tenseur des contraintes visqueuse
θ	rapport d'écart de température (température adimensionnelle) $\theta = (T - T_r)/\Delta T$

Indices

adv	advection
c	paroi froide
$diff$	diffusion
h	paroi chaude
m	mélange
r	référence
w	paroi
0	quantité définie à l'instant initial
∞	état stationnaire

Exposants

$-$	grandeur moyenne
$*$	grandeur adimensionnelle

4.1 Introduction

La convection thermosolutale, ou double-diffusive, dans des cavités remplies d'un mélange binaire a beaucoup été étudiée numériquement et, dans une moindre mesure, expérimentalement. Lorsqu'il s'agit d'un mélange de gaz, l'expérimentation est délicate, notamment parce qu'il est difficile de bien contrôler les conditions aux limites. Il en résulte que la plupart des résultats expérimentaux disponibles concernent des solutions de liquides, le plus souvent des solutions aqueuses. Le cas des mélanges multiconstituants est beaucoup plus complexe à analyser et l'écriture adimensionnelle des équations de conservation ne semble pas présenter beaucoup d'intérêt, compte-tenu du nombre de paramètres intervenant dans la modélisation.

Il faut aussi admettre que l'approximation de mélange binaire dilué de liquides semble recouvrir des domaines d'application beaucoup plus larges que pour les gaz (voir par exemple la première analyse bibliographique du sujet, due à Viskanta et al. (1985) [79]). La convection thermosolutale dans des cavités verticales à section rectangulaire a donc été principalement étudiée pour de grands nombres de Lewis (solutions aqueuses caractérisées par $Le \geq 100$, voir Kamotani et al. (1985) [36], par exemple). De telles valeurs du nombre de Lewis conduisent généralement à des structures d'écoulements multicellulaires, notamment si l'allongement de la cavité est important. Les études expérimentales et numériques de Lee et Hyun (1990) [47], de Lin et al. (1990) [49] et de Han et Khuen (1991) [27], [28] peuvent ainsi être considérées comme les premières analyses détaillées de phénomènes thermosolutaux complexes. Dans les années suivantes, la compréhension des phénomènes thermosolutaux s'est considérablement enrichie, via des analyses d'ordre de grandeur (Bennacer et Gobin (1996) [8]), de stabilité (Gobin et Bennacer (1994) [24]) et numériques (Gobin et Bennacer (1996) [23], Mergui et Gobin (2000) [54]).

L'étude de la convection thermosolutale dans les mélanges de gaz s'applique, en particulier, aux problèmes environnementaux. Cependant, en dehors de situations extrêmes, les espèces sont très faiblement concentrées, ou même à l'état de trace, dans le gaz porteur. Dans le cas de l'air ambiant, composé principalement des trois espèces (N_2 , O_2 et Ar) à l'état sec, la seule espèce n'existant pas à l'état de trace dans une ambiance "humainement habitable" est la vapeur d'eau. C'est la raison pour laquelle plusieurs études ont porté sur la convection d'air humide, dans des cavités horizontales, inclinées ou verticales. Par exemple, le travail expérimental et numérique de Wee et al. (1989) [84], se rapporte à la convection dans des cavités d'allongement $A = 7$ dans des conditions représentatives de celles rencontrées dans des parois "creuses" de type briques, parpaings, double-paroi ...etc. Dans l'étude publiée par Béghein et al. (1992) [3], des résultats numériques portant sur la convection thermosolutale dans une cavité remplie d'air faiblement pollué ont été présentés : les cas de forces d'Archimède d'origine thermique ou massique agissant dans le même sens ou en sens opposé ont été considérés (cas obtenus simplement en changeant le sens des gradients horizontaux de température et de concentration, c'est à dire concentration d'une source de polluant plus élevée sur la paroi chaude ou concentration plus élevée sur la paroi froide). On mentionne aussi l'étude intéressante de Costa (1997) [14] se rapportant à des configurations représentative de briques creuses remplies d'air humide.

Dans toutes ces études, l'approximation de mélanges binaires dilués a été employée. En admettant de plus que les écarts de température sont faibles, il semble alors justifié de baser la formulation du problème sur l'approximation de Boussinesq. Par contre, dans le cas de la croissance cristalline en phase vapeur (dans des cavités ou dans des "ampoules" cylindriques) les écarts de température mis en jeu requiert une autre formulation. Greenwell et al. (1981) [26] puis Markham et Rosenberger (1984) [52] ont ainsi employé une formulation compressible mais en supposant le champ de température connu ou bien en supposant que les masses molaires des deux constituants sont égales.

La convection thermosolutale stationnaire de mélanges binaires non-dilués confinés dans une cavité a été, pour la première fois, étudiée par Weaver et Viskanta (1991) [81], [82]. Les variations de la masse volumique du fluide, composé de deux gaz parfaits, n'ont pas été approximées par le modèle de Boussinesq. Le flux de chaleur dû à l'interdiffusion entre espèces, les variations des propriétés thermophysiques et les effets Soret et Dufour ont été pris en compte. Le flux massique généré sur la paroi chaude d'une cavité rectangulaire due à la sublimation d'un solide ou à l'évaporation d'un liquide et à la condensation sur la paroi froide opposée, a été déterminé en supposant uniformes et constantes les températures et les concentrations des espèces sur les deux parois verticales. Ce modèle, qui suppose la masse totale du mélange constante, revient à assimiler les parois verticales à deux parois poreuses à travers lesquelles sont continûment éjectés et soutirés des flux massiques de l'une des espèces. Il en résulte une grande complexité des écoulements qu'il est très difficile d'étudier expérimentalement. Un dispositif expérimental a cependant été conçu pour vérifier les prédictions numériques (Weaver et Viskanta (1991) [83]). Les comparaisons entre calculs et expériences ont montré que les résultats ne sont en relativement bon accord que lorsque les forces thermosolutales agissent dans le même sens. Ils sont en désaccord quand elles sont opposées. Ces différences ont été attribuées à l'instationnarité de l'écoulement qui n'a pas été prise en compte dans la modélisation. Ces trois articles, relativement peu cités, constituent les premières et quasiment uniques références que nous avons trouvées sur la convection thermosolutale dans des mélanges binaires non-dilués.

Dans ce chapitre, nous considérons la convection thermosolutale instationnaire de mélanges binaires de gaz non-dilués contenus dans des cavités verticales à parois imperméables. Après avoir écrit les équations sous forme adimensionnelle et explicité les paramètres adimensionnels du problème, nous nous attachons à déterminer les conditions dans lesquelles l'approximation de Boussinesq est, ou non, applicable. Contrairement à ce qui a été souvent fait au cours des dernières années à propos des effets hors-Boussinesq d'origine thermique, nous ne considérons que des valeurs des paramètres "hors-Boussinesq" ϵ_T et ϵ_m (définis dans le chapitre II) qui nous semblent être réalistes pour des mélanges de gaz, en dehors de conditions extrêmes. En se référant à des conditions thermodynamiques "standard" (pression atmosphérique, température ambiante, gravité terrestre) nous ne traitons que des différences de température inférieures à 100 K autour de la température ambiante et des différences maximales de fraction massique de l'espèce diffusante de l'ordre 30%, ce qui est considérable s'il s'agit de la diffusion d'un gaz dans de l'air. Ce chapitre est une introduction au chapitre suivant dans lequel nous traitons de l'évaporation et

de la condensation de vapeur d'eau sur les parois d'une cavité, phénomènes faisant intervenir des paramètres supplémentaires.

4.2 Modélisation

Dans cette partie, nous rappelons les équations établies dans le chapitre 1 afin de faciliter la lecture du mémoire

La convection thermosolutale dans une cavité verticale différentiellement chauffée est étudiée dans le cas conventionnel où la fraction massique de l'espèce 2 est maintenue uniforme sur les parois chaude et froide. On suppose que l'espèce 1, le gaz porteur, ne diffuse pas dans les parois. La figure 4.1 représente schématiquement la cavité et les conditions aux limites appliquées sur les parois. Les températures uniformes, T_h et T_c , et les fractions massiques, $W_{2,h}$ et $W_{2,c}$, sont appliquées sur les parois verticales. Les parois horizontales sont adiabatiques et imperméables. Dans cette étude, on suppose que $W_{2,h} \geq W_{2,c}$. Les forces thermosolutales sont dans le même sens ou en sens opposés selon la valeur du rapport des masses molaires, $M^* = M_2/M_1$.

A l'instant initial, la cavité est remplie par un mélange binaire de gaz parfaits à température et fraction massique uniformes, T_0 et $W_{2,0}$. L'étude étant centrée sur l'influence des variations de masse volumique, les autres propriétés thermophysiques sont supposées être indépendantes de la température et de la composition du mélange afin de réduire le nombre de paramètres adimensionnels.

Les échelles de longueur et des différences de température et de fraction massique sont la largeur de la cavité, L , et les différences maximales de température et de fraction massique, ΔT et ΔW_2 . L'échelle de vitesse est la vitesse de diffusion thermique, $u_d = a/L$ où $a = k_r/\rho_r C_p$ est la diffusivité thermique. Les références de température et de fraction massique comme leurs différences sont choisies de telle sorte que les conditions aux limites des équations de conservation de l'énergie et de transfert de matière soient identiques. Les variables adimensionnelles suivantes sont donc utilisées :

$$x^* = \frac{x}{L} \quad y^* = \frac{y}{L} \quad \tau = \frac{t u_d}{L} \quad \rho^* = \frac{\rho_m}{\rho_r} \quad p^* = \frac{p'_m}{\rho_r u_d^2} \quad \bar{P}^* = \frac{\bar{P}}{\bar{P}_r}$$

$$u^* = \frac{u}{u_d} \quad v^* = \frac{v}{u_d} \quad \theta = \frac{T - T_r}{\Delta T} \quad W_2^* = \frac{W_2 - W_{2,r}}{\Delta W_2}$$

où T_r et $W_{2,r}$ sont les valeurs moyennes des températures et fractions massiques imposées sur les parois verticales pour $t > 0$ (soient $T_r = (T_h + T_c)/2$ et $W_{2,r} = (W_{2,h} + W_{2,c})/2$), $\Delta T = T_h - T_c$ et $\Delta W_2 = W_{2,h} - W_{2,c}$. Par conséquent, les variables réduites θ et W_2^* varient dans l'intervalle $[-0.5, 0.5]$, ce qui présente l'avantage de permettre une meilleure comparaison entre les distributions de température et de fractions massiques.

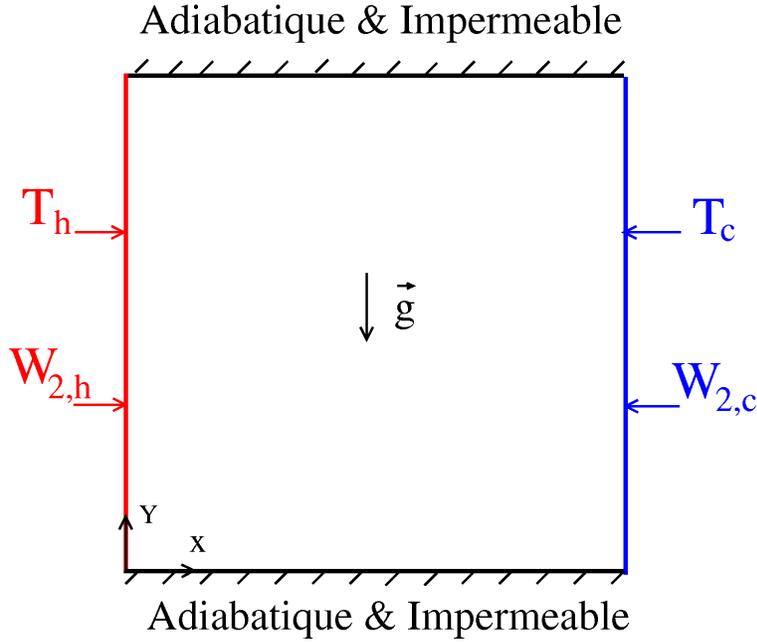


FIG. 4.1 – Représentation schématique de la cavité et système de coordonnées.

Comme les propriétés thermophysiques autre que la masse volumique ont été supposées constantes, C_p , D_{12} , k_r et μ_r sont évaluées à T_r et $W_{2,r}$. Par contre, ρ_r et \bar{P}_r correspondent aux conditions thermodynamiques initiales (soient $\rho_r = \bar{\rho}_m(0)$, $\bar{P}_r = \bar{P}(0)$). Les équations de conservation adimensionnelles s'écrivent alors

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^*) = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial (\rho^* \vec{V}^*)}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^* \otimes \vec{V}^*) = -\nabla p^* + Pr \nabla \cdot \bar{\tau}^* + \frac{1}{Fr} (\rho^* - 1) \frac{\vec{g}}{|\vec{g}|} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial (\rho^* \theta)}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^* \theta) = \nabla^2 \theta + \frac{(\gamma - 1) d\bar{P}^*}{\gamma \epsilon_T d\tau} \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial (\rho^* W_2^*)}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^* W_2^*) = \frac{1}{Le} \nabla \cdot (\rho^* \nabla W_2^*) \quad (4.4)$$

où $Fr = a^2/gL^3$, $Pr = \mu_r/\rho_r a$ et $Le = a/D_{12}$ sont les nombres de Froude, Prandtl et Lewis. $\gamma = C_p/C_v$ est le rapport des chaleurs spécifiques à pression et volume constant. $\epsilon_T = \Delta T/T_r$ est le paramètre utilisé habituellement pour caractériser la validité de l'approximation de Boussinesq dans le cas des gaz parfaits ($\epsilon_T < 0, 1$).

La forme adimensionnelle de la pression thermodynamique est donnée par

$$\bar{P}^*(\tau) = \frac{1}{\int_0^A \int_0^1 \frac{(\epsilon_T \theta_0 + 1)}{(\epsilon_T \theta + 1)} \left(\frac{\epsilon_m W_{2,0}^* + 1}{\epsilon_m W_2^* + 1} \right) dx^* dy^*} \{A + \Delta m_2^*\} \quad (4.5)$$

Dans cette expression, $A = H/L$ est le rapport de forme (ou allongement) de la cavité, l'indice "0" se rapporte aux conditions initiales et ϵ_m caractérise l'écart à

l'approximation d'un mélange binaire dilué. Ce paramètre s'écrit

$$\epsilon_m = \frac{(1 - M^*)\Delta W_2}{M^* + (1 - M^*)W_{2,r}} \quad (4.6)$$

où Δm_2^* représente la variation adimensionnelle de la masse de l'espèce "2" contenue dans la cavité entre l'instant initial et l'instant τ . C'est aussi la variation de la masse totale du mélange puisque l'espèce "1" ne diffuse pas dans les parois. Son expression est

$$\begin{aligned} \Delta m_2^* = \frac{1}{Le} \left[- \left(\frac{1}{C_w - 0.5} \right) \int_0^\tau \int_0^A \rho^* \frac{\partial W_2^*}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0} dy^* d\tau + \right. \\ \left. \left(\frac{1}{C_w + 0.5} \right) \int_0^\tau \int_0^A \rho^* \frac{\partial W_2^*}{\partial x^*} \Big|_{x^*=1} dy^* d\tau \right] \end{aligned} \quad (4.7)$$

Dans le membre de droite de l'équation 4.7, le paramètre C_w caractérise l'amplitude des vitesses (normales) d'injection ou d'aspiration le long des parois. Il caractérise donc aussi la variation temporelle de la masse totale du fluide contenue dans la cavité. Son expression est

$$C_w = (1 - W_{2,r})/\Delta W_2 \quad (4.8)$$

Si l'écart maximum de fraction massique de l'espèce diffusante, ΔW_2 , est faible (mélange très dilué) alors C_w est grand et le flux massique pariétal devient purement diffusif. Dans la quasi-totalité des études portant sur la convection thermosolutale en cavités fermées, il a été implicitement supposé que $C_w \gg 1$. On note aussi que si $W_{2,c} = 0$, alors

$$C_w = \frac{1}{W_{2,h}} - 0,5 \text{ et } \epsilon_m = \frac{(1 - M^*)W_{2,h}}{M^* + 0,5(1 - M^*)W_{2,h}} \quad (4.9)$$

Cette hypothèse permet donc de simplifier l'analyse des résultats puisque les effets hors Boussinesq ne sont caractérisés que par le rapport des masses molaires M^* et par la fraction massique imposée sur l'une des parois (le cas $W_{2,h} = 0$ et $W_{2,c} \neq 0$ est similaire).

Note : nous raisonnons ici en termes de fraction massique W_2 et non en termes de fraction massique réduite W_2^* parce que les expressions de ϵ_m et de C_w en fonction de W_2^* s'interprètent plus difficilement.

La loi des gaz parfaits permet de calculer le champ de masse volumique. La masse volumique locale s'écrit sous forme adimensionnelle

$$\rho^* = \bar{P}^*(\tau) \frac{(1 + \epsilon_T \theta_0) (1 + \epsilon_m W_{2,0}^*)}{(1 + \epsilon_T \theta) (1 + \epsilon_m W_2^*)} \quad (4.10)$$

Les conditions initiales et aux limites s'écrivent

$$\vec{V}^* = 0 \quad , \quad \theta = \theta_0 \quad , \quad W_2^* = W_{2,0}^* \quad , \quad \rho^* = 1 \quad , \quad \bar{P}^* = 1 \quad \text{en } \tau = 0 \quad , \quad \forall x^* \quad , \quad y^* \quad (4.11)$$

$$u^* = -\frac{1}{Le} \left(\frac{1}{C_w - 0.5} \right) \frac{\partial W_2^*}{\partial x^*} \Big|_0 \quad , \quad v^* = 0 \quad , \quad \theta = W_2^* = 0.5 \quad \text{en } x^* = 0 \quad , \quad \tau > 0 \quad , \quad \forall y^* \quad (4.12)$$

$$u^* = -\frac{1}{Le} \left(\frac{1}{C_w + 0.5} \right) \frac{\partial W_2^*}{\partial x^*} \Big|_1 \quad , \quad v^* = 0 \quad , \quad \theta = W_2^* = -0.5 \quad \text{en } x^* = 1 \quad , \quad \tau > 0 \quad , \quad \forall y^* \quad (4.13)$$

$$u^* = v^* = 0 \quad , \quad \partial\theta/\partial y^* = 0 \quad , \quad \partial W_2^*/\partial y^* = 0 \quad \text{en } y^* = 0, A \quad , \quad \tau > 0 \quad , \quad \forall x^* \quad (4.14)$$

Les flux de chaleur pariétaux se décomposent en un terme de diffusion (loi de Fourier) et en un terme d'advection (ou de transport) dû aux vitesses normales aux parois créées par le transfert de matière. Le nombre de Nusselt est défini comme le rapport entre le flux de convection (diffusion + transport) et le flux de conduction pour un mélange immobile. On obtient l'expression suivante du nombre de Nusselt local en $x^* = 0$:

$$Nu(y^*, \tau) = - \frac{\partial\theta}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0} + 0.5 \rho^* u^* = Nu_{diff} + Nu_{adv} \quad (4.15)$$

Le nombre de Nusselt moyen, \overline{Nu} , est obtenu en intégrant les valeurs locales dans la direction verticale. Une équation similaire décrit le nombre de Sherwood local. Soit :

$$Sh(y^*, \tau) = -\rho^* D^* \frac{\partial W_2^*}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0} + 0.5 Le \rho^* u^* = Sh_{diff} + Sh_{adv} \quad (4.16)$$

Compte-tenu des conditions aux limites sur les parois horizontales, les nombres de Nusselt ou de Sherwood moyens sur les parois verticales doivent être égaux en régime stationnaire (soit $\overline{Nu}(0) = \overline{Nu}(1)$ et $\overline{Sh}(0) = \overline{Sh}(1)$).

Remarque : le nombre de Sherwood moyen peut être relié au flux de matière total (adimensionnel) transféré vers/ou depuis une paroi verticale, $\dot{m}_2^* = \int_0^A \rho^* u^* dy^*$, par

$$\overline{Sh}(\tau) = Le C_w \dot{m}_2^*(\tau) \quad (4.17)$$

La partie advective du nombre de Sherwood moyen est reliée au flux massique par la relation

$$\overline{Sh}_{adv}(\tau) = 0.5 Le \dot{m}_2^*(\tau) \quad (4.18)$$

et donc

$$\overline{Sh}_{diff}(\tau) = Le(C_w - 0.5) \dot{m}_2^*(\tau) \quad (4.19)$$

ce qui montre que la composante diffusive du nombre de Sherwood est nettement plus importante que la partie advective si $C_w \gg 1$. Par exemple, si $W_{2,c} = 0$, on montre immédiatement que la partie diffusive est très supérieure à la partie advective pour un mélange très dilué (voir l'Annexe 1).

4.3 Résultats

4.3.1 Influence des conditions initiales.

La formulation développée dans ce mémoire de thèse montre que les solutions stationnaires et transitoires dépendent explicitement des conditions initiales : en régime transitoire, la pression thermodynamique et la masse volumique dépendent de θ_0 et de $W_{2,0}^*$ (équations 4.5, 4.10) ; en régime stationnaire, la masse volumique (équation 4.10) dépend toujours de θ_0 et de $W_{2,0}^*$. Cette dépendance n'apparaît pas explicitement en régime laminaire et stationnaire si l'approximation de Boussinesq est employée et si les équations de conservation sont écrites sous forme adimensionnelle. La masse volumique n'intervient en effet que par l'intermédiaire du nombre de Rayleigh dans lequel le problème du choix pertinent de la masse volumique de référence n'est généralement pas soulevé. Dans le cas de la convection purement thermique dans une cavité différentiellement chauffée, la solution stationnaire ne dépend que de trois paramètres : l'allongement, les nombres de Prandtl et de Rayleigh. Dans le modèle solutal équivalent, la solution stationnaire ne dépend aussi que de trois paramètres : l'allongement, les nombres de Schmidt et de Rayleigh massique. Il est clair que si les variations maximales de température ou de fraction massique sont très petites ($\Delta T/T_{ref}$ ou β_m très inférieurs à l'unité), la question ne se pose pas parce que $\rho_r \approx \rho(T_c) \approx \rho(T_h)$.

L'influence des conditions initiales, thermique et/ou massique, sur la solution stationnaire n'a été considérée que pour des valeurs des paramètres hors-Boussinesq, ϵ_T et ϵ_m , modérés (c'est à dire lorsque ϵ_T et ϵ_m sont inférieurs à 0,3). Le gaz pur ou le mélange binaire de gaz parfaits sont initialement immobiles avec une pression thermodynamique \bar{P}_0 et une densité $\bar{\rho}_0$ qui sont les grandeurs de référence utilisées dans la formulation. Neuf cas ont été étudiés : trois types de conditions initiales pour la convection purement thermique, pour la convection purement solutale et pour la convection thermosolutale.

1) Convection purement thermique avec la cavité initialement remplie par un gaz froid ($\theta_0 = -0,5$), par un gaz à la température moyenne des parois à $\tau > 0$ ($\theta_0 = 0$) ou par un gaz chaud ($\theta_0 = 0,5$). En dehors des conditions initiales, les valeurs des cinq autres paramètres du problème ont été fixées : $A = 1$, $Fr = 4,225 \cdot 10^{-7}$, $Pr = 0,71$, $\epsilon_T = 0,3$ et $\gamma = 1,4$.

2) Convection purement solutale avec la cavité initialement remplie par le gaz porteur ($W_{2,0}^* = -0,5$ ou $W_{2,0} = 0$), par un mélange de fraction massique égale à la moyenne des fractions massiques imposées sur les parois à $\tau > 0$ ($W_{2,0}^* = 0$) ou par un mélange composé du gaz porteur et de l'espèce "2" à sa plus grande concentration possible ($W_{2,0}^* = 0,5$, valeur imposée sur la paroi gauche). Les valeurs des cinq autres paramètres du problème ont été fixées : $A = 1$, $Fr = 4,225 \cdot 10^{-7}$, $Sc = 0,71$, $\epsilon_m = 0,3$, $C_W = 1,387$ (ou $M^* = 0,6$, $W_{2,h} = 0,53$ et $W_{2,c} = 0,0$). Il est à noter que les valeurs de M^* , $W_{2,h}$ et de $W_{2,c}$ ont été fixées de telle sorte que ϵ_m ait la même valeur que ϵ_T dans le cas purement thermique. Cependant, les solutions thermique et solutale diffèrent parce que la masse de gaz contenue dans la cavité change entre l'instant initial et l'état stationnaire, parce que les flux de diffusion n'ont pas les mêmes expressions et parce que les conditions aux limites dynamiques ne sont pas les mêmes. Pour un mélange très dilué, c'est à dire si $(W_{2,h} - W_{2,c}) \ll 1$, les solutions sont identiques.

3) Convection thermosolutale avec un mélange dont la température et la fraction mas-

sique initiales sont égales aux valeurs imposées sur la paroi froide (il s'agit donc du gaz porteur froid, d'où $\theta_0 = W_{2,0}^* = -0,5$), avec un mélange de température et composition moyennes ($\theta_0 = W_{2,0}^* = 0$) ou avec un mélange chaud et de concentration en espèce "2" maximale ($\theta_0 = W_{2,0}^* = 0,5$). Les dix paramètres du problème sont alors : $A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0,71$, $Le = 1$, $\epsilon_T = 0,2$, $\epsilon_m = -0,2$, $M^* = 4$, $W_{2,h} = 0,242$, $W_{2,c} = 0$, $\gamma = 1,4$. Nous n'avons donc considéré que le cas où les forces thermiques et solutales sont opposées.

Dans le cas purement thermique, la masse totale reste constante au cours de l'évolution thermique (puisque $\bar{p} = cste$) mais la masse volumique n'est pas uniforme en régime stationnaire. La pression thermodynamique et la température moyenne restent presque constantes si $\theta_0 = 0$ alors qu'elles augmentent si $\theta_0 = -0,5$ et diminuent si $\theta_0 = 0,5$, comme le montrent les valeurs de la pression réduite en régime stationnaire (\overline{P}_∞^*) reportées dans le tableau 1 (dans ce cas $\overline{P}_\infty^*/\overline{T}_\infty = cste$). La valeur du nombre de Nusselt moyen change comme la pression thermodynamique, avec des variations relatives similaires.

θ_0	P_∞^*	Nu
-0,5	1,167	9,665
0	0,992	8,829
0,5	0,863	8,163

TAB. 4.1 – Convection thermique : influence des conditions initiales sur la solution stationnaire ($A = 1$, $Fr = 0,4225 \cdot 10^{-6}$, $Pr = 0,71$, $\epsilon_T = 0,3$, $\gamma = 1,4$).

Si l'on considère maintenant la convection purement solutale, l'influence des conditions initiales est nettement plus grande parce la masse de fluide contenue dans la cavité change entre l'instant initial et l'état permanent. Le flux massique de l'espèce "2" dépend fortement de la valeur initiale, $W_{2,0}^*$. Si la fraction massique de l'espèce "2" est initialement faible ($W_{2,0}^* = -0,5$) la diffusion et l'injection de "2" conduit à une augmentation finale de la masse d'environ 36% (Tableau 2) et à une augmentation de 60% de la pression thermodynamique parce que la masse molaire du mélange a diminuée car on a considéré le cas $M^* = 0,6$. Il en résulte que le nombre de Sherwood moyen en régime stationnaire est plus grand lorsque $W_{2,0}^* < 0$ que lorsque $W_{2,0}^* = 0$. La situation inverse est observée si $W_{2,0}^* > 0$ parce que l'espèce "2" diffuse dans la paroi droite avec un effet d'aspiration. La masse molaire du mélange augmente donc (puisque $M_2 < M_1$) et la masse totale dans la cavité diminue d'environ 40%, la pression diminuant de $\approx 45\%$. La diminution du nombre de Sherwood moyen est encore plus importante (valeur inférieure à la moitié de celle obtenue pour $W_{2,0}^* = 0$ qui diffère de moins de 3% de celle calculée en appliquant l'approximation de Boussinesq). En définitive, ces résultats montrent que les conditions initiales massiques influent beaucoup plus que les conditions initiales thermiques dans le cas de mélanges non dilués : lorsque les conditions initiales ne correspondent pas à la valeur moyenne des conditions appliquées sur les parois, les variations importantes de masse volumique moyenne et de pression thermodynamique expliquent ce résultat.

Les résultats reportés dans le tableau 4.3 montrent l'effet des conditions initiales dans le cas de la convection thermosolutale lorsque les forces thermiques et massiques sont opposées ($Le = 1$, $\epsilon_T = 0,2$ et $\epsilon_m = -0,2$, $C_w = 3,63$) et lorsqu'une espèce lourde ($M^* = 4$) diffuse dans la cavité. Avec l'approximation de mélange très dilué, les transferts sont purement diffusifs ($\overline{Nu} = \overline{Sh} = 1$). Les faibles différences ($\rho_{max}^* - \rho_{min}^*$) reportées dans le

$W_{2,0}^*$	$\overline{\rho_\infty^*}$	$\overline{P_\infty^*}$	\overline{Sh}
-0,5	1,364	1,607	15,866
0	1,002	1,002	9,086
0,5	0,641	0,558	4,425

TAB. 4.2 – Convection solutale : influence des conditions initiales sur la solution stationnaire ($A = 1$, $Fr = 0,4225 \cdot 10^{-6}$, $Sc = 0,71$, $\epsilon_m = 0,3$, $C_W = 1,387$ ou $M^* = 0,6$, $W_{2,h} = 0.53$ et $W_{2,c} = 0.0$).

tableau 4.3 pour les trois conditions initiales pourraient laisser supposer que considérer la masse volumique comme constante est acceptable. Cependant des variations d'environ 2% dans le champ de masse volumique sont suffisantes pour générer des écarts de 8% entre \overline{Nu} et \overline{Sh} lorsque $\theta_0 = W_{2,0}^* = \pm 0,5$. Si $\theta_0 = W_{2,0}^* = 0$, ces écarts sont nettement plus faibles et on peut supposer que $\overline{Nu} \approx \overline{Sh}$.

$\theta_0 = W_{2,0}^*$	\overline{Nu}	\overline{Sh}	\dot{m}^*	$\overline{P_\infty^*}$	$\overline{\rho_\infty^*}$	ρ_{min}^*	ρ_{max}^*
-0,5	5,008	5,459	1,506	1,172	1,162	1,153	1,172
0,0	3,704	3,784	1,044	1,034	1,037	1,033	1,044
0,5	2,782	2,529	0,698	0,847	0,842	0,835	0,848

TAB. 4.3 – Convection thermosolutale : influence des conditions initiales sur la solution stationnaire ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0,71$, $Le = 1$, $\epsilon_T = 0,2$, $\epsilon_m = -0,2$, $M^* = 4$, $W_{2,h} = 0,242$, $W_{2,c} = 0.0$, $\gamma = 1,4$).

4.3.2 Analogie transfert de chaleur et de matière.

Pour une configuration géométrique donnée, l'analogie entre transfert de chaleur et transfert de matière n'existe que s'il est possible de trouver un ensemble de variables adimensionnelles telles que l'équation de l'énergie et l'équation de conservation de l'une des deux espèces soient identiques et si leurs conditions aux limites sont les mêmes. Compte tenu des hypothèses et des variables adimensionnelles introduites dans ce chapitre, les équations de conservation adimensionnelles ne peuvent être identiques qu'en régime stationnaire ($d\overline{P^*}/d\tau = 0$). Il faut aussi que $\rho^* = 1 \pm O(10^{-2})$ et $Le = 1$. Pour les gaz, la condition $Le = 1$ est plutôt $Le \approx O(1)$. La condition sur ρ^* signifie qu'il s'agit d'un mélange binaire très dilué, ce qui rend l'approximation de Boussinesq applicable. En ce qui concerne les conditions aux limites, l'introduction d'une fraction massique normalisée (W^*) permet de satisfaire les conditions de similitude (cf équations 4.12, 4.13, et 4.14).

En conclusion, l'analogie existe en régime stationnaire dans le cas de solutions diluées si $Le = 1$, ce qui implique $\overline{Nu} = \overline{Sh}$. La conséquence immédiate est qu'il est alors inutile de résoudre un problème thermosolutale : la solution est la même que celle d'un problème thermique (ou massique) avec $Ra = Ra_T + Ra_m$ si les forces thermique et solutale agissent dans le même sens et avec $Ra = Ra_T - Ra_m$ si elles agissent en sens opposés.

Lorsque les mélanges de gaz ne sont pas dilués ($\rho^* \neq 1$) alors que $Le = 1$, les distri-

butions de température et de fraction massique (normalisée) diffèrent parce que les termes de diffusion n'ont pas la même forme ($\nabla^2\theta$ et $\nabla \cdot (\rho^* \nabla W_2^*)$). Il est clair que l'écart à l'analogie dépend de l'amplitude de variations de ρ^* dans le champ de l'écoulement. C'est cette question que nous abordons dans ce paragraphe en considérant principalement les variations de $\overline{Nu}(\tau)$ et de $\overline{Sh}(\tau)$ dans les cas de convection thermique pure ou de convection solutale pure selon les valeurs de ϵ_T et de ϵ_m . Les conditions initiales correspondent toujours à un fluide au repos dont la température et la fraction massique sont les moyennes des valeurs aux parois. Soit :

$$\vec{V}^* = 0 \quad , \quad \theta_0 = 0 \quad , \quad W_{2,0}^* = 0 \quad , \quad \rho_0^* = 1 \quad , \quad \overline{P}_0^* = 1 \quad (4.20)$$

Dans les cas discutés dans ce paragraphe, on suppose que $Pr = Sc = 0,71$ ($Le = 1$) et que la cavité est carrée ($A = 1$).

4.3.2.1 Régime diffusif.

L'étude du régime de diffusion a été effectuée pour $Ra_T = 10^3$ et $Ra_m = 10^3$. Pour la convection thermique, le tableau 4.4 montre que le nombre de Nusselt reste quasiment constant dans l'intervalle de valeurs de ϵ_T considéré parce que $\theta_0 = 0$. Par contre, le nombre de Sherwood augmente de plus de 25% lorsque ϵ_m passe de $\epsilon_m = 0,1$ à $\epsilon_m = 0,4$ (tableau 4.5) bien que $W_{2,0}^* = 0$. On en conclût que l'analogie n'existe qu'en diffusion pure et en supposant la masse volumique quasiment constante, donc pour des mélanges très dilués.

	Boussinesq	$\epsilon_T = 0,1$	$\epsilon_T = 0,2$	$\epsilon_T = 0,3$	$\epsilon_T = 0,4$
\overline{Nu}	1,1169	1,1178	1,1180	1,1182	1,1185
\overline{P}_∞^*	1,0	0,999	0,996	0,992	0,986

TAB. 4.4 – Nombre de Nusselt et pression thermodynamique en régime stationnaire selon la valeur de ϵ_T ($A = 1$, $Pr = 0,71$, $Ra_T = 10^3$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-3} \epsilon_T$, $\gamma = 1,4$, $\theta_0 = 0$).

	Boussinesq	<i>cas 1</i>	<i>cas 2</i>	<i>cas 3</i>	<i>cas 4</i>
\overline{Sh}	1,1169	1,1190	1,1290	1,1709	1,3473
\overline{P}_∞^*	1,0	0,999	1,000	1,011	1,072
$\overline{\rho}_\infty^*$	1,0	1,000	1,000	1,008	1,054
\overline{m}^*	0	0,1918	0,4516	0,8430	1,6168

TAB. 4.5 – Nombre de Sherwood, pression thermodynamique, masse volumique moyenne et flux massique aux parois en régime stationnaire pour différentes valeurs de ϵ_m ($A = 1$, $M^* = 0,6$, $Ra_m = 10^3$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-3} \epsilon_m$, $Sc = 0,71$, $W_{2,0}^* = 0$). Cas 1 : $\epsilon_m = 0,1$, $C_w = 5,83$, cas 2 : $\epsilon_m = 0,2$, $C_w = 2,5$, cas 3 : $\epsilon_m = 0,3$, $C_w = 1,39$, cas 4 : $\epsilon_m = 0,4$, $C_w = 0,83$.

4.3.2.2 Régime de couches limites.

Par référence au cas dilué, nous fixons les nombres de Rayleigh thermique et massique tels que $Ra_T = Ra_m$. Le nombre de Froude varie donc avec ϵ_T ou avec ϵ_m selon les relations $Fr = \epsilon_T / (Ra_T Pr)$ ou $Fr = \epsilon_m / (Ra_m Sc)$.

En régime de couches limites ($Ra_T \gtrsim 10^5$ dans une cavité carrée), la solution de Boussinesq stationnaire n'est pas atteinte de façon monotone lorsque la condition initiale est celle d'un fluide au repos (cf Chapitre III). Les figures 4.2 et 4.3 représentent les effets hors-Boussinesq sur les évolutions des nombres de Nusselt et Sherwood moyens pour $Ra_T = Ra_m = 10^6$ et pour $Ra_T = Ra_m = 10^7$.

Dans le domaine de variations de ϵ_T considéré, la figure 4.2 ainsi que les tableaux 4.6

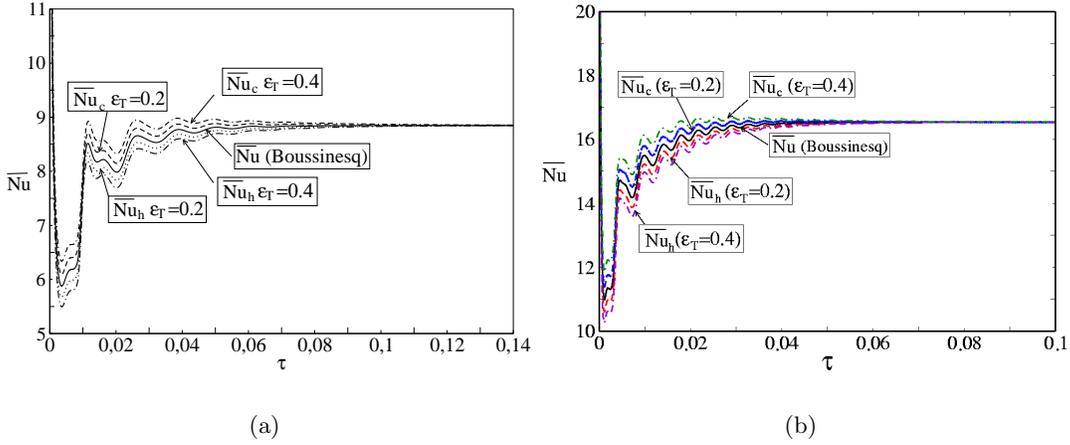


FIG. 4.2 – Variations transitoires des nombres de Nusselt moyens sur les parois chaude et froide selon la valeur de ϵ_T en convection purement thermique ($A = 1$, $Pr = 0.71$, $\gamma = 1.4$, $\theta_0 = 0$). (a) $Ra_T = 10^6$, (b) $Ra_T = 10^7$

et 4.8 montrent que les valeurs stationnaires de \overline{Nu} diffèrent peu de celles obtenues avec le modèle de Boussinesq ($\overline{Nu} = 8,826$ et $16,53$ pour $Ra_T = 10^6$ et 10^7). Cette faible différence est due au choix de la condition thermique initiale ($\theta_0 = 0$). Par contre, si la période des oscillations dépend peu de la valeur de ϵ_T , les valeurs des nombres de Nusselt sur les parois chaude et froide sont très différentes en régime transitoire, \overline{Nu}_c étant toujours supérieur à \overline{Nu}_h (ce qui n'est pas le cas pour la solution de Boussinesq si $\theta_0 = 0$). Bien que \overline{Nu} ne soit pas une variable de l'écoulement, les valeurs numériques de la période, $p = 0,011$ et $0,0035$, sont en très bon accord avec les valeurs théoriques ($p_{th} = 0,0105$ et $0,0033$).

Les évolutions des nombres de Sherwood pour différentes valeurs de ϵ_m sont représentées

sur la figure 4.3 dans le cas $M^* = 0,6$ et $W_{2,c} = 0$. Comme espéré, $\overline{Sh} = \overline{Nu}$ lorsque $\epsilon_m = 0,1$ (tableaux 4.7 et 4.9) parce que le mélange peut alors être considéré comme dilué. Pour $\epsilon_m > 0,1$, on remarque d'abord que les nombres de Sherwood sur les deux parois augmentent et sont donc toujours supérieurs à ceux obtenus dans le cas dilué, alors que les nombres de Nusselt encadrent toujours la solution basée sur l'approximation de Boussinesq. On observe ensuite que \overline{Sh}_c peut être plus petit ou plus grand que \overline{Sh}_h selon la valeur de ϵ_m et de ΔW_2 . Enfin, les valeurs stationnaires de \overline{Sh} augmentent beaucoup

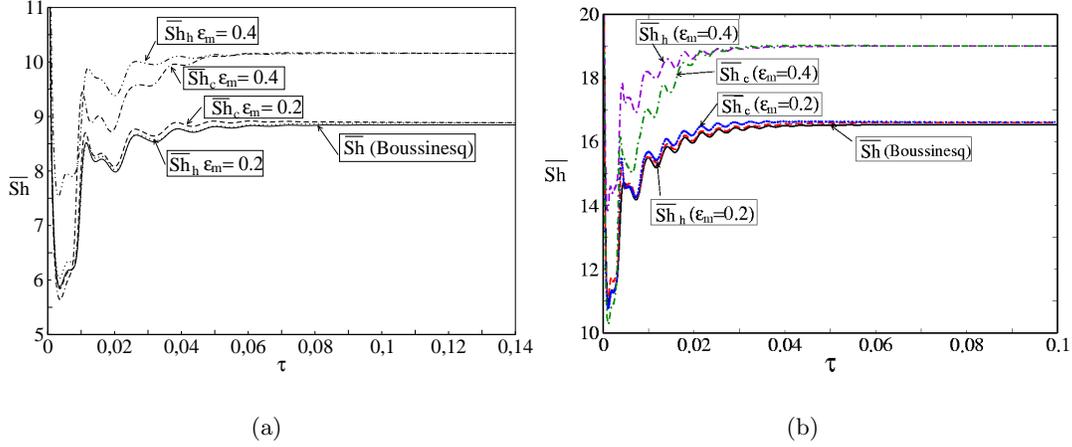


FIG. 4.3 – Variations transitoires des nombres de Sherwood moyens sur les parois chaude et froide selon la valeur de ϵ_m en convection purement solutale ($A = 1$, $M^* = 0.6$, $Sc = 0.71$, $W_{2,0}^* = 0.$, $\Delta W_2 = 0.33$ for $\epsilon_m = 0.2$ and $\Delta W_2 = 0.75$ for $\epsilon_m = 0.4$). (a) $Ra_m = 10^6$, (b) $Ra_m = 10^7$

avec ϵ_m et ΔW_2 parce que la composante advective du nombre de Sherwood augmente fortement, comme le montrent les valeurs reportées dans les tableaux 4.7 et 4.9. En ce qui concerne le comportement oscillatoire, la figure 4.3 montre que les périodes des oscillations sont pratiquement les mêmes que dans le cas thermique, ce qui est surprenant parce que les conditions aux limites dynamiques ne sont pas les mêmes. Ce résultat semble indiquer que l'origine des instabilités qui conduit à ce comportement oscillatoire est peu sensible aux conditions aux limites dynamiques.

Il est à noter que les valeurs des pressions thermodynamiques en régime stationnaire reportées dans les tableaux 4.4, 4.6 et 4.8 ne dépendent que de ϵ_T alors qu'elles sont indépendantes de Ra_T . Ce résultat est cohérent parce que les conditions initiales sont les mêmes et parce que, en régime stationnaire, la température moyenne du fluide est toujours la moyenne des températures des parois. Si donc $\bar{\rho}_\infty = \rho_0$ et $\bar{T}_\infty = T_0$ quel que soit Ra_T , alors \bar{P}_∞ est constante pour une valeur donnée de ϵ_T .

En convection solutale, l'analyse est plus complexe. Les valeurs de \bar{P}_∞^* reportées dans les tableaux 4.5, 4.7 et 4.9 indiquent que la pression thermodynamique dépend marginalement de Ra_m (écart maximal de 2,3%). Pour une cavité carrée isotherme, l'équation 4.5 s'écrit en régime stationnaire

$$\bar{P}_\infty^* = \frac{1}{\int_0^A \int_0^1 \left(\frac{\epsilon_m W_{2,0}^* + 1}{\epsilon_m W_2^* + 1} \right) dx^* dy^*} \{1 + \Delta m_2^*\} = \frac{\bar{\rho}_\infty}{\bar{M}_\infty} R \frac{T_0}{P_0} \quad (4.21)$$

Par conséquent la pression thermodynamique stationnaire dépend des valeurs moyennes de la masse volumique et de la masse molaire du mélange. Avec le choix de la condition initiale ($W_{2,0}^* = 0$) et du rapport des masses molaires des constituants ($M^* = 0,6$), le rapport $\bar{\rho}_\infty / \bar{M}_\infty$ est à peu près constant, ce qui explique le résultat obtenu. Ce résultat n'est pas généralisable.

Les écarts entre les nombres de Nusselt et de Sherwood pour de mêmes nombres de Rayleigh thermique et solutal ($Ra_T = Ra_m$) et de mêmes valeurs des paramètres hors-Boussinesq ($\epsilon_T = \epsilon_m$) diminuent avec le nombre de Rayleigh comme le montrent les tableaux 4.4 à 4.9. Si l'on considère par exemple le cas $\epsilon_T = \epsilon_m = 0,4$, on observe que \overline{Sh} est supérieur de $\approx 20\%$ à \overline{Nu} pour $Ra = 10^3$ et de $\approx 15\%$ pour $Ra = 10^7$. Ce résultat s'explique par l'influence dominante des termes de diffusion devant les termes de transport à $Ra = 10^3$: comme leurs expressions sont différentes dans les équations de l'énergie et des espèces, les couches de diffusion massique et thermique diffèrent d'autant plus que Ra est faible (figure 4.4).

	Boussinesq	$\epsilon_T = 0,1$	$\epsilon_T = 0,2$	$\epsilon_T = 0,3$	$\epsilon_T = 0,4$
\overline{Nu}	8.826	8.827	8.828	8.829	8.831
\overline{P}_∞^*	1.0	0.999	0.996	0.992	0.986

TAB. 4.6 – Nombre de Nusselt et pression thermodynamique en régime stationnaire selon la valeur de ϵ_T ($A = 1$, $Pr = 0,71$, $Ra_T = 10^6$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-6} \epsilon_T$, $\gamma = 1,4$, $\theta_0 = 0$).

	Boussinesq	<i>cas 1</i>	<i>cas 2</i>	<i>cas 3</i>	<i>cas 4</i>
\overline{Sh}	8.826	8.826	8.864	9.086	10.129
\overline{P}_∞^*	1.0	0.999	0.997	1.002	1.051
$\overline{\rho}_\infty^*$	1.0	0.999	0.998	1.002	1.038
\dot{m}^*	0	1.513	3.546	6.542	12.154

TAB. 4.7 – Nombre de Sherwood, pression thermodynamique, masse volumique moyenne et flux massique aux parois en régime stationnaire pour différentes valeurs de ϵ_m ($A = 1$, $M^* = 0.6$, $Ra_m = 10^6$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-6} \epsilon_m$, $Sc = 0,71$, $W_{2,0}^* = 0$). Cas 1 : $\epsilon_m = 0,1$, $C_w = 5,83$, cas 2 : $\epsilon_m = 0,2$, $C_w = 2,5$, cas 3 : $\epsilon_m = 0,3$, $C_w = 1,39$, cas 4 : $\epsilon_m = 0,4$, $C_w = 0,83$.

	Boussinesq	$\epsilon_T = 0,1$	$\epsilon_T = 0,2$	$\epsilon_T = 0,3$	$\epsilon_T = 0,4$
\overline{Nu}	16,532	16,532	16,534	16,538	16,542
\overline{P}_∞^*	1,0	0,999	0,996	0,992	0,986

TAB. 4.8 – Nombre de Nusselt et pression thermodynamique en régime stationnaire selon la valeur de ϵ_T ($A = 1$, $Pr = 0,71$, $Ra_T = 10^7$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-7} \epsilon_T$, $\gamma = 1,4$, $\theta_0 = 0$).

	Boussinesq	cas 1	cas 2	cas 3	cas 4
\overline{Sh}	16,532	16,533	16,608	17,037	19,004
\overline{P}_∞^*	1,0	0,999	0,997	1,004	1,047
$\overline{\rho}_\infty^*$	1,0	0,999	0,998	1,003	1,035
\dot{m}^*	0	2,834	6,643	12,266	22,804

TAB. 4.9 – Nombre de Sherwood, pression thermodynamique, masse volumique moyenne et flux massique aux parois en régime stationnaire pour différentes valeurs de ϵ_m ($A = 1$, $M^* = 0.6$, $Ra_m = 10^7$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-7} \epsilon_m$, $Sc = 0,71$, $W_{2,0}^* = 0$). Cas 1 : $\epsilon_m = 0,1$, $C_w = 5,83$, cas 2 : $\epsilon_m = 0,2$, $C_w = 2,5$, cas 3 : $\epsilon_m = 0,3$, $C_w = 1,39$, cas 4 : $\epsilon_m = 0,4$, $C_w = 0,83$.

4.3.3 Convection solutale : influence du rapport des masses molaires.

La définition de ϵ_m (Eq. 4.6) conduit à des valeurs négatives de ϵ_m lorsque la masse molaire du gaz diffusant dans la cavité est supérieure à celle du gaz inerte (espèce "1"). Compte tenu des conditions aux limites appliquées dans cette étude ($W_{2,h} > W_{2,c}$, où l'indice "c" représente la paroi droite) le sens de circulation du mélange est le sens trigonométrique. Pour $M^* = 1$, le transfert de matière est purement diffusif et le mélange est donc immobile à condition que C_w soit très supérieure à l'unité, c'est à dire que $\Delta W_2 \ll 0,1$, ce qui correspond à une forte dilution de l'espèce "2".

Dans ce paragraphe, les écarts aux solutions basées sur l'approximation de Boussinesq sont analysés en fonction du rapport $M^* = M_2/M_1$ variant dans le domaine $0,1 \leq M^* \leq 10$, la différence de fraction massique étant fixée à $\Delta W_2 = 0,1$. On suppose en outre que $W_{2,h} = 0,1$ et $W_{2,c} = 0$, que le nombre de Froude est constant ($Fr = 10^{-7}$) et que $Le = 1$, $Sc = 0,71$.

Il faut d'abord noter que le paramètre ϵ_m augmente rapidement lorsque M^* décroît de $M^* = 0,9$ à $M^* = 0,1$ alors que l'augmentation de $|\epsilon_m|$ est beaucoup plus faible lorsque M^* passe de $M^* = 1,1$ à $M^* = 10$. On peut donc prévoir que les effets hors-Boussinesq sont plus importants lorsqu'un gaz plus léger que le gaz porteur diffuse dans la cavité.

L'influence de M^* a été étudiée pour les deux conditions initiales suivantes :

1) La cavité est initialement remplie par le gaz inerte (c'est à dire que $W_{2,0} = 0$ ou bien $W_{2,0}^* = -0,5$) et l'espèce "2" commence à diffuser dans la cavité à $\tau > 0$, uniquement à partir de la paroi gauche. Comme la masse du gaz inerte est constante, la masse totale du mélange augmente, quelle que soit la valeur de M_2 . Cependant, si $M^* \ll 1$, une faible augmentation de la masse volumique du mélange conduit à une forte augmentation de la pression thermodynamique parce que le nombre de molécules contenue dans la cavité devient beaucoup plus élevé. Par contre, la pression ne varie pas beaucoup si $M^* \gg 1$. On en déduit que, pour un ensemble de paramètres donné (autres que M^*), les effets hors Boussinesq sont plus importants pour les petites valeurs de M^* que pour les grandes. La figure 4.5, qui montre les variations, en régime stationnaire, du nombre de Sherwood moyen en fonction du rapport de masse molaire, confirme cet effet. Cependant, l'écart à la solution de Boussinesq reste marginal si $M^* \geq 0,15$.

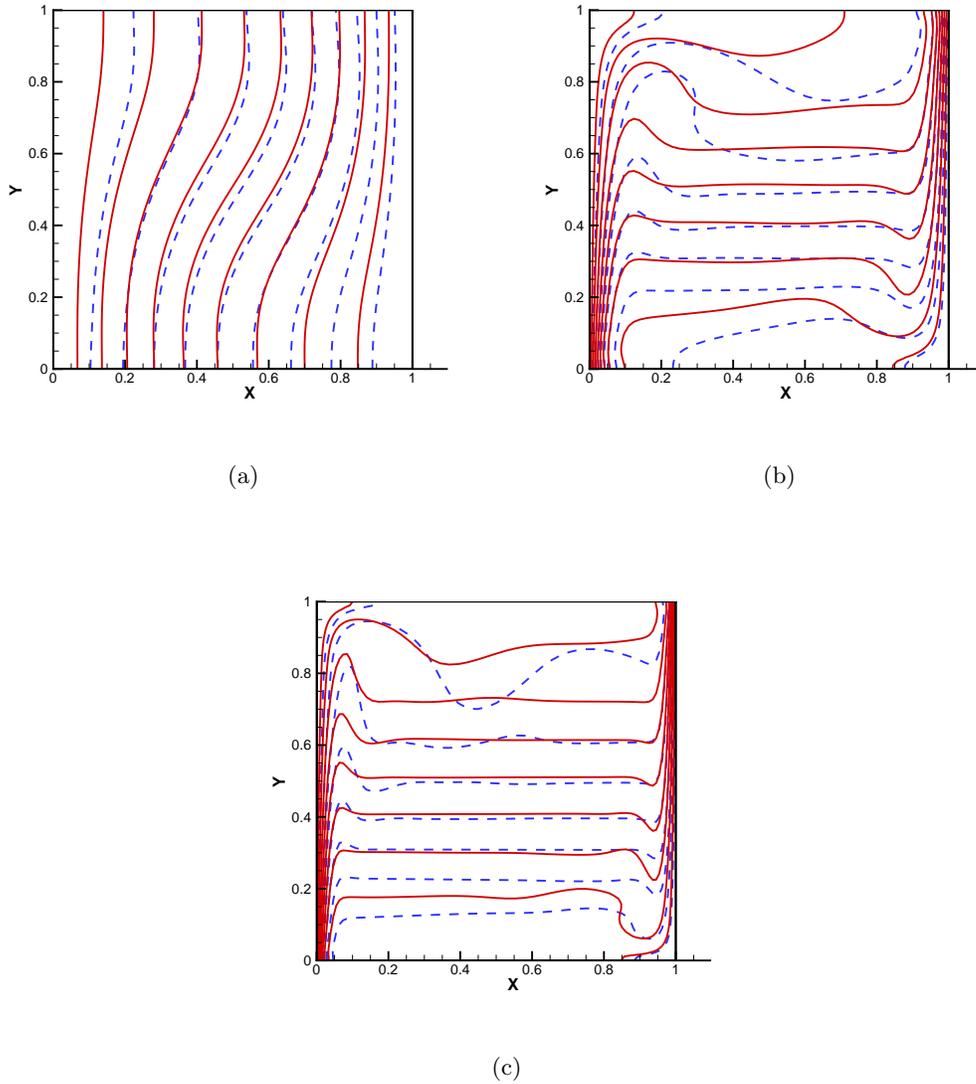


FIG. 4.4 – Comparaison de θ (lignes en traits pleins) et W_2^* (lignes en traits pointillés) pour le cas 4 dans les tableaux 4.4 à 4.9 : (a) $Ra = 10^3$, (b) $Ra = 10^6$, (c) $Ra = 10^7$

2) La cavité est initialement remplie par un mélange composé du gaz inerte et de l'espèce "2" dont la fraction massique est la moyenne des fractions massiques imposées sur les parois (c'est à dire $W_{2,0} = W_{2,r}$ ou bien $W_{2,0}^* = 0$). Si $M^* \ll 1$, la diffusion de l'espèce "2" dans la paroi droite produit une réduction sensible de la pression thermodynamique, associée à la perte d'un grand nombre de molécules. Lorsque $M^* \gg 1$, la pression reste sensiblement constante. La figure 4.5 montre que, comme dans le cas précédent, les effets hors-Boussinesq sont plus importants lorsque $M^* \ll 1$. Cette figure montre aussi qu'ils dépendent fortement des conditions initiales.

Les lignes de courant et les isolignes de fraction massique de l'espèce "2" sont représentées

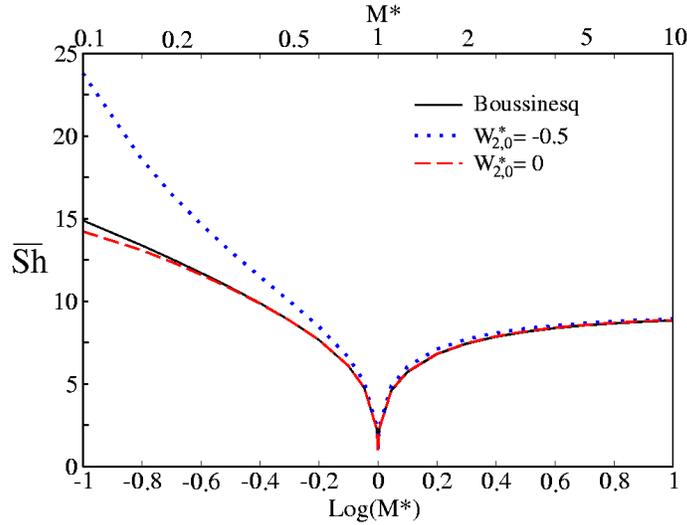


FIG. 4.5 – *Convection solutale* : Dépendance du nombre de Sherwood moyen avec le rapport des masses molaires selon les conditions initiales et comparaison avec la solution basée sur l’approximation de Boussinesq ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Le = 1$, $Sc = 0.71$, $\Delta W_2 = 0.1$).

sur la figure 4.6 (en régime stationnaire) pour $M^* = 0, 1$ et pour $M^* = 10$.

Lorsque $M^* = 0, 1$, le sens de circulation est dans le sens horaire et la structure de l’écoulement n’est plus centrosymétrique, ce qui traduit les effets hors-Boussinesq. On remarque de très forts gradients de fraction massique en bas de la paroi gauche (où $W_{2,h} = 0, 1$) et en haut de la paroi droite (où $W_{2,c} = 0$). Dans ces zones pariétales, la composante normale de la vitesse est aussi maximale (Fig. 4.7a), ce qui signifie que les composantes advective et diffusive du nombre de Sherwood local (Eq. 4.16) y sont aussi maximales. Lorsque le fluide monte le long de la paroi gauche la vitesse d’injection de l’espèce ”2” dans la couche limite diminue mais le fluide est accéléré parce que sa masse volumique diminue sous l’effet de l’injection d’une espèce plus légère. L’inverse est observé sur la paroi droite dans laquelle diffuse l’espèce légère.

Lorsque $M^* = 10$, le sens de circulation est anti-horaire et, comme mentionné précédemment, la structure de l’écoulement est très proche de celle obtenue en utilisant l’approximation de Boussinesq. Les profils de vitesses normales aux parois, en régime permanent, sont représentés sur la figure 4.7b. Le nombre de Sherwood est maximal en haut de la paroi gauche de même que les vitesses d’injection.

Les profils de vitesses verticales dans les plans horizontaux $y^* = 0, 25, 0, 5$ et $0, 75$ sont représentés sur les figures 4.8a et 4.8b. On remarque, d’une part, une plus forte dissymétrie entre les profils de vitesse le long des parois droite et gauche pour $M^* = 0, 1$ que pour $M^* = 10$ et, d’autre part, que les vitesses sont plus de trois fois plus élevées pour $M^* = 0, 1$. Ces profils de vitesse confirment que les effets hors-Boussinesq sont plus importants pour des rapports de masse molaire inférieurs à l’unité et sont accord avec les variations de \overline{Sh} tracées sur la figure 4.5. Les oscillations non-symétriques autour de $v^* = 0$ pour $M^* = 0, 1$ donnent une autre représentation des effets des variations de masse volumique.

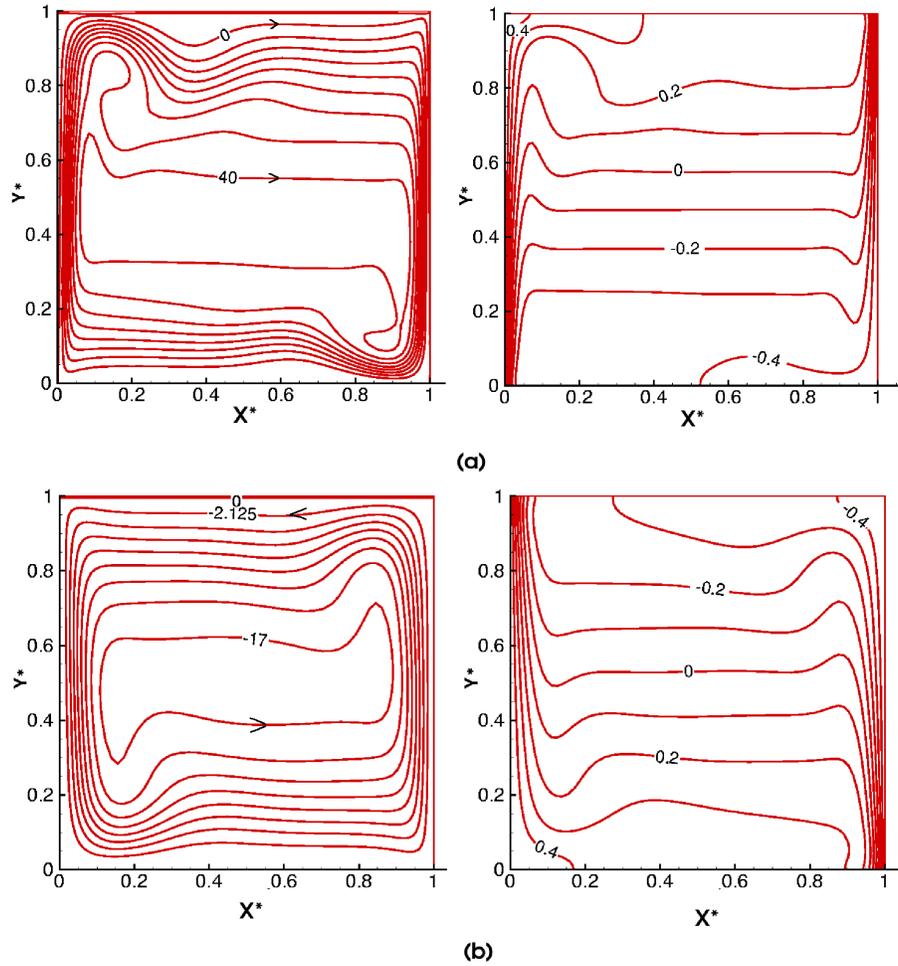


FIG. 4.6 – *Convection solutale* : Lignes de courant et iso-fractions massiques a) $M^* = 0.1$ b) $M^* = 10$ ($A = 1, Fr = 10^{-7}, Le = 1, Sc = 0.71, \Delta W_2 = 0.1, W_{2,0}^* = -0.5$).

4.3.4 Convection thermosolutale.

L'étude de la convection thermosolutale a été limitée au cas où les forces d'origine thermique et solutale ont la même intensité. Plus spécifiquement, dans le cas $\epsilon_T = |\epsilon_m| = 0, 2$. Elles sont alors dans le même sens si $M^* = 0, 25$ et elles sont en sens opposé si $M^* = 4$. Les valeurs des nombres de Froude, Prandtl et Lewis ont été fixées à $Fr = 10^{-7}, Pr = 0, 71$ et $Le = 1$.

Approximation de Boussinesq. Lorsque la formulation du problème est basée sur l'approximation de Boussinesq, les distributions de température et de fraction massique W_2^* sont confondues. En conséquence, les flux thermiques et massiques adimensionnels sont identiques.

- Si $\epsilon_m = -\epsilon_T$, les flux sont purement diffusifs ($\overline{Nu} = \overline{Sh} = 1$), à condition toutefois que les vitesses d'injection et d'aspiration soient négligeables, c'est à dire pour de très faibles fractions massiques de l'espèce "2".

- Si $\epsilon_m = \epsilon_T$, $\overline{Nu} = \overline{Sh} = 14, 19$ est la valeur trouvée dans les cas purement thermique ou purement solutal avec Ra_T ou $Ra_m = 5, 634 \times 10^6$, ou bien dans le cas thermosolutal avec $Ra_T = Ra_m = 2, 817 \times 10^6$.

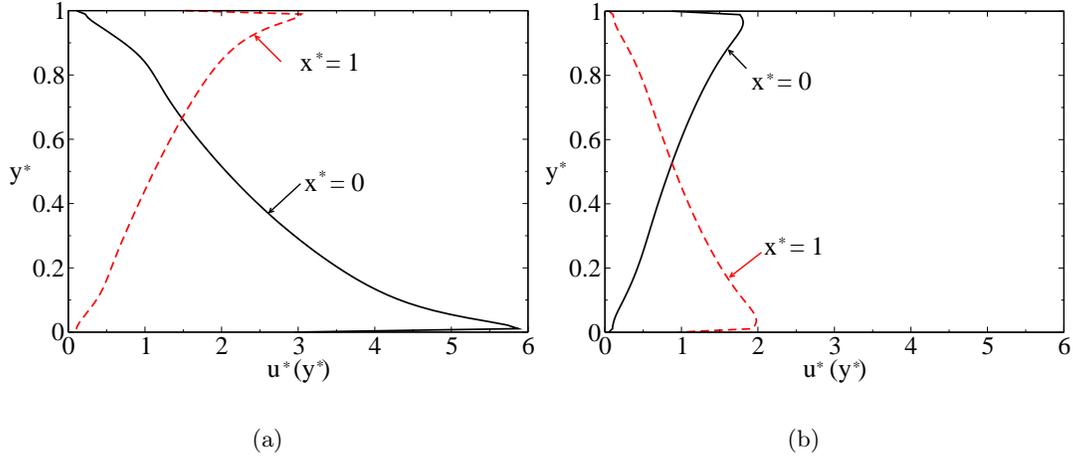


FIG. 4.7 – Profils des vitesses d’injection et d’aspiration le long des parois verticales ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Le = 1$, $Sc = 0.71$, $\Delta W_2 = 0.1$, $W_{2,0}^* = -0.5$) a) $M^* = 0.1$ b) $M^* = 10$

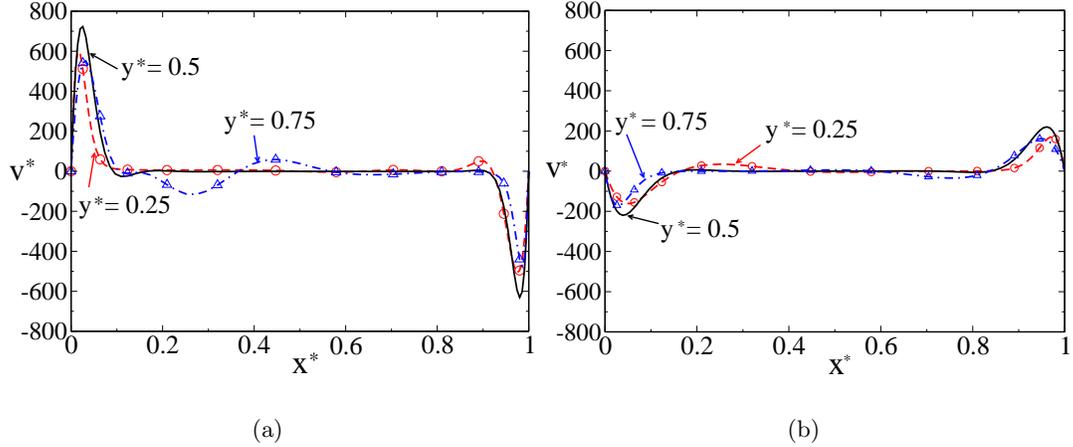


FIG. 4.8 – Profils de vitesses verticales dans les plans horizontaux $y^* = 0,25, 0,5$ et $0,75$ ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Le = 1$, $Sc = 0.71$, $\Delta W_2 = 0.1$, $W_{2,0}^* = -0.5$) a) $M^* = 0.1$ b) $M^* = 10$

Approximation faiblement compressible. Lorsque la cavité est initialement remplie par un mélange caractérisé par $\theta_0 = W_{2,0}^* = 0$ (moyenne des valeurs pariétales), les écarts avec la solution de Boussinesq sont très faibles en régime permanent, du moins pour ces valeurs de ϵ_m et ϵ_T . On considérera donc dans la suite le cas d’une cavité initialement remplie par le gaz porteur à la température de la paroi froide, soit $\theta_0 = -0,5$ et $W_{2,0}^* = -0,5$ (ou $W_{2,0} = 0$). A $\tau > 0$, on suppose aussi que la fraction massique sur la paroi froide est maintenue à $W_{2,c} = 0$. Cela implique que $\Delta W_2 = W_{2,h}$, $W_{2,r} = W_{2,h}/2$ et $C_w = 1/W_{2,h} - 0,5$. Si ϵ_m est fixé, il faut donc faire varier simultanément $W_{2,h}$ et M^* .

4.3.4.1 Forces thermique et solutale dans la même direction : $M^* = 0,25$.

Les isocontours de la fonction de courant, de la température, de la fraction massique de l'espèce "2" et de la masse volumique sont représentées sur la figure 4.9. Comme ϵ_m est positif, le mouvement du fluide s'effectue dans le sens horaire (Fig. 4.9a) et la moitié inférieure de la cavité est remplie par un mélange froid, essentiellement constitué par le gaz porteur (Fig. 4.9b). La composante advective du transfert de matière pariétal fait que la fonction de courant n'est pas constante le long des parois (Fig. 4.9a), comme le montre la ligne de courant $\psi = 0$ qui émerge du bas de la paroi gauche, se détache nettement de la paroi supérieure et disparaît dans la partie supérieure de la paroi droite. Les différences entre les isothermes et les iso-fractions massiques (Fig. 4.9b) mettent en évidence les écarts avec la solution de Boussinesq : les plus grands écarts entre les distributions de température et de fraction massique se situent dans le bas de la cavité où la stratification verticale de l'espèce la plus légère est moindre que la stratification de température, comme le montrent les tracés des isolignes $W_2^* = 0, 1$ et $0, 2$: l'espèce légère migre naturellement vers le haut de la cavité, même dans un mélange froid. Dans la partie supérieure de la cavité, les différences avec la solution de Boussinesq sont négligeables.

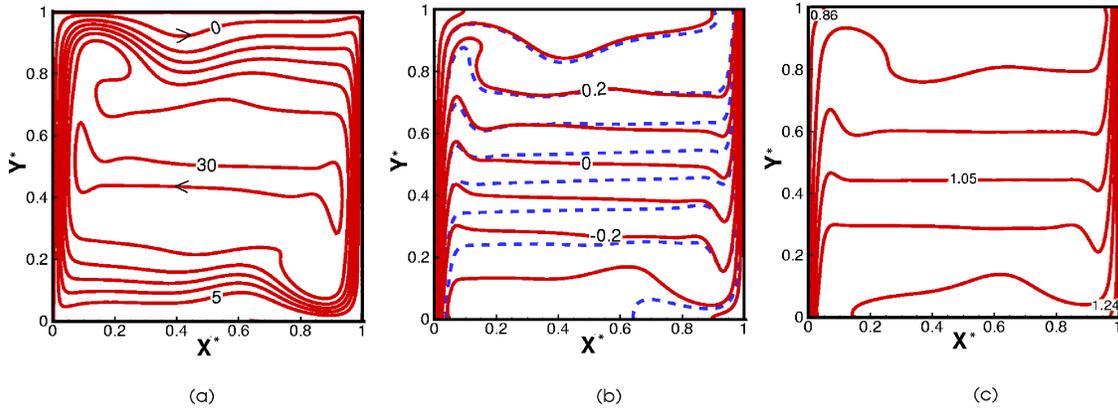


FIG. 4.9 – Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime stationnaire dans le cas : $A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1$, $M^* = 0.25$, $C_w = 13.0$ or $\Delta W_2 = 0.074$, $\theta_0 = W_{2,0}^* = -0.5$, $\epsilon_m = \epsilon_T = 0.2$, $\gamma = 1.4$

Les variations des nombres de Nusselt et de Sherwood locaux le long des parois verticales sont représentées sur la figure 4.10. Les variations des contributions diffusives et advectives de Nu et de Sh (Eqs. 4.15 et 4.16) sont aussi représentées. Comme les forces thermique et solutale sont dans le même sens, les plus grands flux de chaleur et de matière sont localisés en bas de la paroi chaude et en haut de la paroi froide. Lorsque $Le = 1$, les contributions advectives des flux sont égales ($\overline{Nu}_{adv} = \overline{Sh}_{adv} = 0,5 \dot{m}^*$) alors que les contributions diffusives diffèrent. Nu_{adv} et Sh_{adv} sont positifs du bas en haut de la cavité, ce qui traduit une injection continue de chaleur et de matière dans les couches limites. L'inverse est observé entre le haut et le bas de la paroi froide (effet similaire à une aspiration). Cependant, compte tenu des valeurs des paramètres, l'advection de chaleur et de matière est beaucoup plus faible que la diffusion parce que la relativement grande valeur de C_w ($C_w = 13$) conduit à de faibles valeurs des vitesses normales aux parois.

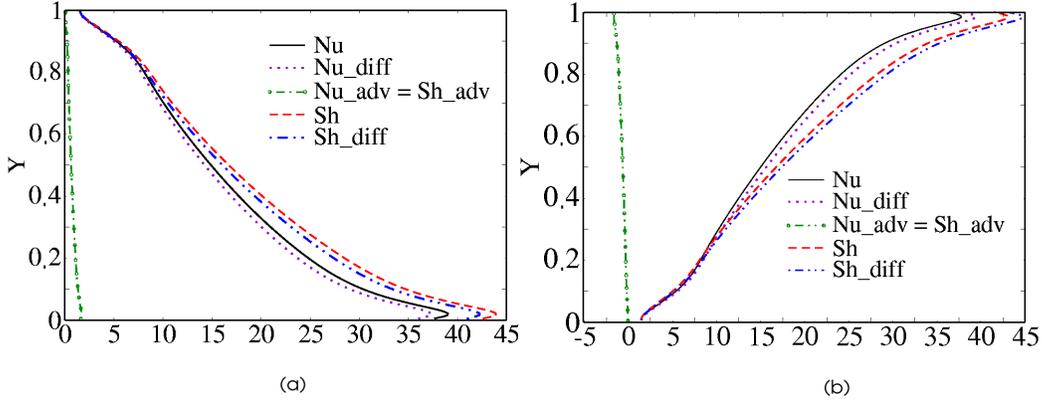


FIG. 4.10 – Distributions stationnaires des nombres de Nusselt et de Sherwood ainsi que de leurs composantes advective et diffusive le long des parois chaude (a) et froide (b) dans le cas : $A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1$, $M^* = 0.25$, $C_w = 13.0$ or $\Delta W_2 = 0.074$, $\theta_0 = W_{2,0}^* = -0.5$, $\epsilon_m = \epsilon_T = 0.2$, $\gamma = 1.4$.

Les valeurs moyennes des quantités reportées dans le tableau 4.10 donnent une autre indication des effets hors-Boussinesq. Par exemple, les différences entre \overline{Nu} et \overline{Sh} ne peuvent être dues qu'aux variations de masse volumique dans les termes de transport et de diffusion puisque $Le = 1$ et $\epsilon_m = \epsilon_T$. Ainsi, l'écart relatif $(\overline{Nu} - \overline{Sh})/\overline{Nu}$ peut être considéré comme un indicateur des effets hors-Boussinesq. D'autre part, les contributions advectives de \overline{Nu} et de \overline{Sh} peuvent être comparées à ce qu'elles valent lorsque l'approximation de Boussinesq est appliquée, c'est à dire lorsque $Ra_T = Ra_m = 2,857 \times 10^6$, $Pr = 0.71$ et $Le = 1$. La comparaison entre les valeurs de \dot{m}^* reportées dans le tableau 4.10 montre une différence de l'ordre de 30%. Les différences entre \overline{Nu} et \overline{Sh} montrent aussi que le transfert de matière est nettement plus sensible aux variations de masse volumique que ne l'est le transfert de chaleur.

M^*	Non-Boussinesq								Boussinesq	
	ϵ_m	Nu	Sh	\dot{m}^*	P^*	$\bar{\rho}^*$	$\bar{\rho}_{min}^*$	$\bar{\rho}_{max}^*$	$Nu = Sh$	\dot{m}^*
0.25	0.2	16.34	18.40	1.415	1.255	1.033	0.840	1.255	14.18	1.091
4.0	-0.2	5.008	5.459	1.506	1.172	1.162	1.153	1.172	1.007	0.278

TAB. 4.10 – Grandeurs adimensionnelles moyennes en régime stationnaire pour deux valeurs du rapport des masses molaires ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Le = 1$, $Pr = 0.71$, $\epsilon_T = 0.2$, $\gamma = 1.4$, $\theta_0 = W_0^* = -0.5$, $W_{2,c} = 0$, $W_{2,h} = 0,074$ si $M^* = 0,25$ et $W_{2,h} = 0,242$ si $M^* = 4$).

4.3.4.2 Forces thermique et solutale dans des directions opposées : $M^* = 4$.

Dans le cas $M^* = 4$, le choix de la valeur $\epsilon_m = -\epsilon_T = 0.2$ avec $W_{2,r} = \Delta W_2/2$ (soit $W_{2,c} = 0$) impose que $\Delta W_2 = 0,242$. On en déduit que $C_w = 3,625$. Par conséquent, l'effet des vitesses normales aux parois est relativement plus important que dans le cas précédent.

Avec l'approximation de Boussinesq, le terme d'Archimède s'annule mais les composantes normales des vitesses aux parois ne sont pas nulles. Ces composantes sont presque uniformément distribuées le long des parois puisqu'elles sont liées à un gradient de fraction massique relativement uniforme de bas en haut de la cavité. Il en résulte un écoulement horizontal qui ressemble à un écoulement de Poiseuille (Figure 4.11a) parce que la composante verticale de la vitesse est quasiment nulle dans la majeure partie de la cavité. Les isothermes et les iso-fractions massiques sont pratiquement confondues et sont presque parallèles aux parois (Figure 4.11b). Cependant, les gradients horizontaux de température et de fraction massique sont plus importants le long de la paroi froide du fait de l'aspiration. L'avant dernière colonne du tableau 4.10 montre que les nombres de Nusselt et de Sherwood moyens sont légèrement supérieurs à l'unité. Cette augmentation est uniquement due à la partie advective (environ 14%).

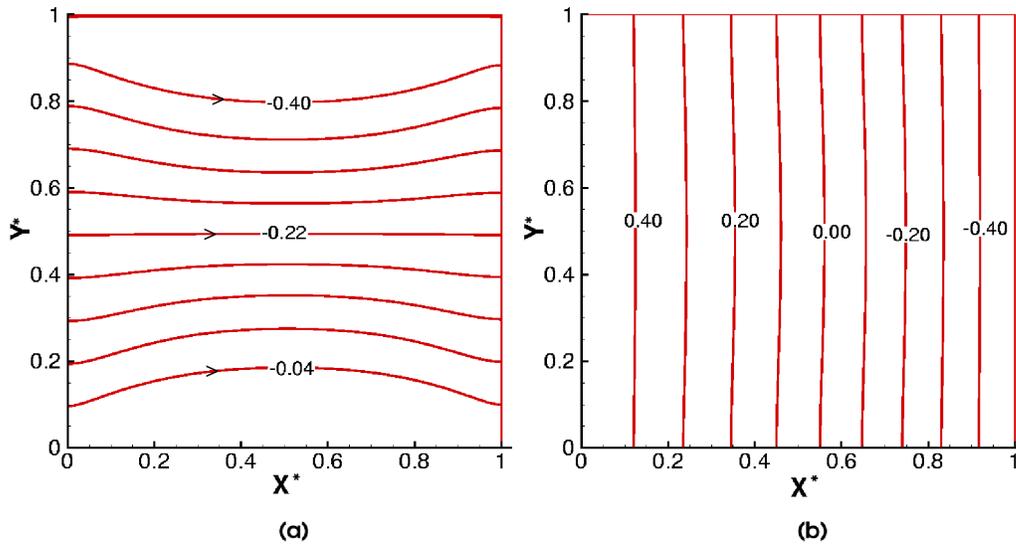


FIG. 4.11 – Lignes de courant (a), isothermes and iso-fractions massiques (b) en régime stationnaire : solutions basées sur l'approximation de Boussinesq lorsque les forces solutales et thermiques sont opposées et en tenant compte des vitesses massiques le long des parois verticales ($A = 1$, $Ra_T = 2.187 \times 10^6$, $Ra_m = -2.187 \times 10^6$, $Pr = 0.71$, $Le = 1$, $M^* = 2$, $x_{2,h} = 0.364$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = 0.2$, $\epsilon_m = -0.2$, $\gamma = 1.4$).

Les modifications de la structure de l'écoulement prédite par la formulation hors Boussinesq sont nettement plus grandes que lorsque les forces thermique et solutales agissent dans le même sens. La première raison est que l'écart maximal de fraction massique est beaucoup plus grand ($\Delta W_2 = 0,242$ au lieu de $\Delta W_2 = 0,074$ si $\epsilon_m = 0,2$), ce qui conduit à une importance relative des flux d'advection sur les parois, thermique comme massique, beaucoup plus grande ($C_w = 3,625$ au lieu de $C_w = 13$). Les comparaisons des valeurs de \dot{m}^* avec celles de \overline{Nu} ou \overline{Sh} (tableau 4.10) le montrent clairement. Bien que les distributions de température et de fraction massique soient très proches et que les gradients de masse volumique soient très petits ($(\rho_{max} - \rho_{min})$ de l'ordre de 2%, Fig. 4.12c), les vitesses d'injection et d'aspiration sur les parois gauche et droite génèrent un écoulement de structure assez complexe et très instable (Fig.4.12a) : une grande cellule de fluide chaud et plus

dense, tournant dans le sens trigonométrique, se développe le long de la paroi chaude et occupe une grande partie de la cavité ; une cellule contrarotative de faible intensité occupe la partie haute et droite de la cavité. Les figures 4.12b et 4.12c montrent que de forts gradients de température, de fraction massique et de masse volumique sont créés dans la partie inférieure de la paroi froide parce que les effets d'aspiration y sont plus forts.

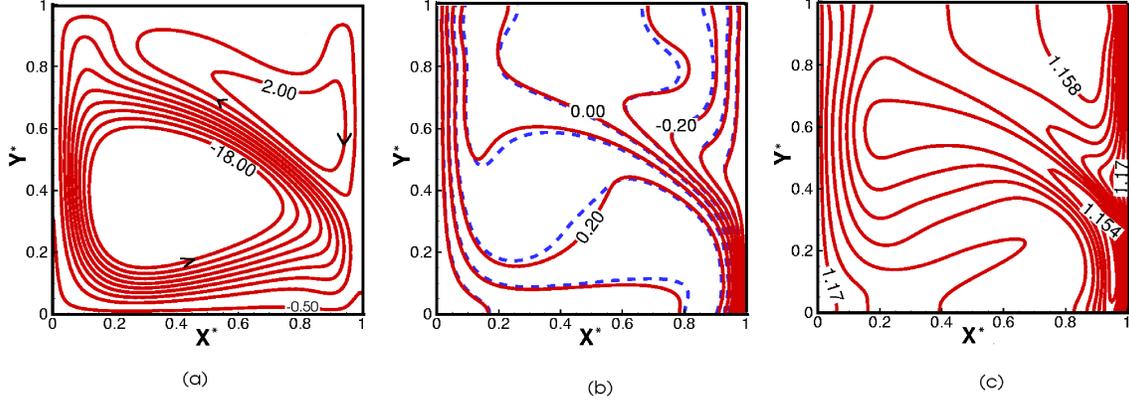


FIG. 4.12 – Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime stationnaire dans le cas : $A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1$, $M^* = 4$, $C_w = 3.625$ or $\Delta W_2 = 0.242$, $\theta_0 = W_{2,0}^* = -0.5$, $\epsilon_T = 0.2$, $\epsilon_m = -0.2$, $\gamma = 1.4$.

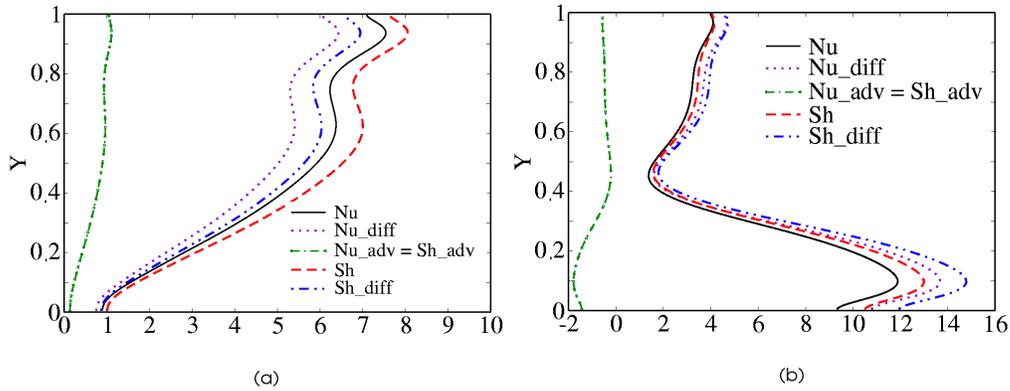


FIG. 4.13 – Distributions stationnaires des nombres de Nusselt et de Sherwood ainsi que de leurs composantes advective et diffusive le long des parois chaude (a) et froide (b) dans le cas : $A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1$, $M^* = 4$, $C_w = 3.625$ or $\Delta W_2 = 0.242$, $\theta_0 = W_{2,0}^* = -0.5$, $\epsilon_T = 0.2$, $\epsilon_m = -0.2$, $\gamma = 1.4$.

Les variations des nombres de Nusselt et Sherwood locaux le long des parois chaude et froide sont représentées sur la figure 4.13. Contrairement au cas précédent ($\epsilon_T = \epsilon_m = 0, 2$), les densités de flux maximales sont maintenant localisées en haut de la paroi chaude et en bas de la paroi froide et sont associées à la cellule principale. La structure bicellulaire de l'écoulement induit des oscillations, plus accentuées dans la partie supérieure de

la paroi chaude où l’empreinte de la cellule secondaire est plus marquée. Les profils des composantes advectives des nombres de Nusselt et Sherwood indiquent que l’injection se maintient sur la plus grande partie de la paroi chaude alors que l’aspiration est limitée à la partie inférieure de la paroi froide. Enfin, les comparaisons entre les valeurs des nombres de Nusselt et Sherwood moyens basés sur l’approximation faiblement compressible et celles basées sur l’approximation de Boussinesq (tableau 4.10) mettent en évidence de forts effets hors-Boussinesq puisque les flux de chaleur et de matière sont de l’ordre de cinq fois supérieurs.

4.3.4.3 Influence de M^*

M^*	Non-Boussinesq								Boussinesq	
	ϵ_m	Nu	Sh	\dot{m}^*	P^*	$\bar{\rho}^*$	$\bar{\rho}_{min}^*$	$\bar{\rho}_{max}^*$	$Nu = Sh$	\dot{m}^*
0.25	0.261	17.44	20.07	2.112	1.306	1.045	0.822	1.306	14.74	1.551
0.5	0.095	14.67	16.19	1.704	1.215	1.048	0.903	1.215	13.07	1.376
2.0	-0.051	11.56	12.32	1.296	1.137	1.051	0.979	1.137	10.84	1.141
4.0	-0.078	10.83	11.46	1.206	1.124	1.051	0.994	1.124	10.27	1.081

TAB. 4.11 – Grandeurs moyennes en régime stationnaire pour quatre valeurs de la masse molaire réduite ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0,71$, $Le = 1$, $\epsilon_T = 0,2$, $\gamma = 1,4$, $C_w = 9,5$, $W_{2,h} = 0,1$, $W_{2,c} = 0,0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0,5$).

Pour les résultats reportés dans le tableau 4.11, les fractions massiques sur les parois sont toujours $W_{2,h} = 0,1$ et $W_{2,c} = 0$. En conséquence, ϵ_m varie avec M^* mais le paramètre C_w reste constant ($C_w = 9,5$). Les effets hors-Boussinesq sont plus importants lorsqu’une espèce légère diffuse parce que ϵ_m augmente rapidement quand M^* décroît alors que la valeur asymptotique de $|\epsilon_m|$ est très petite pour de grandes valeurs de M^* si $\Delta W_2 \ll 1$: on en déduit que l’approximation de Boussinesq est automatiquement satisfaite si la masse molaire de l’espèce ”2” est très supérieure à celle du gaz porteur, du moins lorsque $\Delta W_2 = 0,1$.

Cette conclusion doit cependant être modérée parce que la différence de fraction massique entre les parois intervient aussi dans l’expression de ϵ_m . Pour les paramètres considérés ici, $\epsilon_m \rightarrow 2$ si $M^* \rightarrow 0$ et $\epsilon_m \rightarrow -0,1$ si $M^* \rightarrow \infty$. Les résultats reportés dans le tableau 4.11 montrent que les effets hors-Boussinesq sont nettement plus importants pour $M^* = 0,25$ que pour $M^* = 4$, bien que la masse volumique moyenne soit pratiquement indépendante de M^* (i.e., la masse du mélange est presque indépendante de M^* parce que $\Delta W_2 = 0,1$). Par contre, la pression thermodynamique et les écarts maximums de densité ($\bar{\rho}_{max}^* - \bar{\rho}_{min}^*$) dépendent fortement de M^* .

4.3.4.4 Influence du nombre de Lewis.

L’influence du nombre de Lewis n’a été étudiée que dans le cas où les forces thermique et solutale sont dans le même sens. Lorsque $Le > 1$, l’épaisseur de la couche limite thermique est supérieure à celle de la couche limite massique, comme cela a été démontré dans de nombreux travaux (Bennacer et Gobin (1996) [8], par exemple). Si on ne considère que

des mélanges de gaz parfaits avec l'air comme gaz porteur, le nombre de Lewis ne peut varier que dans un domaine restreint : nous considérons donc les trois valeurs $Le = 0.5$, $Le = 1$ et $Le = 2$. Dans tous les cas, on compare les solutions basées sur l'approximation de Boussinesq à celles basées sur l'approximation faiblement compressible. Comme les autres paramètres sont fixés pour les différentes valeurs du nombre de Lewis, il s'ensuit que $Ra_m = Ra_T \times Le$. Le nombre de Lewis caractérise donc l'importance relative des forces thermique et solutale (si l'approximation de Boussinesq est utilisée).

Les résultats reportés dans le tableau 4.12 montrent que le nombre de Nusselt diminue faiblement lorsque Le augmente alors que l'augmentation du nombre de Sherwood est nettement plus importante. La figure 4.14a montre que la diminution du nombre de Nusselt local le long de la paroi chaude se produit principalement sur la moitié supérieure de la paroi. Ce résultat est dû, en partie, à une faible augmentation de l'épaisseur de la couche limite thermique, comme le montrent les tracés des isothermes pour $Le = 0,5$ et $Le = 2$ (Fig. 4.15). Cependant, la principale cause de la décroissance du nombre de Nusselt avec Le provient de la diminution de sa composante advective (équation 4.15) parce que l'injection de l'espèce "2" diminue lorsque Le augmente si tous les autres paramètres sont fixés. Ce résultat se déduit de l'expression des vitesses pariétales (équations 4.12 et 4.13). En conséquence, les valeurs de \dot{m}^* reportées dans le tableau 4.12 montrent que \dot{m}^* diminue avec Le .

Sc	Non-Boussinesq								Boussinesq		
	Le	Nu	Sh	\dot{m}^*	\overline{P}^*	$\overline{\rho}^*$	ρ_{min}^*	ρ_{max}^*	Nu	Sh	\dot{m}^*
0.35	0.5	16.65	13.59	2.090	1.259	1.034	0.843	1.259	14.63	10.56	1.625
0.71	1.0	16.34	18.40	1.415	1.255	1.033	0.840	1.255	14.18	14.18	1.091
1.42	2.0	15.61	23.92	0.920	1.253	1.033	0.839	1.253	13.47	18.25	0.702

TAB. 4.12 – Grandeurs moyennes en régime stationnaire pour différents nombres de Lewis ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $M^* = 0.25$, $W_{2,h} = 0.074$, $W_{2,c} = 0.0$, $C_w = 13.01$, $\epsilon_T = \epsilon_m = 0.2$, $\gamma = 1.4$, $\theta_0 = W_{2,0}^* = -0.5$).

En ce qui concerne le transfert de matière, les nombreuses études publiées au cours des vingt dernières années, toutes basées sur l'approximation de mélanges binaires dilués (liquides ou gaz), ont montré que l'augmentation du nombre de Sherwood avec Le est due à une diminution de l'épaisseur de la couche limite solutale. Les résultats obtenus au cours de ce travail ne mettent pas en cause cette conclusion, comme le montre la figure 4.16 où sont tracées les fractions massiques de l'espèce "2" pour $Le = 0,5$ et $Le = 2$. Il s'ensuit que les nombres de Sherwood locaux et moyens augmentent avec Le (figure 4.14b et tableau 4.12). Il est à noter que la partie advective du nombre de Sherwood (équation 4.16) reste presque constante parce que le produit $Le \times u$ ne dépend pas de Le (équations 4.12 ou 4.13) et parce que les différences maximales de masse volumique (tableau 4.12) dépendent très faiblement de Le ($\rho_{max}^* - \rho_{min}^* \approx 0,4 \quad \forall Le$).

Les comparaisons avec les solutions basées sur l'approximation de Boussinesq ont été effectuées en tenant compte des vitesses normales aux parois afin montrer les effets spécifiquement liés aux variations de masse volumique (bien que l'approximation de mélange dilué implique de très faibles vitesses normales aux parois). Par conséquent, les différences entre

les nombres de Sherwood moyens reportés dans le tableau 4.12 (de l'ordre de 30%) ne sont dues qu'aux variations de masse volumique introduites dans la formulation faiblement compressible. Bien que la masse volumique moyenne, $\bar{\rho}^*$, dépende très peu de Le en régime stationnaire (tableau 4.12), les différences relatives entre les valeurs de \bar{m}^* calculées avec les deux formulations augmentent avec Le parce que l'influence des termes de transport de l'équation de conservation de l'espèce "2" croît devant celle des termes de diffusion massique. Lorsque $Le = 1$, $\overline{Nu} = \overline{Sh} = 14,18$ avec l'approximation de Boussinesq alors que $\overline{Nu} = 16,34$ et $\overline{Sh} = 18,4$ avec l'approximation faiblement compressible.

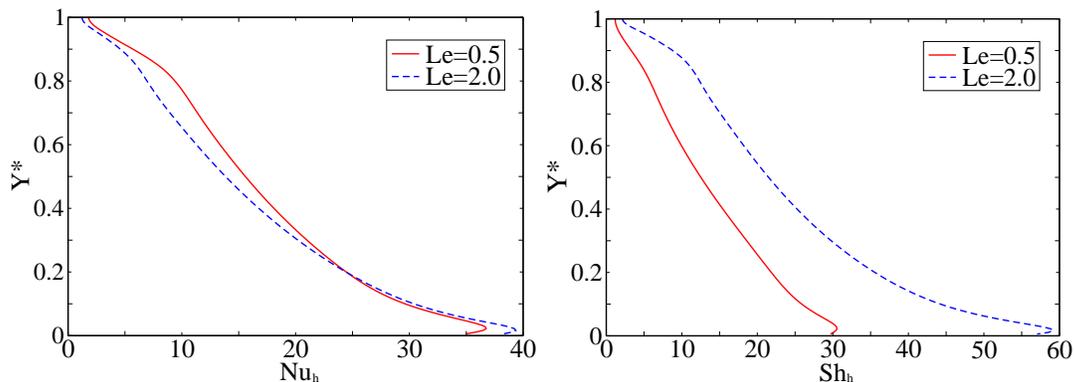


FIG. 4.14 – Variations des nombres de Nusselt et de Sherwood locaux le long de la paroi gauche pour $Le = 0.5$ and $Le = 2.0$ ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $M^* = 0.25$, $x_{2,h} = 0.074$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = \epsilon_m = 0.2$, $\gamma = 1.4$).

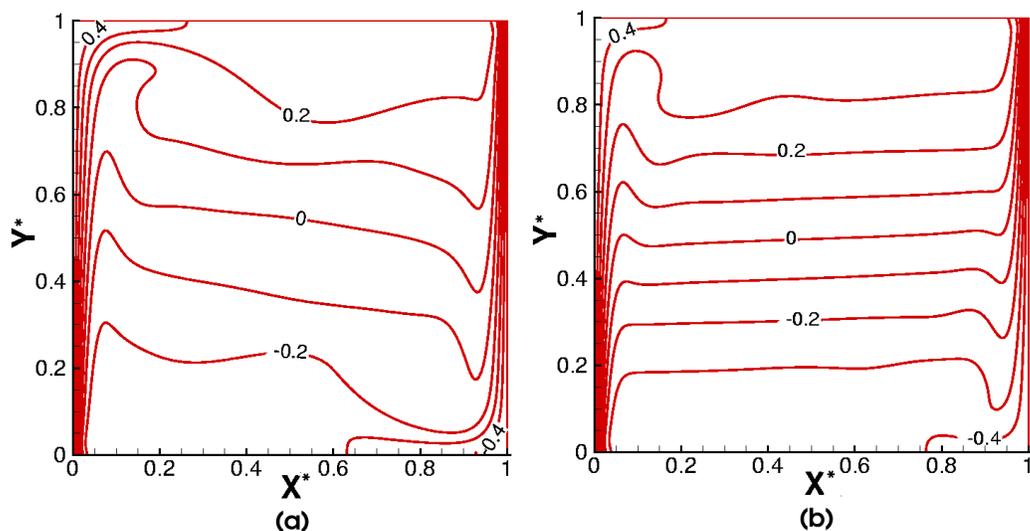


FIG. 4.15 – Isothermes pour $Le = 0.5$ et $Le = 2.0$ ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $M^* = 0.25$, $x_{2,h} = 0.074$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = \epsilon_m = 0.2$, $\gamma = 1.4$).

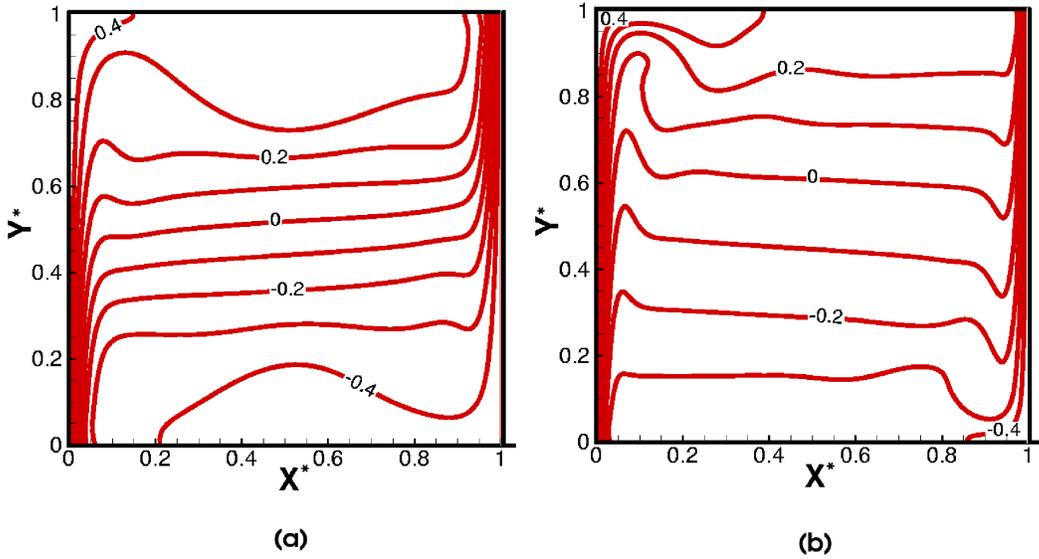


FIG. 4.16 – Iso-fractions massiques pour $Le = 0.5$ et $Le = 2.0$ ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $M^* = 0.25$, $x_{2,h} = 0.074$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = \epsilon_m = 0.2$, $\gamma = 1.4$).

4.3.5 Influence de l’allongement de la cavité.

L’influence de l’allongement d’une cavité verticale, différentiellement chauffée, a suscité de nombreuses études depuis plus de trente ans. L’analyse des résultats reste cependant confuse (en particulier dans Bejan (1995) [4]) et sujette à controverse parce que, à un nombre de Rayleigh donné, le régime d’écoulement est profondément modifié selon l’allongement. De plus, le choix de la dimension caractéristique pertinente (largeur L ou hauteur H de la cavité) n’est pas non plus évident. Par exemple, les écoulements laminaires deviennent rapidement instables lorsque l’allongement augmente (Roux et Grondin (1980) [69]), ce qui rend les simulations numériques difficiles. Dans une cavité remplie d’air à parois horizontales adiabatiques, la fin du régime laminaire stationnaire se situe à $Ra_L \approx 210^8$ si $A = 1$ mais seulement à $Ra_L \approx 210^5$ si $A = 10$. Si $A \geq 15$, une transition vers des solutions multicellulaires stationnaires est observée pour un nombre de Rayleigh critique $Ra_L = 7900 Pr$, puis des transitions inverses vers des écoulements unicellulaires stationnaires et enfin multicellulaires instationnaires sont obtenues en augmentant le nombre de Rayleigh. Lorsque $A < 1$, les écoulements sont plus stables et la partie centrale de la cavité devient quasiment immobile si $A \approx 0, 1$. On retiendra que, dans le domaine $0, 1 \leq A \leq 10$, la variation avec A du nombre de Nusselt moyen (tel que défini dans ce travail) présente toujours un maximum dont la position se déplace vers les faibles allongements lorsque le nombre de Rayleigh augmente comme le montre la figure 4.17. Par exemple, le nombre de Nusselt est maximal lorsque $A \approx 1$ si $Ra_L = 10^4$ et lorsque $A \approx 0, 3$ si $Ra_L = 10^6$. Le transfert de chaleur devient essentiellement diffusif ($\overline{Nu} \rightarrow 1$) lorsque que $A \rightarrow 0$ ou $A \rightarrow \infty$.

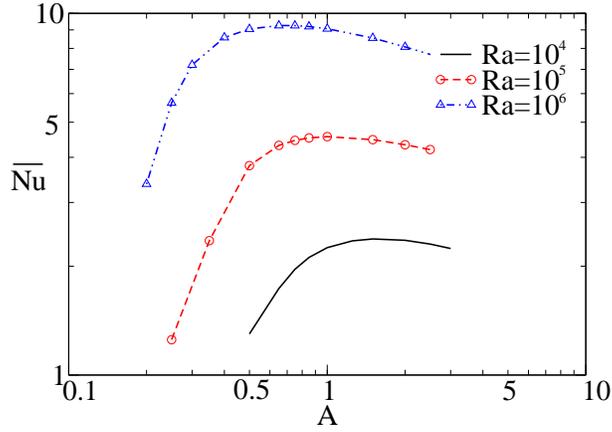


FIG. 4.17 – Variations du nombre de Nusselt moyen avec l’allongement pour différents nombres de Rayleigh (convection thermique, approximation de Boussinesq, $Pr = 0.71$, simulations effectuées avec notre code).

Des comportements similaires ont été simulés numériquement pour la convection purement solutale de mélanges binaires dilués alors que des structures d’écoulement beaucoup plus complexes ont été observées en convection thermosolutale selon la valeur du nombre de Lewis, en particulier lorsque les forces thermique et solutale sont opposées. Les calculs que nous avons effectués en se basant sur la formulation faiblement compressible montrent que les comportements généraux sont similaires, dans le cas de la convection thermique ou dans celui de la convection solutale, à condition que les paramètres ϵ_T et ϵ_m restent dans un domaine de variation modéré. Dans ce paragraphe, nous ne nous considérons que des écoulements thermosolutaux et pour $\epsilon_T = 0, 2$ et $\epsilon_m = \pm 0, 2$.

Les huit cas décrits dans le tableau 4.13 correspondent à des allongements compris entre $A = 0, 25$ et $A = 2$. Les situations où les forces agissent dans le même sens ou en sens opposés ont été considérées en maintenant le nombre de Froude à une valeur constante ($Fr = 10^{-7}$). Par conséquent, les effets de l’allongement ne sont dus qu’à une variation de la hauteur de la cavité (puisque Fr est basé sur la largeur). Les lignes de courant, isothermes et iso-fractions massiques sont représentées sur les figures 4.18 à 4.21 pour $A = 0, 5$ et $A = 2$, le cas $A = 1$ étant illustré par les figures 4.9 et 4.12. La solution étant instationnaire pour $A = 2$ et $M^* = 2$, les valeurs reportées dans le tableau 4.13 sont des moyennes temporelles calculées sur une durée très grande devant la période des fluctuations.

Lorsque les forces agissent dans le même sens ($M^* = 0, 5$), la masse volumique moyenne et la différence maximale de masse volumique ($\rho_{max}^* - \rho_{min}^*$) dépendent faiblement de A . Les distributions de masse volumique réduite représentées sur les figures 4.9, 4.18 et 4.19 montrent que leurs structures sont similaires avec un maximum de masse volumique en bas de la paroi droite. En conséquence, les différences entre les distributions de température et les distributions de fraction massique sont les plus grandes dans le bas des cavités étudiées, quel que soit l’allongement. Si l’approximation de Boussinesq est utilisée, ces distributions sont confondues parce que $Le = 1$ ($Ra_T = Ra_m = 1, 42 \cdot 10^6$). L’augmentation de l’allongement produit une augmentation du flux de matière à travers les parois verticales (tableau 4.13) et les vitesses verticales sont plus élevées. La structure de l’écoulement devient donc

A	M^*	ϵ_m	\overline{Nu}	\overline{Sh}	\dot{m}^*	\overline{P}^*	$\overline{\rho}^*$	$\overline{\rho}_{min}^*$	$\overline{\rho}_{max}^*$
0.25	0.5	0.2	17.44	18.90	1.181	1.364	1.114	0.913	1.364
0.5	0.5	0.2	18.59	21.28	2.660	1.360	1.112	0.910	1.360
1	0.5	0.2	17.14	20.02	5.005	1.358	1.111	0.909	1.358
2	0.5	0.2	14.97	17.62	8.809	1.357	1.111	0.908	1.357
0.25	2.0	-0.2	2.06	2.28	0.254	1.289	1.280	1.271	1.289
0.5	2.0	-0.2	6.36	7.37	1.638	1.296	1.284	1.270	1.296
1	2.0	-0.2	6.07	6.90	3.065	1.271	1.260	1.246	1.271
2	2.0	-0.2	5.70	6.45	5.580	1.235	1.225	1.213	1.235

TAB. 4.13 – Grandeurs moyennes pour différents allongements ($Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1$, $\epsilon_T = 0.2$, $\gamma = 1.4$, $\theta_0 = W_{2,0}^* = -0.5$, $W_{2,h} = 0.222$, $W_{2,c} = 0.0$ pour $M^* = 0.5$, et $W_{2,h} = 0.364$, $W_{2,c} = 0.0$ pour $M^* = 2$).

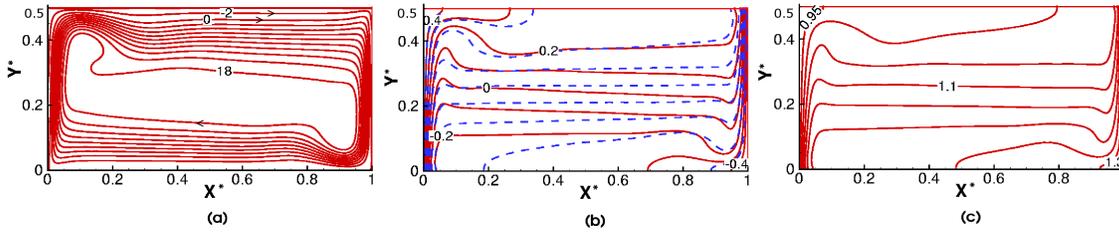


FIG. 4.18 – $A = 0,5$: Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime permanent lorsque les forces solutale et thermique agissent dans le même sens ($Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1.0$, $M^* = 0.5$, $x_{2,h} = 0.222$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = 0.2$, $\epsilon_m = 0.2$, $\gamma = 1.4$).

plus complexe : des cellules contra-rotatives et des zones de détachement le long des parois horizontales apparaissent. Cependant, ces structures sont assez similaires à celles obtenues avec l'approximation de Boussinesq : pour la valeur du nombre de Froude considérée, le tableau 4.13 montre que les nombres de Nusselt et Sherwood moyens sont maximum pour un allongement proche de $A = 0,5$.

On considère maintenant le cas de forces opposées ($M^* = 2$). Les résultats préliminaires présentés dans ce paragraphe montrent que des études de stabilité devraient être entreprises afin de mieux comprendre des phénomènes beaucoup plus complexes que ceux décrits dans le cas précédent. A partir des faibles écarts maximum de masse volumique ($\rho_{max}^* - \rho_{min}^*$) reportées dans le tableau 4.13 pour $\epsilon_m = -0,2$ et sur les figures 4.12 ($A = 1$), 4.20 ($A = 0,5$) et 4.21 ($A = 2$), on pourrait supposer que l'approximation de Boussinesq est applicable. Ces faibles variations de masse volumique sont cependant suffisantes pour conduire à de profonds changements de la structure de l'écoulement en fonction de l'allongement parce que, au nombre de Froude considéré, l'écoulement de base est instable vis à vis de faibles perturbations d'origine hydrodynamique. L'écoulement de base étant beaucoup plus stable lorsque la cavité est allongée horizontalement ($A = 0,5$), la structure de l'écoulement perturbé est moins complexe que pour $A = 2$. Les distributions de masse volumique le long de la paroi droite (fluide le plus froid mais de plus faible masse molaire) sont caractérisées par de forts gradients horizontaux, en comparaison avec les gra-

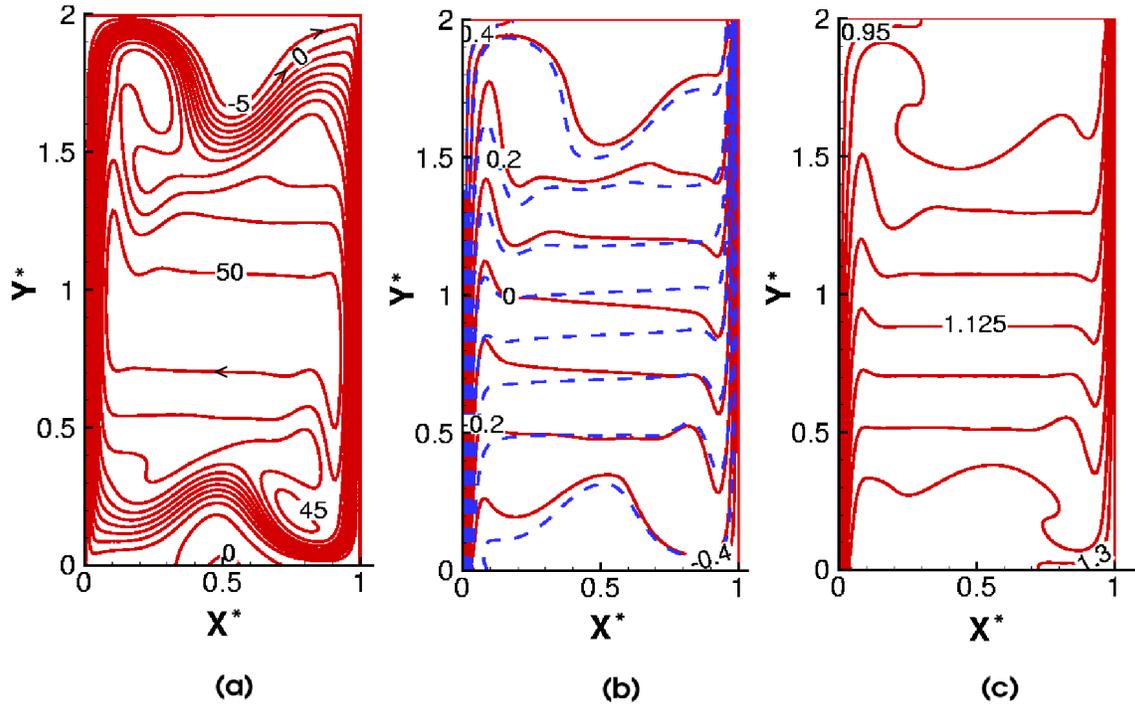


FIG. 4.19 – $A = 2$: Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime permanent lorsque les forces solutale et thermique agissent dans le même sens ($Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1.0$, $M^* = 0.5$, $x_{2,h} = 0.222$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = 0.2$, $\epsilon_m = 0.2$, $\gamma = 1.4$).

dients observés dans le reste de la cavité. Ces gradients produisent de faibles différences entre les intensités des forces thermique et solutale parce que les champs de température et de fraction massique ne sont pas identiques, même pour $Le = 1$. En effet, les termes de diffusion des équations de conservation de l'énergie et des espèces n'ont pas la même expression. La couche limite solutale le long de la paroi froide est perturbée par une faible injection de l'espèce "2", au milieu de la paroi, ce qui induit un écoulement contrarotatif, observé pour tous les allongements. Cette injection a été notée dans le cas de la convection purement solutale dans des solutions électrolytiques (Jeng et al. (2009) [31]) mais n'a jamais été mentionnée dans le cas de la convection thermosolutale dans un mélange de gaz. L'allongement influe fortement sur la distribution verticale de ces gradients de densité, ce qui explique les différentes structures des écoulements reportées sur les figures 4.12, 4.20a et 4.21a.

Pour l'ensemble des paramètres considérés, la topologie de l'écoulement dépend principalement de la valeur du rapport des masses molaires, M^* , si ϵ_m est maintenu à $\epsilon_m = -0,2$. Pour $M^* = 4$, des solutions stationnaires sont toujours obtenues pour $0,5 \leq A \leq 2$. Par contre, des écoulements faiblement chaotiques sont obtenus pour $M^* = 2$ et $A = 2$ comme l'illustrent les variations temporelles du nombre de Sherwood moyen reportées sur la figure 4.22. (les isovaleurs reportées sur la figure 4.21 correspondent à un instant donné et les valeurs de \overline{Nu} et \overline{Sh} reportées dans le tableau 4.13 sont des valeurs moyennées sur une durée très grande devant la plus grande des périodes des fluctuations). Pour un allon-

gement donné, il existe donc une valeur critique de M^* à partir de laquelle l'écoulement devient instationnaire. Cette étude, qui nécessiterait de nombreux calculs, pourrait être une perspective de recherches futures.

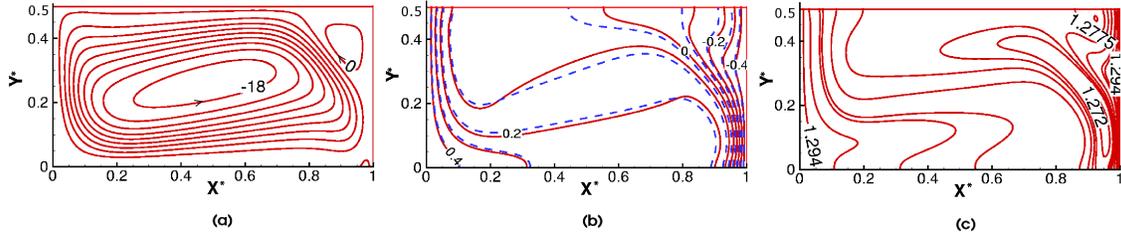


FIG. 4.20 – $A = 0,5$: Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime permanent lorsque les forces solutale et thermique agissent en sens opposés ($Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1.0$, $M^* = 2$, $x_{2,h} = 0.364$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = 0.2$, $\epsilon_m = -0.2$, $\gamma = 1.4$).

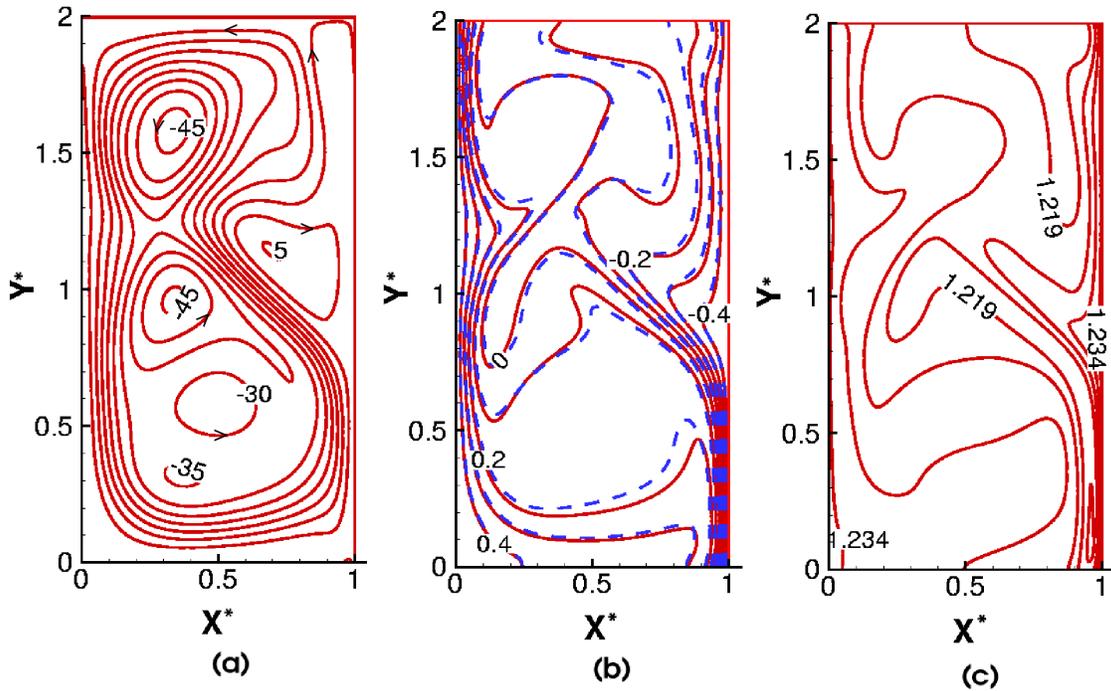


FIG. 4.21 – $A = 2$: Tracés instantannés d'un écoulement chaotique. Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime permanent lorsque les forces solutale et thermique agissent en sens opposés ($Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1.0$, $M^* = 2$, $x_{2,h} = 0.364$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = 0.2$, $\epsilon_m = -0.2$, $\gamma = 1.4$).

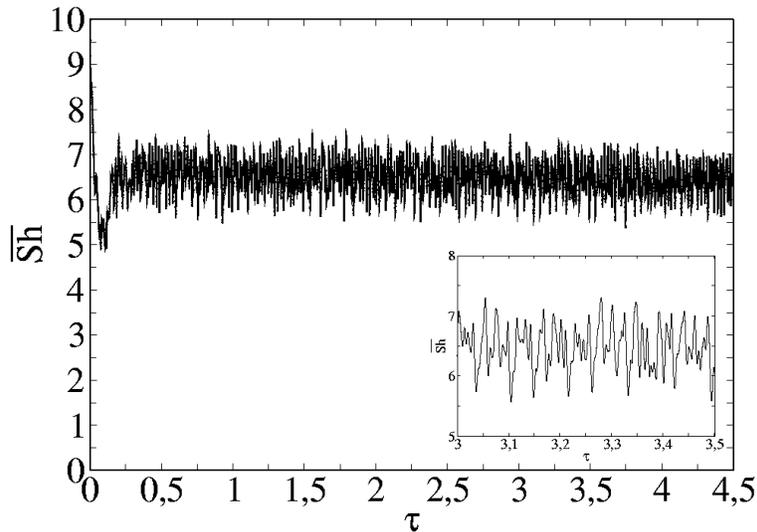


FIG. 4.22 – $A = 2$: Variation temporelle du nombre de Sherwood moyen sur la paroi chaude ($Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1.0$, $M^* = 2$, $x_{2,h} = 0.364$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = 0.2$, $\epsilon_m = -0.2$, $\gamma = 1.4$).

4.4 Conclusion

L'influence des variations de masse volumique sur la convection thermosolutale générée dans une cavité verticale remplie par un mélange binaire de gaz parfaits a été étudiée. L'analyse est limitée au modèle usuel consistant à supposer que le gaz porteur (espèce "1") ne diffuse pas dans les parois. Un apport de matière de l'espèce "2" se produit sur la paroi chaude (évaporation d'un film d'eau, par exemple) alors que la paroi froide "aspire" l'espèce "2" (paroi poreuse sèche par exemple). Dans ces conditions, la masse volumique et la pression thermodynamique du mélange de gaz subissent des variations qui ne peuvent pas être correctement prédites en utilisant l'approximation de Boussinesq, sauf si le mélange est très dilué. L'emploi d'une formulation faiblement compressible conduit aux conclusions suivantes :

- l'analogie transfert de chaleur - transfert de matière n'est pas satisfaite dans le cas de mélanges binaires non dilués,
- l'influence des variations de masse volumique sont plus importants dans le cas de la diffusion d'un gaz plus léger que le gaz porteur,
- lorsque les forces solutale et thermique sont de même intensité ($\epsilon_T = |\epsilon_m|$), les effets hors-Boussinesq sont beaucoup plus importants si les forces sont opposées que si elles sont dans le même sens.

Annexe 1 : approximation de Boussinesq

L'équation 4.5 montre que la pression thermodynamique adimensionnelle tend vers l'unité en régime stationnaire pourvu que $\epsilon_T \rightarrow 0$ et $\epsilon_m \rightarrow 0$. Lorsque $\epsilon_T \ll 1$ et $\epsilon_m \ll 1$, l'approximation au premier ordre de la masse volumique du mélange s'écrit

$$\rho^* = 1 - \epsilon_T \theta - \epsilon_m W_2^* \quad (4.22)$$

Par conséquent, l'approximation de Boussinesq est obtenue si $\epsilon_T \ll 1$ et $\epsilon_m \ll 1$. Cette approximation conduit donc à une pression thermodynamique fixe et à une masse volumique constante (sauf dans le terme d'Archimède). Si l'on ne considère, en régime laminaire, que des états stationnaires stables (ou sous-critiques) les champs de vitesse, de température et de fraction massique ne dépendent pas des conditions initiales. Ils ne dépendent que du choix des conditions de référence choisies pour calculer les valeurs des propriétés physiques.

Pour un mélange de gaz parfaits ($\beta_T = 1/T_r$, $\beta_m = (1 - M^*)/(W_{2,r}(1 - M^*) + M^*)$), on montre immédiatement que le choix d'une vitesse de diffusion thermique comme échelle des vitesses ($u_d = a/L$) et l'équation 4.22 conduisent à

$$\frac{1}{Fr}(\rho^* - 1) = -(Ra_T \theta + Ra_m W_2^*) Pr \text{ et } \frac{d\overline{P^*}}{d\tau} = 0 \quad (4.23)$$

où $Ra_T = \rho_r g \beta_T L^3 \Delta T / a \mu_r$ et $Ra_m = \rho_r g \beta_m L^3 \Delta W_2 / a \mu_r$ sont les nombres de Rayleigh thermique et solutal.

Le nombre de paramètres adimensionnels est donc ramené à 6 (A , C_w , Le , Pr , Ra_T et Ra_m ou $N = Ra_m / Ra_T$) au lieu de 10 pour la formulation hors Boussinesq thermosolutale basée sur l'hypothèse de propriétés thermophysiques constantes (A , C_w , Fr , Le , Pr , γ , ϵ_T , ϵ_m , θ_0 , $W_{2,0}^*$).

Chapitre 5

Convection thermosolutale instationnaire associée à des changements de phase surfaciques.

Nomenclature

a	diffusivité thermique [$m^2 s^{-1}$]
A	allongement, $A = H/L$
C_p	chaleur spécifique [$J K^{-1} kg^{-1}$]
D_{av}	coefficient de diffusion massique [$m^2 s^{-1}$]
Fr	nombre de Froude, $Fr = a_0^2/gL^3$
g	accélération gravitationnelle [$m s^{-2}$]
h	enthalpie [$J kg^{-1}$]
h_{lv}	enthalpie de changement d'état liquide-vapeur [$J kg^{-1}$]
H	hauteur de la cavité [m]
H_g	chaleur latente adimensionnelle, $H_g = h_{lv}/C_{p0}\Delta T$
HR	humidité relative [%]
\bar{I}	tenseur unité
\mathbf{J}	vecteur densité de flux massique [$kg m^{-2} s^{-1}$]
k	conductivité thermique [$W m^{-1} K^{-1}$]
L	largeur de la cavité [m]
Le	nombre de Lewis, $Le = a_0/D_{av,0}$
m	masse du mélange [kg]
\dot{m}	flux massique [$kg s^{-1}$]
M	masse molaire [$kg/kmol$]
M^*	rapport des masses molaires, $M^* = M_v/M_a$
\mathbf{n}	vecteur unitaire à dS
Nu	nombre de Nusselt local (Eq. 5.38)
N_x, N_y	nombres de points du maillage dans les directions x - et y -
p'_m	partie fluctuante de la pression motrice [Pa]
\bar{P}	pression thermodynamique [Pa]
$P_{v,sat}$	pression de vapeur à saturation [Pa]
Pr	nombre de Prandtl de l'air humide dans les conditions initiales $Pr = \mu_0/\rho_0 a_0$
R	constante universelle des gaz parfaits, $R = 8.315 kJ kmol^{-1}$
Ra_m	nombre de Rayleigh solutal, $Ra_m = \rho_0 g \beta_m \Delta W L^3 / a_0 \mu_0$

Ra_T	nombre de Rayleigh thermique, $Ra_T = \rho_0 g \beta_T \Delta T L^3 / a_0 \mu_0$
Sc	nombre de Schmidt, $Sc = \mu_0 / \rho_0 D_{av,0}$
Sh	nombre de Sherwood local (Eq. 5.42)
t	temps [s]
T	température [K]
$\mathbf{V} = (u, v)$	vecteur vitesse [$m \ s^{-1}$]
W	fraction massique
(x, y)	coordonnées cartésiennes [m]

Symboles grecques

β_m	coefficient d'expansion massique
β_T	coefficient d'expansion thermique, $\beta_T = 1/T_0$ [K^{-1}]
Δm_v	variation de la masse de vapeur dans la cavité [kg]
ΔT	différence de température, $\Delta T = (T_{w,max} - T_{w,min})$ [K]
ΔW	différence de fraction massique
ϵ_m	paramètre hors-Boussineq massique, $\epsilon_m = 1/M^* - 1$
ϵ_T	paramètre hors-Boussineq thermique, $\epsilon_T = \Delta T/T_0$
γ	rapport des chaleurs spécifiques, $\gamma = C_p/C_v$
μ	viscosité dynamique de l'air humide [$N \ m^{-1} \ s^{-1}$]
ν	viscosité cinématique de l'air humide [$m^2 \ s^{-1}$]
Ω	volumé de la cavité [m^3/m]
Ψ	fonction de courant
ρ	masse volumique [$kg \ m^{-3}$]
τ	temps adimensionnel, $\tau = a_0 t / L^2$
$\overline{\overline{\tau}}$	tenseur des contraintes visqueuse
θ	rapport d'écart de température (température adimensionnelle) $\theta = (T - T_0) / \Delta T$

Indices

a	air sec
adv	advection
$diff$	diffusion
l	eau liquide
m	mélange
v	vapeur d'eau
w	paroi
0	quantité définie à l'instant initial
∞	état stationnaire

Exposants

—	grandeur moyenne
*	grandeur adimensionnelle

5.1 Introduction

Les transferts de chaleur et de matière par convection naturelle à masse volumique variable dans des systèmes fermés associés à des changements de phase surfaciques n'ont, à notre connaissance, jamais été simulés numériquement. Il s'agit cependant d'un phénomène physique très courant que nous réalisons plusieurs fois par jour en mettant dans un réfrigérateur une bouteille d'eau non remplie ou la en retirant.

Les transferts de chaleur et d'humidité par convection naturelle en régime stationnaire dans une cavité rectangulaire d'allongement $A = 7$ ont été étudiés expérimentalement et numériquement par Wee et al. (1989) [84] pour des conditions de température et de concentration uniformes et constantes appliquées sur les parois. Dans cette étude, les changements de phase liquide-vapeur sur les parois n'ont pas été pris en compte. Les nombres de Grashof thermique et massique, correspondant à des conditions climatiques typiques de la Nouvelle Zélande, sont compris dans les domaines $2 \cdot 10^5 \leq Gr_T \leq 2 \cdot 10^6$ et $10^4 \leq Gr_m \leq 2 \cdot 10^5$, ce qui signifie que les forces d'origine thermique sont largement dominantes. En conséquence, le nombre de Nusselt a été trouvé pratiquement insensible au transfert de matière alors que le nombre de Sherwood est considérablement augmenté en passant de conditions isothermes à des conditions anisothermes. La convection naturelle instationnaire dans une cavité carrée a été étudiée numériquement par Lin et al. (1990) [49] avec l'objectif d'analyser les contributions des forces solutales et thermique sur l'évolution de l'écoulement et des flux de chaleur et de matière. La convection thermosolutale stationnaire dans une cavité remplie d'air avec des traces de polluants, produites par une source localisée sur les parois chaude ou froide, a été étudiée numériquement par Béghein et al. (1992) [3] qui ont considéré les deux situations dans lesquelles les forces solutale et thermique sont coopérantes ou opposées. Le cas d'une cavité multi-partitionnée remplie d'air humide a été abordé numériquement par Costa (1997) [14] et celui d'une cavité remplie par de l'air humide non-saturé a été traité par McBain (1997) [53], qui a aussi présenté une analyse d'ordre de grandeur conduisant à des relations permettant de calculer les transferts de chaleur et de matière.

Ben Jabrallah et al. (2002) [5] ont présenté une étude expérimentale et numérique de l'évaporation et de la condensation dans une cavité verticale d'allongement $A = 10$ en vue d'étudier l'efficacité d'une cellule de distillation solaire. Un film d'eau ruisselle sur l'une des parois verticales chauffée par un flux uniforme et la vapeur d'eau se condense sur la paroi froide opposée, maintenue à température uniforme et constante. Les gradients de température et de concentration provoquent un écoulement d'air humide qui intensifie les changements de phase sur les plaques chaude (évaporation) et froide (condensation). Les simulations réalisées pour plusieurs valeurs de la densité de flux de chaleur appliquée sur la surface d'évaporation (entre 400 et 1400 W/m^2) ont mis en évidence des structures convectives complexes. Compte tenu de la valeur élevée de l'allongement et des nombres de Grashof thermique et massique modifiés (c'est à dire basés sur le flux de chaleur imposé sur la paroi chaude et sur le débit maximal d'évaporation, $1,9 \cdot 10^6 \leq Gr_T \leq 1,3 \cdot 10^7$ et $1,2 \cdot 10^5 \leq Gr_m \leq 8,7 \cdot 10^5$), des zones de forts gradients de température et de concentration ainsi que plusieurs zones de recirculations ont été simulées. Cette étude, comme les suivantes (Ben Jabrallah et al. (2005) [6] et (2006) [7], Fahem et al. (2006) [19]) suppose l'existence d'un régime laminaire stationnaire et sont basées sur l'approximation de Boussinesq en dépit des très fortes différences de fractions massiques de vapeur d'eau entre les parois chaude et froide.

En ce qui concerne la convection thermique instationnaire dans une cavité verticale dont les températures des parois en regard varient périodiquement, plusieurs articles ont été publiés au cours des deux dernières décennies (une analyse bibliographique des principales études a été présentée par Wang et al. (2008) [80]). Kalabin et al. (2005) [34], (2005) [35], en particulier, ont considéré des cavités inclinées et des variations sinusoïdales de température de l'une des parois, la paroi opposée restant à température uniforme et constante. La cas d'une cavité remplie par un milieu poreux a été traité par Wang et al. (2008) [80]. Dans ces situations, la différence de température entre les parois reste nulle en moyenne. Le résultat intéressant est que le flux thermique moyen est non-nul et qu'il atteint une valeur maximale, fonction de l'angle d'inclinaison, de la période et du nombre de Grashof. Ce phénomène dit "de résonance" avait aussi été analysé par Chung et al. (2001)[13] dans le cas d'une paroi d'épaisseur finie. Un pic de transfert de chaleur a été trouvé lorsque la période des variations de température pariétale correspond à la période des ondes de gravité internes.

Laaroussi (2008) [39] et Laaroussi et Lauriat (2008) [37], (2009) [38] ont abordé le problème de la convection thermosolutale instationnaire d'air humide combinée à la condensation surfacique de vapeur d'eau sur les parois d'une cavité fermée. La masse du gaz et la pression diminuant au cours de la condensation, une modélisation basée sur l'approximation à faible nombre de Mach a été retenue. Cependant, l'utilisation d'un code de calcul commercialisé (Fluent) n'a pas permis de calculer les épaisseurs des films d'eau sur les surfaces refroidies en dessous de la température de rosée et, donc, d'étudier l'évaporation qui pourrait résulter d'une augmentation de la température de la paroi froide. Dans ces études, le modèle physique consiste en une cavité initialement remplie par de l'air chaud et humide, les parois étant sèches. La diminution de la température de l'une des parois verticales d'épaisseur finie, mise brutalement en contact avec une ambiance froide, est à l'origine de la condensation. La masse totale (air humide + eau liquide) a été calculée à tout instant afin de s'assurer de la conservation de la masse. La conservation de l'enthalpie a été vérifiée à partir des calculs instantanés des flux de chaleur sensible et latent. Ces études ont permis de mieux comprendre et de quantifier numériquement les transferts de chaleur et de matière se produisant au cours du régime instationnaire. Laguerre et al. [40], qui ont employé le même code de calcul commercialisé, ont considéré la condensation sur les parois d'une cavité contenant une batterie de cylindres horizontaux et refroidis. Ils ont aussi tenu compte des échanges par rayonnement entre surfaces. Cette étude, à caractère contractuel, ne donne pas d'information précise sur les phénomènes de condensation.

Dans ce chapitre, nous présentons une modélisation de la convection thermosolutale instationnaire d'air humide associée à la condensation de vapeur d'eau sur des parois froides ou à l'évaporation d'un film d'eau résultant du chauffage des parois. Un processus périodique de condensation – évaporation est aussi analysé en détail. Dans toutes les configurations étudiées, la cavité est initialement remplie d'air immobile caractérisé par une température T_0 , une masse molaire M_0 , une masse volumique ρ_0 et une pression P_0 uniformes. L'état final correspond soit à un autre état thermodynamique stable $(T_\infty, M_\infty, \rho_\infty, P_\infty)$ soit à un régime périodique établi. La méthode numérique présentée dans les chapitres II et III est employée pour résoudre le système d'équations de conservation avec des conditions aux limites dépendant du temps. Après avoir discuté quelques cas de validation, nous analysons les solutions obtenues.

5.2 Modèle de condensation et d'évaporation surfacique pour un mélange binaire avec un gaz non condensable

Les mécanismes physico-chimiques gouvernant la condensation ou l'évaporation de l'une des espèces d'un mélange sont généralement complexes. Lorsque le changement d'état se produit sur une paroi solide, les processus sont, en principe, plus simples à modéliser que lorsqu'il se produit au sein du fluide, qui devient alors diphasique. L'approche "macroscopique" utilisée dans ce travail ne permet pas de comprendre finement des phénomènes qui impliquent des interactions à l'échelle moléculaire. Dans le cas de la condensation, par exemple, la diminution rapide de la concentration de l'espèce condensable dans les couches de gaz proches des parois crée une "résistance" au transfert de matière qu'il est difficile de prendre en compte via l'ajout de termes appropriés dans les équations de conservation (par exemple) ou via une dépendance des coefficients de diffusion avec les concentrations des espèces non condensables.

Dans le cas d'un fluide binaire, le gaz porteur non condensable en mélange avec la vapeur ne peut pas diffuser dans la pellicule de condensat formée sur la surface froide à température T_p . Il s'accumule alors dans le voisinage du film liquide et forme une couche de gaz non condensable où sa pression partielle décroît depuis la paroi alors que la pression de la vapeur augmente, puisque leur somme reste constante : $P_a + P_v = P$. Cet effet est représenté sur la figure 5.1a où sont schématisées les variations de la température du mélange, les pressions partielles et les fractions massiques des deux constituants en régime de diffusion pure (pas de convection). La vapeur ne peut condenser que si sa pression partielle à la température du mélange est supérieure à la pression de vapeur saturante correspondant à la température de l'interface liquide-gaz. Il n'y a pas de sous-refroidissement si la température de l'interface est égale à la température de rosée, ce qui revient à négliger la résistance interfaciale. Nous nous plaçons dans le cadre de cette hypothèse.

Les variations des vitesses normales à l'interface sont schématisées sur la figure 5.1b. Les vitesses interfaciales s'écrivent :

$$\vec{V}_{in} = \frac{-D_{a,v}}{1 - W_v} \nabla W_v \quad (5.1)$$

La vitesse est nulle si la température de l'interface est supérieure à la température de rosée, ce qui peut se produire sur une paroi sèche plus froide que celle de l'air humide mais avec $T_p > T_{p,rosée}$. Dans le cas de l'évaporation, cette vitesse ne s'annule que lorsque la paroi est asséchée.

Si le film liquide est très mince, la tension superficielle l'empêche de ruisseler le long de la paroi et les vitesses tangentielles sont nulles. Si l'on tient compte des vitesses normales, le mélange de gaz ne peut pas rester immobile. Dans le cas de l'air humide, les différences entre les masses molaires des deux constituants sont suffisantes pour toujours créer de la convection, même si les écarts de température sont faibles.

Sur les figures 5.1, quatre zones différentes sont représentées :

- zone 1 : surface de transfert (solide)
- zone 2 : pellicule de condensat (film liquide)
- zone 3 : couche limite diffusive (film de gaz)

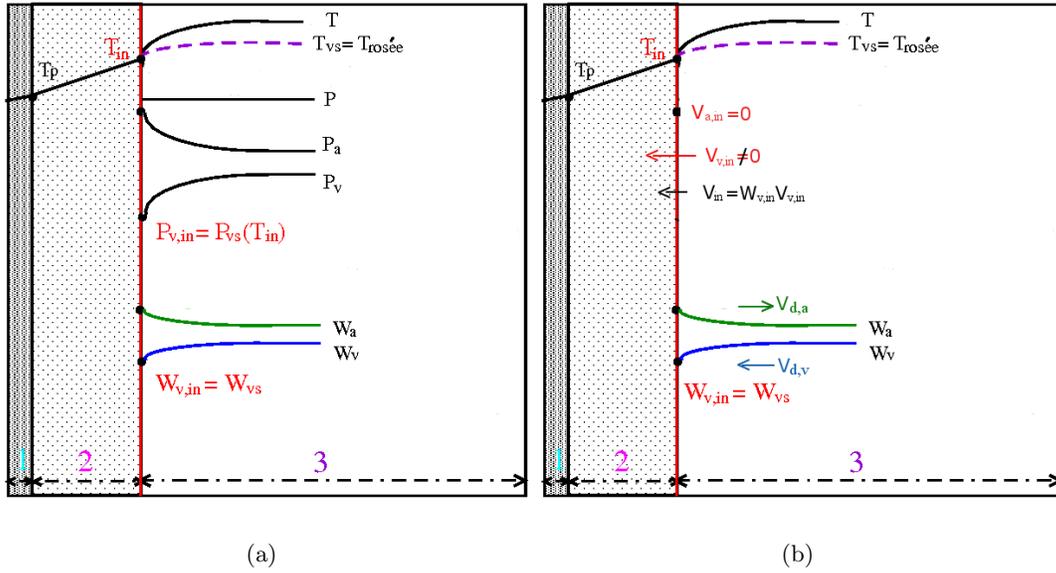


FIG. 5.1 – Représentation simplifiée de la physique de la condensation

5.2.1 Bilan thermique à l'interface liquide-gaz

La densité de flux thermique (W/m^2) traversant le film liquide immobile est la somme du flux diffusif dans le mélange de gaz et du flux dû au changement de phase :

$$q_{in,l} = q_{in,g} + \dot{m} h_{lv} \quad (5.2)$$

ce qui peut aussi s'écrire :

$$-k_l \frac{T_{in} - T_p}{\delta_l} = -k_g \frac{\partial T}{\partial \vec{n}}|_{in} + \rho \vec{V} h_{lv} \quad (5.3)$$

où δ_l est l'épaisseur du film de condensat. Donc :

$$T_{in} = T_p - \frac{\delta_l}{k_l} [-k_g \frac{\partial T}{\partial \vec{n}}|_{in} + \rho \vec{V} h_{lv}] \quad (5.4)$$

Simplification du modèle : Dans le modèle utilisé, le film d'eau (liquide pur) n'est pas simulé ($\delta_l \rightarrow 0$). Les conditions aux limites thermique et massique se réduisent donc à :

$$W_{in}(t) = W_{v,s}(t) , \quad T_p(t) = T_{in}(t) = T_{v,s}(t) \quad (5.5)$$

5.3 Equations de conservation

L'air humide circulant dans une enceinte fermée est assimilé à un mélange de deux gaz parfaits. Toutes les propriétés physiques du mélange dépendent de la température et de la fraction massique des constituants. Les effets Soret et Dufour sont négligés ainsi que la

dissipation d'énergie due au travail des forces visqueuses. L'approximation de faible compressibilité est introduite afin de calculer les distributions transitoires de masse volumique. La loi des gaz parfaits permet de calculer l'évolution de la pression thermodynamique du mélange et le travail des forces de pression. Dans le modèle, il faut intégrer l'équation de conservation qui régit le transport de vapeur d'eau et des relations permettant de prédire les phénomènes de condensation ou d'évaporation surfaciques en fonction de la température des parois et de la distribution d'humidité régnant aux voisinages des parois.

A l'instant initial, on suppose que la cavité est remplie par de l'air humide à température, pression et concentration uniformes. La température uniforme et égale des quatre parois varie à partir de l'instant $t > 0$. Des mouvements thermosolutaux apparaissent immédiatement. Lorsque les parois sont refroidies, la condensation surfacique ne peut se produire que si leur température tombe en dessous de la température de rosée correspondant à des conditions de saturation à proximité d'une surface froide (température et fraction massique de l'air humide). La diminution de température et de la masse d'air humide contenu dans la cavité engendre une diminution de la pression thermodynamique. Si les parois sont initialement recouvertes par un film d'eau liquide (l'air humide est alors supposé être saturé), une augmentation de leur température produit des mouvements convectifs et une augmentation de la pression. L'évaporation débute lorsque l'air chauffé au voisinage des parois n'est plus dans des conditions de saturation. Cette situation se rencontre immédiatement après le début de l'augmentation de la température des parois lorsque le film d'eau est suffisamment mince pour que sa résistance thermique puisse être négligée.

La modélisation ne tient pas compte de possibles condensations volumiques de vapeur d'eau (formation de brouillard) susceptibles d'être créées par de brusques variations locales de température et de pression. Cette contrainte limite à la fois l'amplitude et la vitesse des variations de température. Elle est contrôlée en calculant à tout instant le champ d'humidité relative régnant dans la cavité afin de poursuivre les simulations, tant que des conditions de sursaturation excessives locales n'apparaissent pas ($HR_{local,max}$ inférieure à 200%). Cette question sera abordée plus précisément dans la discussion des résultats.

5.3.1 Formulation générale

Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V}) = -\nabla p'_m + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + (\rho - \rho_0) \mathbf{g} \quad (5.7)$$

où $\bar{\bar{\tau}}$ est le tenseur des contraintes visqueuses pour un fluide newtonien :

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu [\nabla \mathbf{V} + (\nabla \mathbf{V})^t - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{V}) \bar{\bar{I}}] \quad (5.8)$$

p'_m est la fluctuation de pression motrice décomposée sous la forme

$$p_m = \bar{P}(t) + p'_m \quad (5.9)$$

où $\bar{P}(t)$ est la moyenne volumique de la pression thermodynamique et $p'_m \ll \bar{P}$. On suppose que

$$\int_{\Omega} p'_m d\Omega = 0 \quad (5.10)$$

Ω représentant le volume de la cavité. L'équation de conservation de l'enthalpie est écrite en fonction de la température sous la forme suivante :

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \frac{d\bar{P}}{dt} \quad (5.11)$$

L'équation de conservation de la vapeur d'eau est écrite en fonction de la fraction massique sous la forme :

$$\rho \frac{DW_v}{Dt} = \nabla \cdot (\rho D_{av} \nabla W_v) \quad (5.12)$$

où W_v est la fraction massique et D_{av} le coefficient de diffusion massique de la vapeur d'eau dans l'air sec. La loi des gaz parfaits permet de calculer la distribution de masse volumique d'un mélange de deux constituants de masse molaire M_a et M_v :

$$\rho = \frac{\bar{P}}{RT} \left(\frac{M_a M_v}{W_v M_a + W_a M_v} \right) \quad (5.13)$$

où $\rho = \rho_v + \rho_a$. L'air ne condensant pas dans les conditions thermodynamiques considérées, sa masse volumique reste constante.

5.3.1.1 Pression thermodynamique et variation de la masse totale.

La conservation de la masse totale (gaz + liquide) et la variation de la masse de gaz dans Ω sont à la base du calcul de l'évolution temporelle de la pression thermodynamique, \bar{P} . La masse initiale du mélange contenue dans la cavité est $\rho_0 \Omega$. A l'instant t , la masse totale s'écrit :

$$m(t) = \int_{\Omega} \rho_m(x_i, t) d\Omega = \rho_0 \Omega + \Delta m_v(t) \quad (5.14)$$

où $\Delta m_v(t)$ est la masse de vapeur apportée (ou soustraite) au volume fixe Ω entre les instants $t = 0$ and t :

$$\Delta m_v(t) = \int_0^t \int_S \mathbf{J}_w \cdot \mathbf{n} dS dt \quad (5.15)$$

$\mathbf{J}_w = \rho \mathbf{V}_w$ est le flux massique de vapeur d'eau quittant dS (évaporation) ou apporté à dS (condensation). \mathbf{n} est la normale à dS dirigée vers l'intérieur de la cavité. Le gaz porteur étant incondensable, la vitesse due à la diffusion du mélange vers ou à partir d'une paroi s'exprime par la relation

$$\mathbf{V}_w = - \frac{D_{av}}{1 - W_{v,w}} \frac{\partial W_v}{\partial \mathbf{n}} \Big|_w \quad (5.16)$$

où $W_{v,w}$ représente la fraction massique de vapeur d'eau à l'interface liquide - gaz. Il est évident que $\Delta m_v(t)$ tend vers zéro lorsqu'un état thermodynamique stable est atteint parce que \mathbf{V}_w est alors nulle. La fraction massique de vapeur d'eau le long des parois humide est calculée à partir des conditions de saturation prises à la température T_w des parois (résistance thermique nulle). On obtient alors la relation

$$W_{v,w} = \frac{M_v P_{v,sat}(T_w)}{M_v P_{v,sat}(T_w) + M_a (P - P_{v,sat}(T_w))} \quad (5.17)$$

où $P_{v,sat}$ est la pression de vapeur saturante à l'interface liquide - gaz. L'approximation faiblement compressible permet de calculer la pression thermodynamique moyenne à tout instant et d'en déduire la masse de gaz contenue dans la cavité par l'expression

$$m(t) = m_{air} + m_v(t) = \int_{\Omega} \rho(x_i, t) d\Omega = \int_{\Omega} \frac{M P}{RT} d\Omega = \bar{P}(t) \int_{\Omega} \frac{M}{RT} d\Omega \quad (5.18)$$

En utilisant ensuite les équations 5.15, 5.16 and 5.18, on en déduit la variation temporelle suivante de la pression thermodynamique :

$$\bar{P}(t) = \frac{1}{\int_{\Omega} \frac{M}{RT} d\Omega} \left\{ \rho_0 \Omega - \int_0^t \int_S \frac{\rho D_{av}}{1 - W_{v,w}} \frac{\partial W_v}{\partial \mathbf{n}} \Big|_w \cdot \mathbf{n} dS dt \right\} \quad (5.19)$$

5.3.1.2 Conditions aux limites

Sur une surface élémentaire dS sèche à une température supérieure à la température de rosée, $\mathbf{J}_w = 0$. Si la condensation se produit, c'est à dire si $P_v(T_w) > P_{v,sat}(T_w)$, \mathbf{V}_w est calculée par la relation 5.16. Si la surface humide est portée à une température T_w telle que $P_{v,sat}(T_w) > P_v(T_w)$, l'eau liquide s'évapore et \mathbf{V}_w est toujours donnée par l'équation 5.16. Le mélange étant supposé être un mélange de gaz parfaits, la pression de vapeur saturante se déduit de la loi de Dalton :

$$P_v(T_w) = \bar{P} \left(\frac{W_{v,w} M_a}{(1 - W_{v,w}) M_v + W_{v,w} M_a} \right) \quad (5.20)$$

Conditions aux limites dynamique : Le film liquide étant supposé immobile, la condition de vitesse tangentielle nulle est appliquée sur toutes les surfaces ($\mathbf{V}_w \cdot \mathbf{t} = 0$, où \mathbf{t} est le vecteur unitaire tangentiel à une paroi). La composante normale de la vitesse est donnée par l'équation 5.16 si la surface est humide, sinon $\mathbf{V}_w \cdot \mathbf{n} = 0$.

Conditions aux limites thermiques : l'hypothèse de film liquide mince conduit à $T|_w = T_w(t)$, $\forall t$.

Conditions aux limites massiques : Sur les surfaces restant sèches, le flux massique est nul. Soit

$$\frac{\partial W_v}{\partial \mathbf{n}} \Big|_w = 0 \quad (5.21)$$

L'équation 5.17 s'applique sur les surfaces humides.

5.3.2 Forme adimensionnelle des équations de conservation : cavité rectangulaire

La cavité rectangulaire étudiée est représentée sur la figure 5.2. Les quatre parois sont à la même température $T_w(t)$. La convection n'est donc créée que par des variations de température à partir de la température initiale, $T_w(0)$. Les équations de conservation, l'équation d'état et les conditions aux limites sont écrites sous une forme adimensionnelle en introduisant les variables réduites suivantes :

$$\begin{aligned} x^* &= \frac{x}{L} & y^* &= \frac{y}{L} & \tau &= \frac{t a_0}{L^2} & \rho^* &= \frac{\rho}{\rho_0} & p_m^* &= \frac{p'_m}{\rho_0 (a_0/L)^2} & \bar{P}^* &= \frac{\bar{P}}{\bar{P}_0} \\ u^* &= \frac{u}{a_0/L} & v^* &= \frac{v}{a_0/L} & \theta &= \frac{T - T_0}{\Delta T} & m^* &= \frac{m}{\rho_0 \Omega} \\ \mu^* &= \frac{\mu}{\mu_0} & C_p^* &= \frac{C_p}{C_{p0}} & k^* &= \frac{k}{k_0} & D_{av}^* &= \frac{D_{av}}{D_{av0}} & M^* &= \frac{M_v}{M_a} \end{aligned}$$

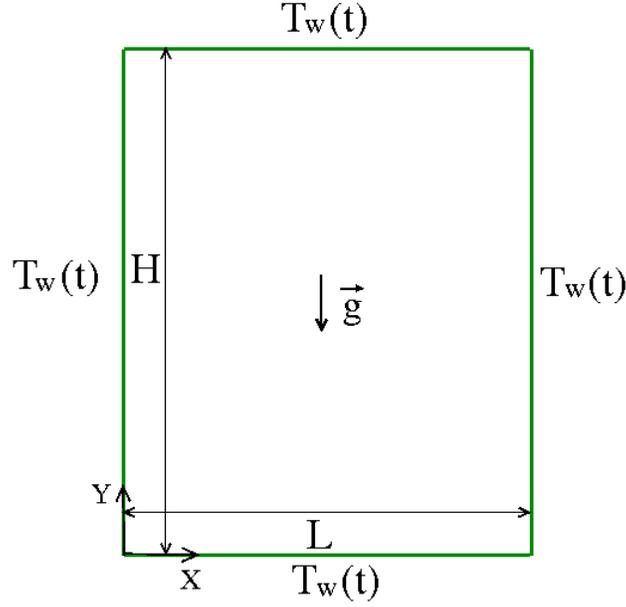


FIG. 5.2 – Schéma de la cavité rectangulaire, système de coordonnées et conditions aux limites thermiques.

Il est à noter que, contrairement au chapitre précédent, la fraction massique n'a pas été écrite sous une forme normalisée. L'indice "0" caractérise l'état thermodynamique initial et ΔT est la différence maximale de température, c'est à dire que $T_w(t)$ varie entre $T_w(0)$ et $T_w(0) \pm \Delta T$. Les propriétés thermophysiques de l'air sec, de la vapeur et de l'air humide sont calculées par les expressions données en annexe.

On obtient les équations adimensionnelles suivantes :

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \mathbf{V}^*) = 0 \quad (5.22)$$

$$\frac{\partial (\rho^* \mathbf{V}^*)}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \mathbf{V}^* \otimes \mathbf{V}^*) = -\nabla p_m^* + Pr \nabla \cdot \bar{\tau}^* + \frac{1}{Fr} (\rho^* - 1) \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \quad (5.23)$$

où

$$\bar{\tau}^* = \mu^* [\nabla \mathbf{V}^* + (\nabla \mathbf{V}^*)^t - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{V}^*) \bar{I}] \quad (5.24)$$

$$\rho^* C_p^* \left[\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \mathbf{V}^* \cdot \nabla \theta \right] = \nabla \cdot (k^* \nabla \theta) + \frac{(\gamma - 1) d\bar{P}^*}{\gamma \epsilon_T d\tau} \quad (5.25)$$

$$\frac{\partial (\rho^* W_v)}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\rho^* \mathbf{V}^* W_v) = \frac{1}{Le} \nabla \cdot (\rho^* D_{av}^* \nabla W_v) \quad (5.26)$$

Les nombres adimensionnels $Fr = a_0^2/gL^3$, $Pr = \mu_0/\rho_0 a_0$, $Le = a_0/D_{av,0}$, sont les nombres de Froude, de Prandtl et de Lewis. $\gamma = C_p/C_v$ est le rapport des chaleurs spécifiques,

$\epsilon_T = \Delta T/T_0$ caractérise l'écart à l'approximation de Boussinesq (généralement admise si $\epsilon_T < 0.1$). La pression thermodynamique adimensionnelle s'écrit

$$\bar{P}^*(\tau) = \frac{1}{\int_0^A \int_0^1 \left(\frac{1}{\epsilon_T \theta + 1}\right) \left(\frac{\epsilon_m W_{v,0} + 1}{\epsilon_m W_v + 1}\right) dx^* dy^*} \{A + \Delta m_v^*(\tau)\} \quad (5.27)$$

Dans cette expression, $A = H/L$ est le rapport de forme (ou allongement) de la cavité et ϵ_m caractérise l'écart à l'approximation d'un mélange binaire dilué. Ce paramètre s'écrit :

$$\epsilon_m = \frac{1}{M^*} - 1 \quad (5.28)$$

Le terme $\Delta m_v^*(\tau)$ représente la variation de la masse de vapeur d'eau contenue dans la cavité entre l'instant initial et l'instant τ . Ce terme est donc nul s'il n'y a pas évaporation ou condensation sur les parois. Son expression est :

$$\Delta m_v^*(\tau) = \int_0^\tau \int_S \rho^* \mathbf{V}_w^* \cdot \mathbf{n} \, dS \, d\tau \quad (5.29)$$

En tout point à l'intérieur de la cavité, la masse volumique est calculée à partir de la loi des gaz parfaits qui conduit à la relation :

$$\rho^* = \frac{\bar{P}^*(\tau)(1 + \epsilon_m W_{v,0})}{(1 + \epsilon_T \theta)(1 + \epsilon_m W_v)} \quad (5.30)$$

5.3.2.1 Conditions initiales et aux limites

Les valeurs initiales des grandeurs adimensionnelles sont :

$$\mathbf{V}^* = 0, \quad \theta = 0, \quad W_v = W_{v,0}, \quad \rho^* = 1, \quad \bar{P}^* = 1 \quad \text{at } \tau = 0 \quad \forall (x^*, y^*) \in [0, 1] \times [0, A] \quad (5.31)$$

À l'interface entre le film d'eau à température réduite $\theta_w(\tau)$ et l'air humide, la fraction massique de vapeur d'eau s'obtient à partir de la relation :

$$W_{v,w}(\theta_w) = \frac{M^* P_{v,sat}^*(\theta_w)}{P_{v,sat}^*(\theta_w)(M^* - 1) + \bar{P}^*} \quad (5.32)$$

Pour $\tau > 0$, les conditions aux limites sur une surface S , dont les vecteurs unitaires normal (dirigé vers l'intérieur de la cavité) et tangentiel sont \mathbf{n} et \mathbf{t} , les conditions aux limites s'écrivent :

$$\mathbf{V}_w^* \cdot \mathbf{t} = 0, \quad \mathbf{V}_w^* \cdot \mathbf{n} = -\frac{\chi D_{av}^*}{Le(1 - W_{v,w})} \nabla W_{v,w} \cdot \mathbf{n} \quad (5.33)$$

$$\theta(\tau) = \theta_w(\tau) \quad (5.34)$$

$$(1 - \chi) \nabla W_{v,w} \cdot \mathbf{n} + \chi(W_v - W_{v,w}(\theta_w)) = 0 \quad (5.35)$$

où $\chi = 0$ si le point considéré est sec et $\chi = 1$ s'il est humide.

Les 11 paramètres adimensionnels apparaissant dans la mise en équations du problème sont les suivants :

- 8 paramètres interviennent dans les équations de conservation et dans l'équation d'état :

$$A = H/L \quad Fr = a_0^2/gL^3 \quad Pr = \nu_0/a_0 \quad Le = a_0/D_{av0}$$

$$M^* = M_v/M_a \quad \gamma = C_p/C_v \quad \epsilon_m = \frac{1}{M^*} - 1 \quad \epsilon_T = \Delta T/T_0$$

- Un paramètre intervient dans la condition initiale : $W_{v,0} = f(HR_0)$, où HR_0 est l'humidité relative à l'instant initial.

- Deux paramètres caractérisent l'évolution de la température $\theta_w(\tau)$ des parois : l'amplitude et la période.

Les quatre expressions permettant de calculer la fraction molaire de vapeur, la viscosité, la conductivité thermique et la chaleur spécifique de l'air humide à partir des propriétés de l'air sec et de la vapeur d'eau sont données en Annexe.

Lorsque les variations maximales de température et de fraction massiques sont suffisamment faibles, la formulation du problème dégénère en la formulation de Boussinesq, comme on l'a vu au chapitre précédent. Les paramètres pertinents sont alors les nombres de Rayleigh thermique et massique. Le terme de poussée d'Archimède $(\rho^* - 1)/Fr$ dans l'équation 5.23 devient :

$$\frac{1}{Fr}(\rho^* - 1) = -(Ra_T\theta + Ra_m W_v)Pr \quad (5.36)$$

où $Ra_T = \rho_0 g \beta_T \Delta T L^3 / a_0 \mu_0$ et $Ra_m = \rho_0 g \beta_m \Delta W L^3 / a_0 \mu_0$.

5.3.3 Flux de chaleur et de matière pariétaux

En régime transitoire, les flux de chaleur et de masse pariétaux se décomposent en une contribution purement diffusive et une contribution associée au changement d'état, laquelle est nulle si la surface est sèche. La nombre de Nusselt est défini comme le rapport entre le flux total et un flux de conduction de référence, $q_{c,ref}$ défini comme suit :

$$q_{c,ref} = k_0 \frac{\Delta T}{L} \quad (5.37)$$

La différence de température ΔT est la différence maximale de température entre l'instant initial et l'état stationnaire, ou bien l'amplitude des fluctuations de température lorsque la température des parois varie périodiquement. Il en résulte que le nombre de Nusselt en un point M d'une paroi est défini par :

$$Nu(M, \tau) = k^* \nabla \theta|_w \cdot \mathbf{n} - \chi H_g \rho^* (\mathbf{V}_w^* \cdot \mathbf{n}) = Nu_{diff} + Nu_{lv} \quad (5.38)$$

où $H_g = h_{lv}/C_{p0} \Delta T$. Dans le cas de la condensation de vapeur d'eau ou de l'évaporation d'eau liquide, H_g est toujours très supérieur à l'unité. Le nombre de Nusselt moyen sur la paroi "i" d'aire S_i a pour expression

$$\overline{Nu}_i(\tau) = \frac{1}{S_i} \int_{S_i} Nu(M, \tau) dS_i \quad (5.39)$$

Le nombre de Nusselt moyenné sur les quatre parois d'aire totale S s'écrit donc :

$$\overline{Nu}_t(\tau) = \frac{1}{S} \sum_{i=1,4} S_i \overline{Nu}_i(\tau) \quad (5.40)$$

Le flux massique de référence est défini d'une manière similaire au flux de conduction, soit :

$$q_{m,ref} = \rho_0 D_{av0} \frac{\Delta W_{v,max}}{L} \quad (5.41)$$

où $\Delta W_{v,max} = W_{v,w}(T_{w,max}) - W_{v,w}(T_{w,min})$ est la différence maximale possible de fraction massique, c'est à dire correspondant à des conditions de saturation aux températures $T_{w,max}$ et $T_{w,min}$.

Le nombre de Sherwood local s'exprime donc par

$$Sh(M, \tau) = \chi[\rho^* D_{av}^* \nabla W_v^*|_w \cdot \mathbf{n} - Le \rho^* (\mathbf{V}_w^* \cdot \mathbf{n}) W_{v,w}^*(\theta_w)] = Sh_{diff} + Sh_{adv} \quad (5.42)$$

où $W_v^* = W_v / \Delta W_{v,max}$. Les nombres de Sherwood moyens sont définis de la même façon que les nombres de Nusselt moyens.

5.4 Résolution numérique

Les changements apportés à l'algorithme décrit dans le chapitre 2 sont exposés dans les paragraphes suivants.

5.4.1 Algorithme de calcul des masses d'eau condensées ou évaporées.

Cet algorithme est présenté sur la figure 5.3.

Etape 1 : Calcul des propriétés physiques du mélange.

A partir de la solution de l'itération précédente, on peut calculer la pression de saturation, la pression partielle et la fraction massique en utilisant les formules ci-dessous :

$$P_{v,s} = \exp\left(18.79 - 0.0075T - \frac{5965.6}{T}\right) \times 10^5 \quad (Pa) \quad (5.43)$$

$$W_{v,s} = \frac{M_v P_{v,s}}{M_v P_{v,s} + M_a (P - P_{v,s})} \quad (5.44)$$

$$X_v = \frac{N_v}{N_v + N_a} = \frac{\frac{m_v}{M_v}}{\frac{m_v}{M_v} + \frac{m_a}{M_a}} = \frac{m_v}{m_v + M^* m_a} = \frac{1}{1 + M^* \frac{1-W_v}{W_v}} = \frac{W_v}{W_v + M^*(1 - W_v)} \quad (5.45)$$

$$P_v = \bar{P} X_v \quad (5.46)$$

Les quantités $P_{v,s}$ et $W_{v,s}$ sont calculées sur les points de paroi. Il n'est nécessaire de calculer P_v qu'aux points voisins des parois (mais la relation 5.46 est applicable dans tout le domaine). La différence $|P_{v,s} - P_v|$ détermine les conditions d'évaporation ($P_v < P_{v,s}$) ou de condensation ($P_v > P_{v,s}$).

Etape 2 : test sur l'évaporation et la condensation.

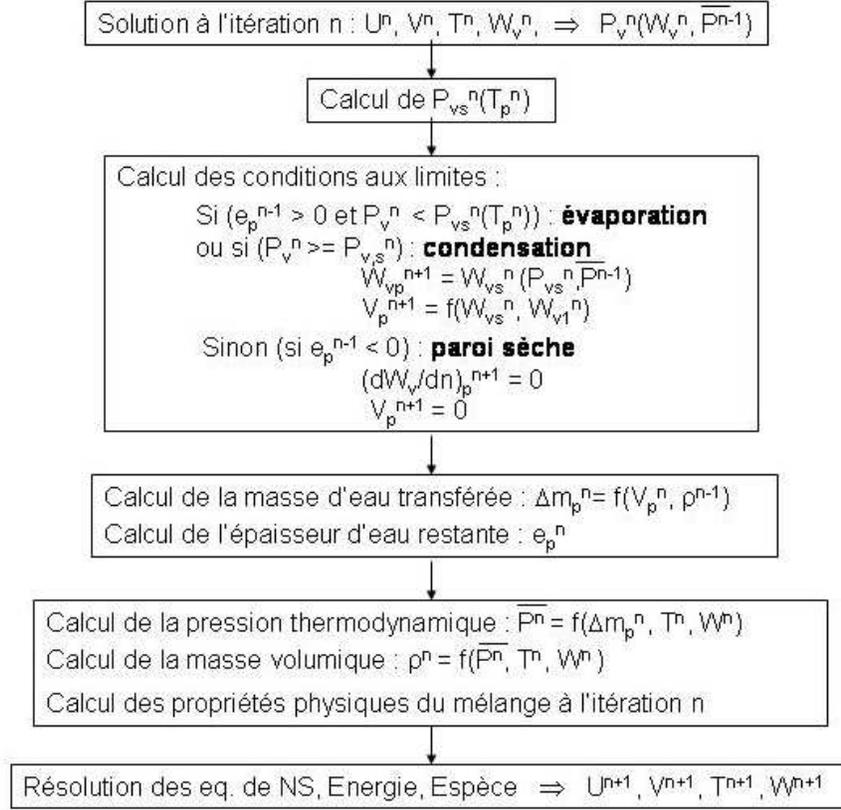


FIG. 5.3 – Algorithme de calcul de la masse condensée ou évaporée sur les parois.

Cette étape sert de test pour déterminer l'état de la paroi (humide ou sèche). S'il existe encore de l'eau ($m_0 \pm \Delta m_v(t) > 0$, où m_0 est la masse d'eau initiale et $\Delta m_v(t)$ la masse évaporée ou condensée sur une maille depuis l'instant initial) et si la pression partielle est inférieure à la pression de saturation ($P_v < P_{v,s}$), il y a évaporation. Au contraire, si ($P_v > P_{v,s}$), il y a toujours condensation sur les mailles de la paroi, qu'il y ait ou non un film d'eau. Dans le cas où $m_0 \pm \Delta m_v(t) = 0$, la maille est asséchée. La condition limite de gradient nul sur W_v est alors imposée sur la maille et la vitesse normale devient automatiquement nulle. Pour le problème traité, les températures des parois sont imposées, c'est-à-dire que $T(s_i, t) = T_p(t)$ où s_i désigne un point sur la paroi.

Étape 3 : exploitation des résultats à l'instant t .

- **Étape 3a** : Calcul de la masse de vapeur transférée entre les instants $t = 0$ et t .

La masse évaporée ou condensée sur une maille d'aire Δs_k située au point de coordonnées curvilignes s_k (figure 5.4) peut, à l'instant t , se calculer à partir de l'équation 5.47

$$\Delta m_v(s_k, t) = \int_0^t \int_{\Delta s_k} \rho u_{paroi} dt ds_k \approx \left(\int_0^t \rho u_{paroi} dt \right) \Delta s_k = \left(\int_0^{t-\Delta t} \rho u_{paroi} dt + \int_{t-\Delta t}^t \rho u_{paroi} dt \right) \Delta s_k \quad (5.47)$$

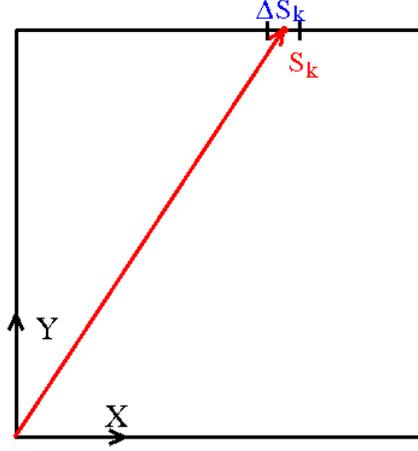


FIG. 5.4 – Position du point de coordonnée s_k sur les parois de la cavité.

ou encore

$$\Delta m_v(s_k, t) = \Delta m_v(s_k, t - \Delta t) + \Delta m_v(s_k, \Delta t) \quad (5.48)$$

Comme la vitesse pariétale et la masse volumique du mélange sont des fonctions du temps et de la coordonnée curviligne s_k , une méthode de trapèze est utilisée pour effectuer l'intégration numérique de la masse de vapeur transférée depuis ou sur une maille pendant l'intervalle de temps Δt (de l'itération $n - 1$ à l'itération n). Soit :

$$\Delta m_v(s_k, \Delta t) = \frac{1}{2}(\rho^n u^n + \rho^{n-1} u^{n-1})|_{\text{paroi}} \Delta t \Delta s_k \quad (5.49)$$

L'équation 5.47 peut s'écrire

$$\Delta m_v(s_k, t^n) = \Delta m_v(s_k, t^{n-1}) + \Delta m_v(s_k, \Delta t) \quad (5.50)$$

Finalement, toute la masse de vapeur condensée ou évaporée entre $t = 0$ et t^n s'obtient par sommation sur toutes les mailles de parois. On déduit donc la variation totale de la masse de liquide sur les parois. Soit :

$$\Delta m_{\text{eau}}(t^n) = \sum_k \Delta m_v(s_k, t^n) \quad (5.51)$$

où $k = 1 \dots 2(N_x + N_y)$ (N_x et N_y définissant le maillage).

• **Etape 3b** : Calculs de la pression et de la masse volumique.

La masse transférée étant obtenue par la relation 5.51, on peut alors calculer la pression et la masse volumique dans la cavité à l'instant t^n à partir du bilan massique

$$\int_{\Omega} \rho(x, y, t^n) d\Omega = \rho_0 \Omega \pm \Delta m_{\text{eau}}(t^n) \quad (5.52)$$

La masse volumique est calculée en tout point (x_i, y_j) avec la loi d'état :

$$\rho(x_i, y_j, t^n) = \frac{\bar{P}(t^n) M(x_i, y_j, t^n)}{R T(x_i, y_j, t^n)} \quad (5.53)$$

Comme la pression thermodynamique \bar{P} ne dépend que du temps, on obtient à partir du bilan massique (Eq. 5.52) l'équation suivante pour la pression thermodynamique :

$$\bar{P}(t^n) = \frac{\left(\frac{P_0 M_0}{T_0}\right) \Omega \pm R \Delta m_{eau}(t^n)}{\int_{\Omega} \frac{M(x,y,t^n)}{T(x,y,t^n)} d\Omega} \quad (5.54)$$

Dans le code de calcul, m_v , ρ , \bar{P} , M et T sont calculées sous forme adimensionnelle ($m_v^* = m_v/(\rho_0 \Omega)$, $\rho^* = \rho/\rho_0$, $\bar{P}^* = \bar{P}/P_0$, $M^* = M/M_0$, $\theta = (T - T_0)/\Delta T$)

• **Etape 3c** : Calcul de l'épaisseur du film d'eau.

En un point M quelconque des parois de la cavité, l'évolution de l'épaisseur du film liquide lors de la condensation ou de l'évaporation est calculée à partir de la relation :

$$e(M, t) = \frac{\int_0^t \rho \mathbf{V}_w(M) \cdot \mathbf{n}(M) dt}{\rho_l} \quad (5.55)$$

où ρ_l est la masse volumique de l'eau liquide.

La masse d'eau $\Delta m_{eau}(s_k, t^n)$ sur l'élément d'aire Δs_k situé sur les parois en s_k peut s'exprimer par :

$$\Delta m_{eau}(s_k, t^n) = \Delta m_{eau}(s_k, t = 0) \pm \Delta m_v(s_k, t^n) = \rho_l e_k(t^n) \Delta s_k \quad (5.56)$$

où $e_k(t^n)$ est l'épaisseur locale du film d'eau à l'instant t^n . Par conséquent

$$e_k(t^n) = \frac{\Delta m_{eau}(s_k, t = 0) \pm \Delta m_v(s_k, t^n)}{\rho_l \Delta s_k} \quad (5.57)$$

5.4.2 Tests de précision des solutions numériques

Une approche similaire à celle décrite dans le chapitre précédent a été suivie. Nous avons d'abord considéré l'évaporation isotherme d'un film d'eau : les parois d'une cavité carrée ($10 \text{ cm} \times 10 \text{ cm}$) sont initialement recouvertes par un film d'eau alors que l'air contenu dans la cavité est sec ($HR_0 = 0\%$), à la même température que les parois ($T_0 = 350 \text{ K}$) et à pression atmosphérique (situation difficilement réalisable en pratique). Les deux parois verticales sont recouvertes par des films liquides d'épaisseur uniforme ($e = 6,36 \mu\text{m}$), soit une masse d'eau $m_l = 1,28 \text{ g/m}$. L'état final correspond à de l'air humide (à la même température) avec $HR = 50\%$ et à des parois sèches (évaporation totale). Cet état se déduit immédiatement d'un calcul purement thermodynamique.

Le test numérique consiste à vérifier si la simulation numérique converge, et avec quelle précision, vers cet état ($P_{\infty} = 1,221 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ et $\rho_{\infty} = 1,137 \text{ kg/m}^3$). Il faut aussi s'assurer que la masse totale, vapeur d'eau et eau liquide, est constante à tout instant. Compte tenu de la valeur du nombre de Froude ($Fr = 8,78 \cdot 10^{-8}$), les premiers instants sont caractérisés par de forts mouvements convectifs et l'eau ne s'évapore donc pas uniformément. Après une certaine période, le transfert de matière devient purement diffusif.

Les calculs, effectués sur des grilles avec une résolution variant de 64×64 à 512×512 mailles, ont montré que la pression thermodynamique et la masse volumique de l'état stationnaire étaient toujours obtenues avec une précision relative meilleure que $0,03\%$. L'évolution de

la masse volumique moyenne (donc de la masse de vapeur d'eau) est représentée sur la figure 5.5 pour différents maillages. Elle montre que la convection est très intense pendant les cinq premières secondes et qu'elle se ramène à de la diffusion massique après 20 s, environ.

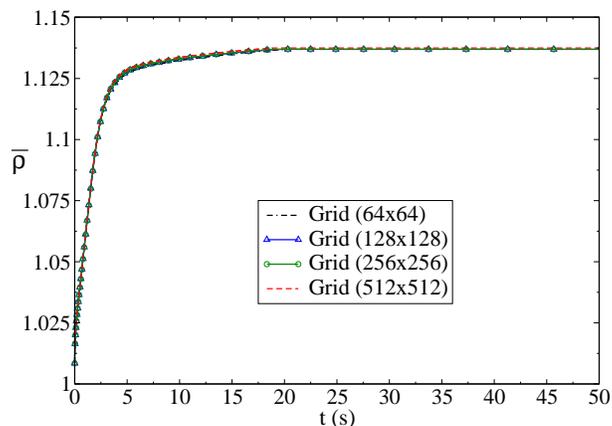


FIG. 5.5 – Evolution de la masse volumique moyenne de l'air humide en fonction du maillage.

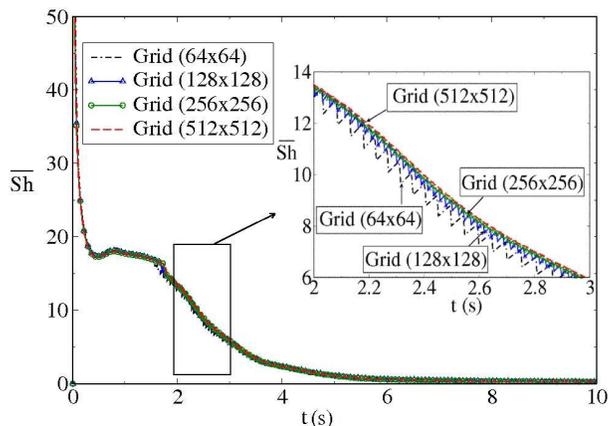


FIG. 5.6 – Evolution du nombre de Sherwood moyen selon le maillage.

La figure 5.6 montre la variation des nombres de Sherwood moyens sur les parois verticales au cours de l'évaporation. Il apparaît alors qu'un maillage trop grossier conduit à des variations non monotones (en "dents de scie") du flux massique. Ce comportement est dû au changement brutal de la forme des conditions aux limites (Eqs. 5.33 et 5.35). Lorsqu'une ou plusieurs surfaces de discrétisation consécutives deviennent subitement sèches (c'est à dire entre les instants t_n et t_{n+1}), le coefficient de transfert de matière s'annule sur ces surfaces mais augmente au cours des itérations suivantes sur les mailles adjacentes parce que de l'air plus froid et plus sec, provenant du centre de la cavité, commence par se réchauffer sur les parties chaudes (et sèches) de la paroi avant de commencer à évaporer

l'eau de la maille suivante. Il s'ensuit une augmentation brutale du coefficient de transfert de matière. Cette augmentation est d'autant plus brutale que la surface de la maille est grande.

L'agrandissement inclus dans la figure 5.6 montre qu'une grille uniforme 256×256 permet de réduire ces oscillations non-physiques à un niveau "admissible". Plus le maillage est fin, plus l'amplitude de ces oscillations diminue, comme le montrent les résultats obtenus avec un maillage 512×512 . Avec l'algorithme utilisé pour traiter le couplage vitesse-pression (IDEAL), les performances se dégradent lorsque le maillage est raffiné (en termes de temps de calcul) au delà de 256×256 mailles. Cette dégradation provient du fait que les systèmes linéaires deviennent de plus en plus mal conditionnés alors que le principe du formalisme utilisé requiert de satisfaire la conservation de la masse à tout instant avec une erreur proche du zéro machine. Cette chute de performance est particulièrement notable lorsque les calculs sont effectués sur des machines vectorielles (NEC SX8 de l'IDRIS).

5.5 Résultats

Une première série de calculs a été réalisée dans le cas d'une cavité carrée de 10 cm de côté, remplie initialement par de l'air sec ou par de l'air humide à pression atmosphérique et à température uniforme. Avant de considérer des variations périodiques des températures des parois, le cas plus simple d'une variation linéaire de température a été étudié afin de vérifier que le modèle permet de prédire l'évolution de l'air humide entre deux états thermodynamiques bien définis. Ces calculs ont d'abord montré que des variations brusques des températures pariétales conduisent, compte tenu des conditions initiales, à des taux d'humidité relative locaux très supérieurs à 100% (sursaturations). Ces taux ne sont admissibles que s'ils n'excèdent pas les conditions critiques de saturation correspondant à la température locale (environ 200% à pression atmosphérique et pour la gamme de température considérée). Dans le cas contraire, du brouillard se forme en l'absence de germes (condensation homogène) et la modélisation adoptée n'est pas appropriée. Il convient donc de contrôler la distribution transitoire d'humidité relative afin d'arrêter les calculs lorsque la sursaturation locale dépasse une valeur critique, ce qui se produit lorsque la décroissance de température locale est très rapide.

Tous les calculs ont été effectués dans le cas d'une différence maximale de température $\Delta T = 50 K$. S'agissant d'un mélange de vapeur d'eau et d'air sec, le rapport des masses molaire a été fixé à $M^* = 0,622$, le paramètre hors-Boussinesq solutal à $\epsilon_m = 0,608$ et le rapport des chaleurs spécifiques à $\gamma = 1,4$.

5.5.1 Variation linéaire de la température des parois.

L'augmentation ou la diminution linéaire de température des parois entre $T_w = 300 K$ et $T_w = 350 K$ est représentée sur les figures 5.7. Dans les deux cas, des variations brusques ($\delta t = 0$ s) ou de durées $\delta t = 20$ s, 60 s et 120 s ont été considérées.

5.5.1.1 Evaporation

Les conditions initiales correspondent à une cavité remplie d'air humide à pression atmosphérique dans des conditions de saturation à température uniforme $\bar{T}_0 = 300 K$

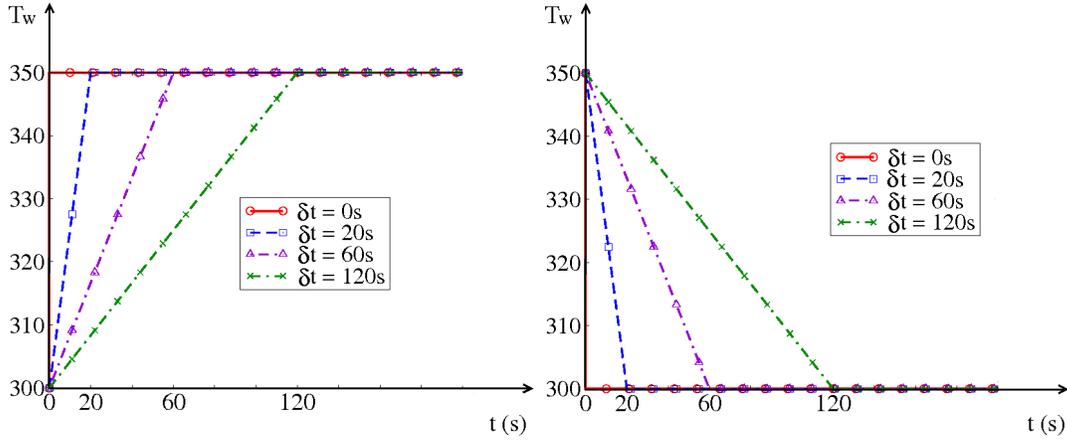


FIG. 5.7 – Représentations des évolutions de la température des parois dans le cas de l'évaporation (gauche) ou de l'évaporation (droite).

($W_{v,0} = 0,0219$ or $RH_0 = 100\%$). Les parois de la cavité sont uniformément recouvertes par une couche d'eau d'épaisseur $e = 2,57\mu m$ (c'est-à-dire une masse d'eau $m_0 = 1,03 g/m$). Une telle épaisseur du film exclut le ruissellement du film, ce qui signifie que la vitesse tangentielle de l'air humide le long de l'interface peut être supposée nulle et la résistance thermique du film d'eau négligeable. Les propriétés thermophysiques de l'air humide, déterminées à l'aide des relations données dans l'appendice, sont reportées dans la première colonne du tableau 5.1. On en déduit que $Fr = 5,03 \cdot 10^{-8}$, $Le = 0,887$, $Pr = 0,71$, $H_g = 47,7$.

Si l'approximation de Boussinesq était appliquée, les nombres de Rayleigh thermique et solutaux basés sur les propriétés physiques à l'instant initial et sur les différences maximales de température et de fraction massique seraient $Ra_T = 4,31 \cdot 10^6$ et $Ra_m = 1,31 \cdot 10^6$, ce qui montre que les forces d'origine thermique dominent celles d'origine solutale, notamment lorsque la température des parois est augmentée brusquement et aux premiers instants. Les propriétés de l'air humide dans l'état final (température et humidité uniformes égales à $T_w = 350 K$ et $RH = 50\%$) sont reportées dans la seconde colonne du tableau 5.1. Les parois de la cavité sont donc sèches et la fraction massique de vapeur d'eau atteint $W_v \approx 0,1$. Cette augmentation de température et de masse volumique de l'air humide produit une augmentation de la pression thermodynamique d'environ 33%. Ces calculs purement thermodynamiques sont retrouvés par la résolution numérique des équations de conservation à moins de 0,5% près, quelle que soit la vitesse de variation de la température $T_w(t)$ des parois. L'intérêt de la simulation numérique est donc de déterminer les champs en régime transitoire et la durée de l'évolution selon la pente de $T_w(t)$.

Les évolutions de la température moyenne et de la masse volumique de l'air humide sont représentées sur la figure 5.8 pour les lois de variation de $T_w(t)$ considérées. La comparaison des figures 5.8a et 5.8b montre que la durée du régime transitoire est pilotée par les transferts thermiques plutôt que par les transferts massiques puisque le temps mis pour atteindre la solution asymptotique ($\bar{T} = 350 K$) est supérieure d'environ 20 s à la durée de l'évaporation. Lorsque la température des parois est augmentée brusquement ($\delta t = 0 s$), des sursaturations locales apparaissent pendant quelques secondes dans des

couches d'air adjacentes aux parois. Ces couches, représentées sur la figure 5.9 à l'instant $t \approx 0,03$ s, temps auquel la sursaturation atteint sa valeur maximale (environ 200% au voisinage immédiat des parois), ont une épaisseur quasiment uniforme, ce qui indique que le processus d'évaporation est purement diffusif aux premiers instants. Lorsque $\delta t = 20$ s, les pics de sursaturation n'excèdent pas 20% et sont localisés dans les quatre coins de la cavité où les vitesses sont les plus faibles. Pour $\delta t = 120$ s, la sursaturation n'excède pas 5% et ne dure que quelques secondes.

Etat	évaporation		condensation	
	<i>initial</i>	<i>final</i>	<i>initial</i>	<i>final</i>
P (Pa)	101325	134848	101325	72591
T (K)	300	350	350	300
HR	100%	50%	50%	100%
W_v	0.0219	0.1016	0.1380	0.0308
x_v	0.0348	0.1539	0.2048	0.0486
ρ ($kg\ m^{-3}$)	1.1611	1.2640	0.9304	0.8274
μ ($kg\ m^{-1}\ s^{-1}$)	$1.8314\ 10^{-5}$	$1.9736\ 10^{-5}$	$1.9330\ 10^{-5}$	$1.8219\ 10^{-5}$
k ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$)	0.0264	0.0306	0.0307	0.0265
C_p ($kJ\ K^{-1}\ kg^{-1}$)	1025.6	1099.3	1131.1	1033.2
D_{av} ($m^2\ s^{-1}$)	$2.504\ 10^{-5}$	$2.590\ 10^{-5}$	$3.447\ 10^{-5}$	$3.496\ 10^{-5}$
h_{lv} ($J\ kg^{-1}$)	$2.444\ 10^6$	$2.331\ 10^6$	$2.331\ 10^6$	$2.444\ 10^6$

TAB. 5.1 – Propriétés thermophysiques de l'air humide correspondant aux quatre états thermodynamique initiaux ou finaux.

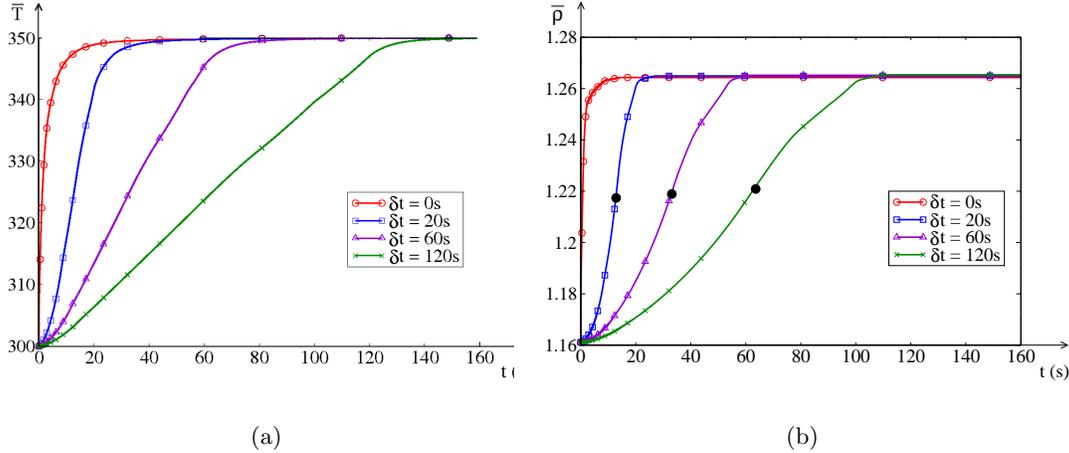


FIG. 5.8 – *Evaporation* : Evolutions de la température moyenne de l'air humide (a) et de la masse volumique (b) pour les quatre cas considérés (Fig. 5.7). Les symboles en cercle gras correspondent à la valeur de la masse volumique à l'instant où $\bar{T} = 325$ K.

Les lignes de courant et les distributions de température, de fraction massique et d'humidité relative sont représentées sur les figures 5.11a, 5.11b et 5.11c pour $\delta t = 20, 60$ et 120 s à des instants correspondant au moment où la température moyenne de l'air humide atteint

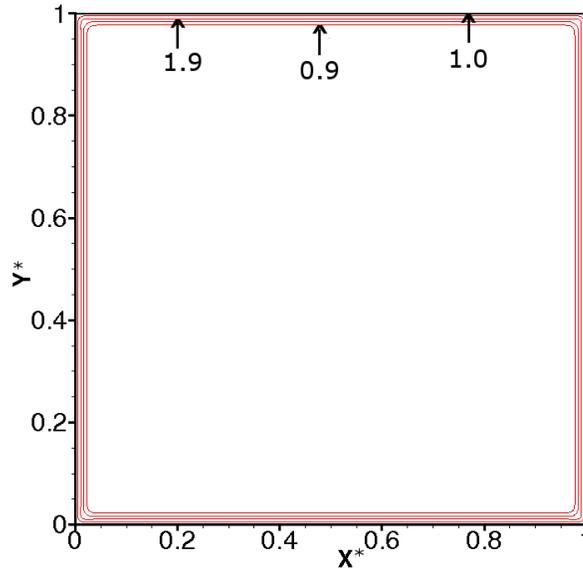


FIG. 5.9 – *Evaporation* : iso-contours d’humidité relative à l’instant correspondant au maximum d’humidité relative lorsque la température des parois chute brutalement (Fig. 5.7).

$\bar{T} = 325 \text{ K}$. Au début du chauffage, la convection thermosolutale se développe très rapidement. La structure multicellulaire de l’écoulement, présentant une symétrie verticale, est complexe : elle se caractérise principalement par deux grands rouleaux contrarotatifs le long des parois verticales et par deux plus petits rouleaux contrarotatifs au dessus de la paroi inférieure. Dans ces deux rouleaux de type Rayleigh–Bénard, le sens de rotation de l’air est piloté par le sens de rotation des rouleaux principaux.

Les lignes de courant tracées en pointillés correspondent à des circulations dans le sens trigonométrique et celles tracées en trait plein au sens horaire. Compte tenu des stratifications thermique et massique sous la paroi haute, l’entraînement de l’air humide est purement inertiel. En conséquence, l’évaporation est plus rapide le long de la paroi inférieure, comme le montrent les iso–fractions massiques (figures 5.11b et 5.11c, en particulier) : les parties sèches sont comprises entre des isovaleurs de fraction massique perpendiculaires aux parois, ce qui traduit un changement des conditions aux limites de l’équation de transfert de matière.

Lorsque toutes les parois sont humides (Fig. 5.11a par exemple), les distributions de température et de fraction massique sont relativement similaires parce que le nombre de Lewis est proche de l’unité. Les écarts sont principalement dus aux différences entre les conditions aux limites thermiques et massiques qui dépendent du taux d’évaporation. Par contre, les conditions aux limites de paroi sèche diffèrent totalement des conditions de température imposée et les ressemblances entre les distributions de température et de fraction massique s’estompent au cours de l’évolution vers l’état stationnaire. L’assèchement de la paroi supérieure s’effectue progressivement par diffusion et termine le processus d’évaporation. La température se stabilise ensuite et l’état permanent est atteint 20 s (environ) après la fin de l’évaporation. La figure 5.11c montre aussi qu’un accroissement

rapide de la température des parois produit des écoulements transitoires beaucoup plus intenses (d'origine thermique aux premiers instants) pour une même température moyenne de l'air humide.

Les évolutions des composantes advectives et diffusives des nombres de Nusselt et de Sherwood moyens sur les parois verticales sont représentées sur la figure 5.10 pour $\delta t = 20$ s et 120 s. L'apport de chaleur pour produire l'évaporation domine largement aux premiers instants. La raison est qu'il faut environ dix fois plus d'énergie pour évaporer la quantité d'eau mouillant les parois que pour augmenter la température de l'air contenu dans la cavité de 300 K à 350 K. Les figures 5.10 montrent que les composantes advective (ou latente) du nombre de Nusselt et diffusive du nombre de Sherwood suivent des évolutions similaires et présentent des maximums à des instants correspondant à la fin de l'évaporation sur certaines portions des parois. L'origine de ces évolutions similaires est que le rapport Sh_{diff}/Nu_w suit l'évolution des conditions de saturation sur les parois selon la relation $Le (1 - W_{v,w})/H_g$, dont la valeur est quasiment constante tant qu'il reste suffisamment d'eau liquide sur les parois.

La figure 5.10 montre aussi que le flux de chaleur diffusif et le flux de matière advectif sont beaucoup plus petits pendant la phase d'évaporation. On en conclut donc que le transfert de chaleur est gouverné par le changement de phase (advection) et que le transfert de matière l'est par la diffusion massique parce que le rapport $Sh_{diff}/Sh_{adv} = (1 - W_{v,w})/W_{v,w}$ est très supérieur à l'unité compte tenu de la température modérée des parois.

5.5.1.2 Condensation

On considère maintenant la situation inverse : la cavité est remplie d'air humide à la température $T_0 = 350$ K dont l'humidité relative est $HR_0 = 50\%$ (soit $W_{v,0} = 0,138$). Les propriétés thermophysiques de cet air humide sont reportées dans la troisième colonne du tableau 5.1. Les quatre parois de la cavité sont donc initialement sèches. On en déduit que $Fr = 8,67 \cdot 10^{-8}$, $Le = 0,846$, $Pr = 0,71$, $H_g = 41,2$. Si l'approximation de Boussinesq était appliquée, les nombres de Rayleigh thermique et solutaux basés sur les propriétés physiques à l'instant initial et sur les différences maximales de température et de fraction massique seraient $Ra_T = 2,5 \cdot 10^6$ and $Ra_m = 10^6$. Les propriétés de l'air humide dans l'état final (température et humidité uniformes égales à $T_w = 300$ K et $RH = 100\%$) sont reportées dans la dernière colonne du tableau 5.1. Les parois sont complètement humides parce que la fraction massique de vapeur d'eau dans les conditions de saturation est réduite à $W_{v,sat} \approx 0,031$. Par conséquent, à l'état final 0,254 g/m de vapeur d'eau sont uniformément distribués à l'intérieur de la cavité alors que 1,03 g/m d'eau liquide sont non-uniformément distribués sur les parois. Cette décroissance de température et de masse volumique du mélange provoque une diminution de la pression de 28%. Ces calculs purement thermodynamique sont retrouvés par la résolution numérique des équations de conservation à moins de 0,5% près, quelle que soit la vitesse de variation de la température $T_w(t)$ des parois.

Les évolutions de la température moyenne et de la masse volumique de l'air humide sont représentées sur la figure 5.12 pour les lois linéaires de variation de $T_w(t)$ considérées. La durée du régime transitoire est maintenant pilotée par le temps nécessaire pour obtenir des conditions de saturation uniformes ($RH = 100\%$ en tout point à l'intérieur de la ca-

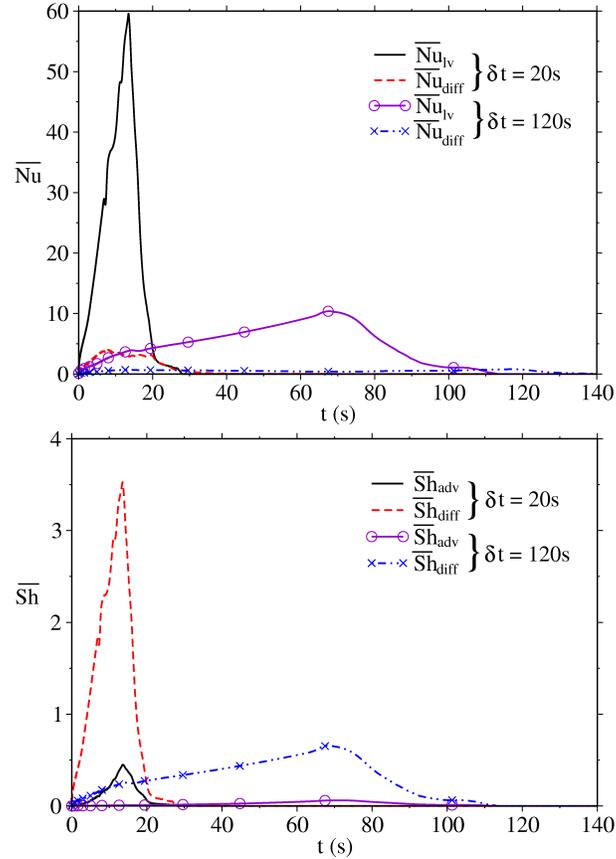
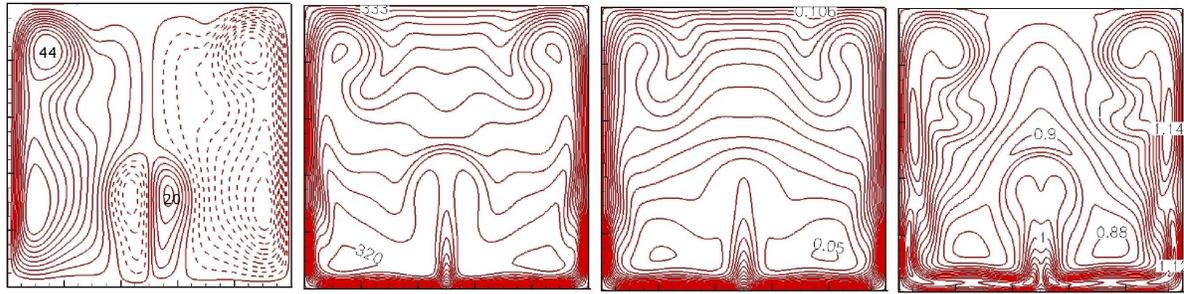
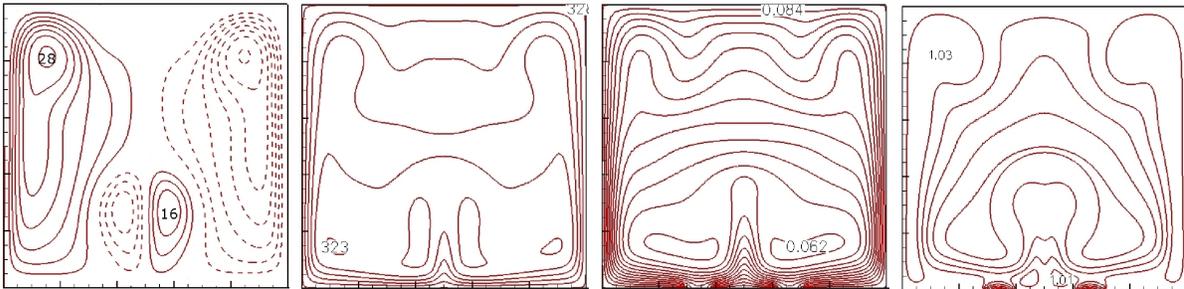


FIG. 5.10 – *Evaporation* : Variations temporelles des composantes advectives et diffusives des nombres de Nusselt et de Sherwood (Eqs. 5.38 et 5.42) le long des parois verticales pour $\delta t = 20$ s et $\delta t = 120$ s.

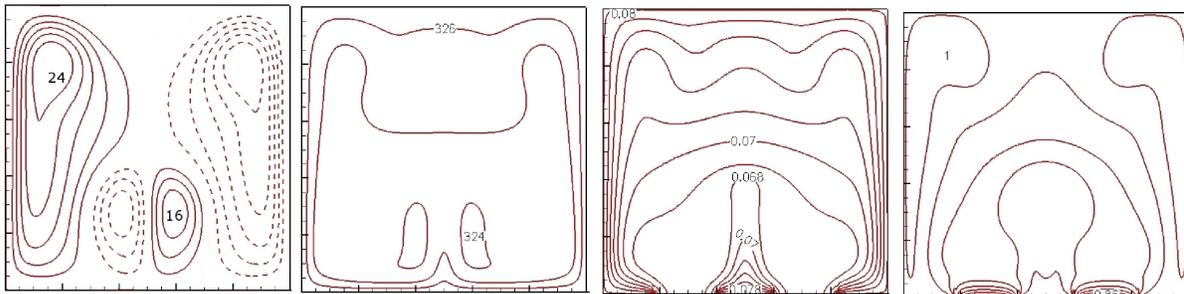
vit ). Les figures 5.12 montrent que, contrairement au cas de l’ vaporation, la temp rature moyenne de l’air humide d cro t plus vite que la masse volumique (environ 10 s d’ cart pour atteindre le r gime permanent). Des conditions de sursaturation apparaissent au bout d’environ 20 s lorsque la temp rature des parois est brusquement r duite : elles sont dues   la rapide d croissance de la temp rature au centre de la cavit  et en dessous de la paroi sup rieure. Ces sursaturations s’accompagnent aussi d’une d croissance tr s rapide de la pression thermodynamique qui refroidit localement l’air humide   une temp rature inf rieure   celle des parois (la temp rature minimale). Ce r sultat est th oriquement concevable lorsque l’approximation ”faible Mach” est employ e parce que la diminution rapide de la pression thermodynamique agit comme un puits de chaleur. Nous pensons cependant que ce r sultat doit  tre interpr t  avec prudence parce qu’il n’est pas certain que le travail des forces de pression ne joue pas un r le plus important dans ce type de situation. Nous consid rons donc que la mod lisation de ph nom nes de condensation lors d’une brusque diminution de temp rature devrait  tre reconsid r e en utilisant une formulation compl te de l’ quation de l’ nergie.



(a)



(b)



(c)

FIG. 5.11 – *Evaporation* : lignes de courant [ψ_{min} (4) ψ_{max}], isothermes en Kelvin [T_{min} (1K) T_{max}], iso-fraction massique [W_{min} (0.002) W_{max}] et iso-humidité relative [RH_{min} (2%) RH_{max}] lorsque la température moyenne est égale à $\bar{T} = 325$ K et selon la durée de l'augmentation de température des parois. (a) $\delta t = 20$ s, (b) $\delta t = 60$ s, (c) $\delta t = 120$ s

Les lignes de courant et les distributions de température, de fraction massique et d'humidité relative sont représentées sur les figures 5.13a, 5.13b et 5.13c, pour $\delta t = 20$ s, 60 s et 120 s à des instants correspondant à une température moyenne de l'air humide $\bar{T} = 325$ K. Comme dans le cas de l'évaporation, l'évolution de la structure de l'écoulement est due à des mouvements convectifs intenses le long des parois verticales. Par contre, le sens de rotation du fluide est inversé, ce qui n'est pas surprenant puisque l'air humide

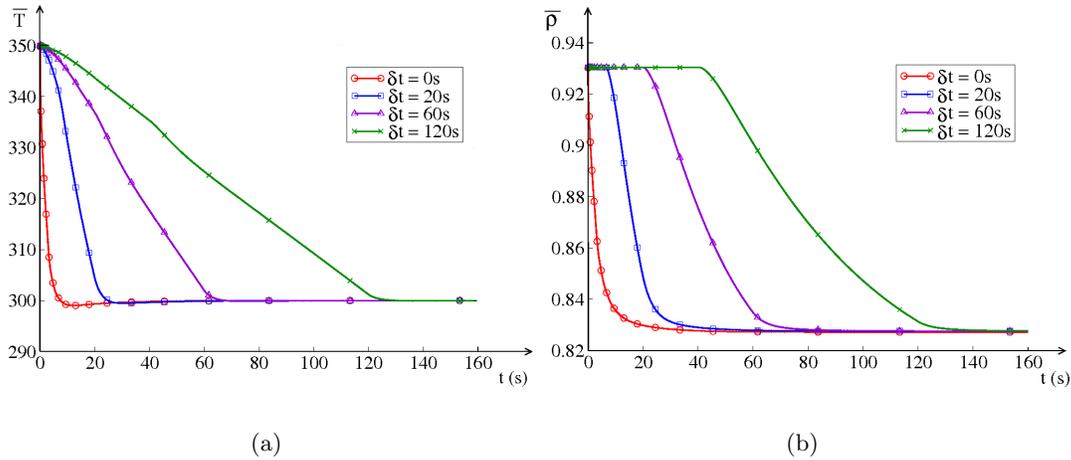


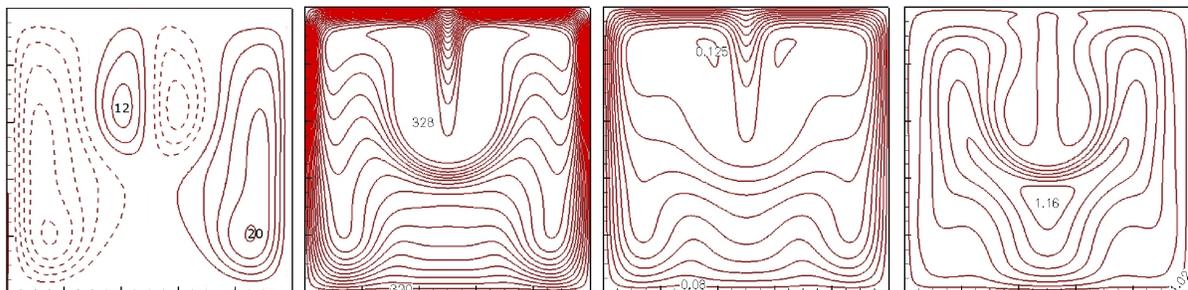
FIG. 5.12 – *Condensation* : Evolutions de la température moyenne de l’air humide (a) et de la masse volumique (b) pour les quatre cas considérés (Fig. 5.7 b).

chaud provenant du centre de la cavité se refroidit en descendant le long des parois verticales. De même, les rouleaux de type Rayleigh–Bénard apparaissent sous la paroi haute parce que les stratifications thermiques et solutales sont inversées. Comme dans le cas de l’évaporation, des sursaturations locales apparaissent et sont d’autant plus importantes que la température des parois décroît rapidement. Ces sursaturations, qui n’excèdent pas 50% lorsque $\delta t = 20 s$, sont aussi pilotées par les transferts thermiques.

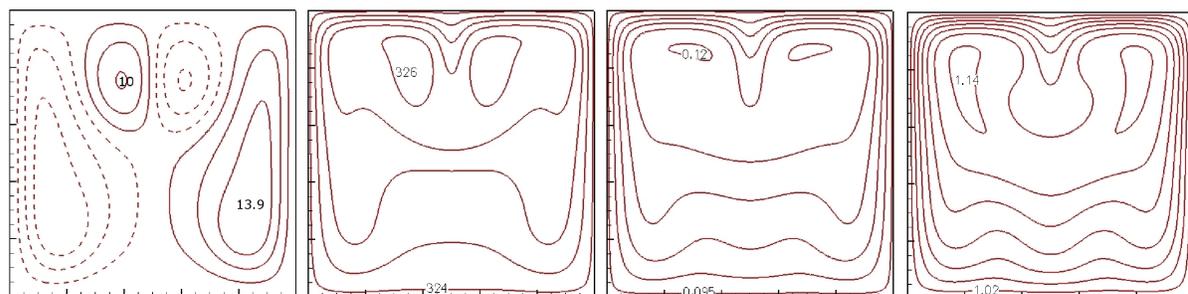
Les épaisseurs des films d’eau sur les parois ne sont pas uniformes : la moitié de la masse de vapeur d’eau se condense sur les parois verticales et un tiers le long de la paroi supérieure. Il en résulte que le profil des épaisseurs des films d’eau est très différent selon les parois. La figure 5.14 montre ces profils en régime stationnaire dans le cas $\delta t = 120 s$. Il est à noter qu’ils dépendent peu de la durée du refroidissement, en particulier parce que les recirculations sous la paroi supérieure conduisent systématiquement au même profil. On observe deux extremums symétriques par rapport au centre de la paroi, qui traduit l’effet des rouleaux de type Rayleigh–Bénard. Les épaisseurs des films d’eau sont maximales en haut des parois verticales parce que le transfert de matière y est maximal tout au long de l’évolution thermique. Cette masse d’eau condensée sur les parois (masse de vapeur d’eau initiale moins masse de vapeur finale) ne diffère pas plus de 0,1% de celle calculée théoriquement.

Les évolutions du nombre de Sherwood moyen le long des parois verticales représentées sur la figure 5.15 sont similaires à celles obtenues lors de l’évaporation. Comme les relations entre les composantes diffusives et advectives des nombres de Nusselt et de Sherwood sont identiques en condensation et évaporation, les évolutions du nombre de Nusselt moyen ne sont pas présentées. La masse de vapeur d’eau condensée sur les parois verticales étant peu sensible à la durée du refroidissement (écart inférieur à 4% lorsque δt est augmenté de 20 s à 120 s), l’intégration temporelle de $\overline{Sh}(t)$ conduit à une valeur quasiment constante, quelle que soit la valeur de δt . Cela est aussi vérifié pour l’intégration du nombre de Nusselt moyen qui permet de calculer les flux de chaleur transférés aux quatre parois. On trouve ainsi que la chaleur latente est égale à 2404 J/m et que la chaleur sensible et égale à 216 J/m pour $\delta t = 20 s$ (211 J/m pour $\delta t = 120 s$, écart traduisant des er-

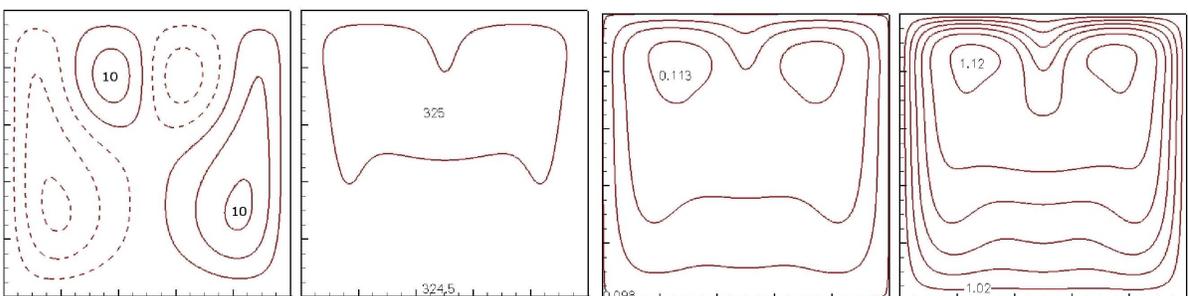
reurs numériques). Si l'on considère les quatre parois, cette chaleur est préférentiellement transférée à la paroi supérieure. La paroi inférieure en capte le moins.



(a)



(b)



(c)

FIG. 5.13 – *Condensation* : lignes de courant [ψ_{min} (4) ψ_{max}], isothermes en Kelvin [T_{min} (0,5K) T_{max}], iso-fraction massique [W_{min} (0.005) W_{max}] et iso-humidité relative [RH_{min} (2%) RH_{max}] lorsque la température moyenne est égale à $\bar{T} = 325 K$ et selon la durée de l'augmentation de température des parois. (a) $\delta t = 20 s$, (b) $\delta t = 60 s$, (c) $\delta t = 120 s$,

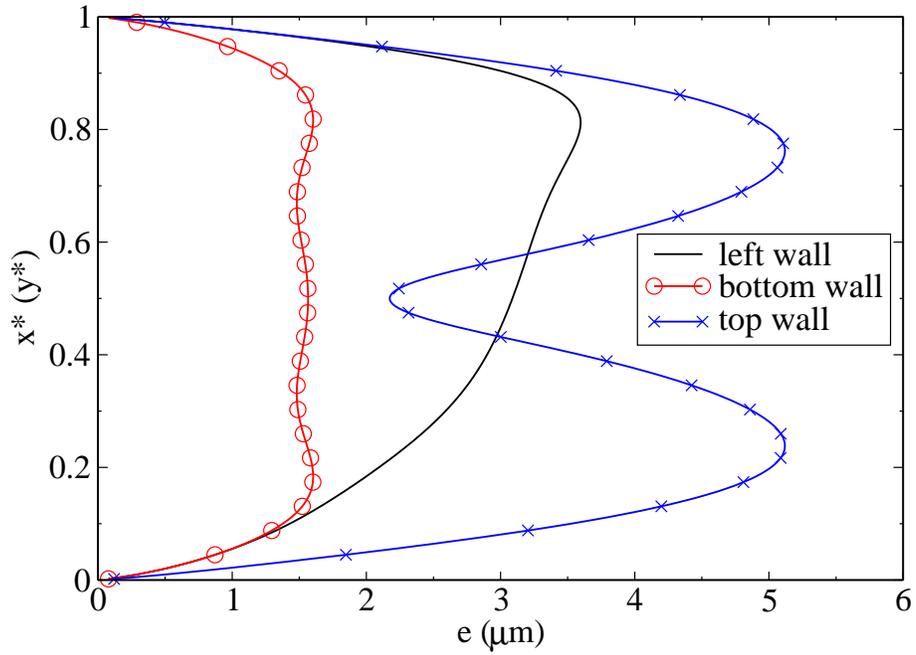


FIG. 5.14 – *Condensation* : profils des épaisseurs des films liquides le long des parois en régime permanent $\delta t = 120s$.

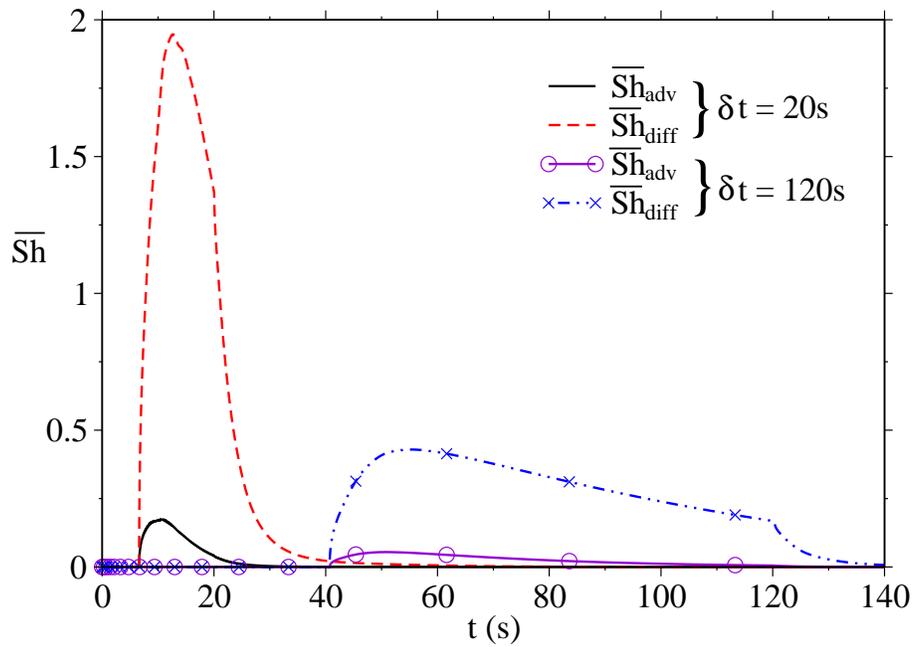


FIG. 5.15 – *Condensation* : evolutions of the mean Sherwood components along the vertical walls for $\delta t = 20 s$ and $\delta t = 120 s$.

5.5.1.3 Influence des variations des propriétés thermophysiques.

Le problème étant résolu en tenant compte des variations des propriétés thermophysiques avec la température et la fraction massique (annexe 1), on peut se poser la question de l'effet de ces variations sur les solutions obtenues dans les gammes de variation de température et d'humidité considérées. Le tableau 5.1 donne les variations maximales possible des diverses propriétés intervenant dans les calculs.

Des calculs ont donc été refaits en prenant les valeurs des propriétés physiques, autres que la masse volumique, correspondant aux conditions initiales. De très faibles différences entre les divers isocontours ont été observées. De même, le tableau 5.2 montre que les différences entre les valeurs moyennes de la masse volumique, de la température, des nombres de Nusselt et de Sherwood ainsi que les écarts de pression thermodynamique sont très faibles. Il est à noter que ces valeurs instantanées correspondent à l'instant auquel les flux massiques et thermiques sont maximums. Ces faibles différences peuvent s'expliquer par les variations en sens inverses des propriétés de l'air humide avec la fraction massique et la température.

Le tableau 5.1 montre que la conductivité thermique est la grandeur qui dépend le plus des conditions thermodynamiques. Il n'est donc pas surprenant de constater que la plus grande différence reportée dans le tableau 5.2 se rapporte au nombre de Nusselt.

	$\bar{\rho}$ ($kg\ m^{-3}$)	\bar{P} (atm)	\bar{T} (K)	\bar{Nu}	\bar{Sh}
Propriétés constantes	0.9115	0.9101	328.5	8.21	0.163
Propriétés variables	0.9117	0.9105	328.5	8.41	0.164

TAB. 5.2 – Comparaisons entre des quantités moyennes obtenues pour des propriétés thermophysiques constantes ou variables.

5.5.2 Variations périodiques de la température des parois.

Lorsque la température des parois varie périodiquement autour d'une température moyenne $T_{w,m} = (T_{w,c} + T_{w,h})/2$ avec un écart $\Delta T = (T_{w,h} - T_{w,c})$, on écrit sa loi de variation temporelle sous la forme

$$T_w(t) = T_{w,m} + \frac{\Delta T}{2} \cos\left(\frac{2\pi t}{t_p}\right) \quad (5.58)$$

où t_p est la période des oscillations. Les solutions discutées dans ce paragraphe ont toutes été calculées dans le cas $T_{w,m} = 325\ K$ and $\Delta T = 50\ K$. Un maillage uniforme comprenant 256^2 points a été utilisé. Le pas de temps a été choisi de telle façon qu'une période soit parcourue par au moins 10^4 pas de temps ($\Delta t = 5.10^{-3}\ s$ pour $t_p = 60\ s$, par exemple).

La figure 5.16 montre les évolutions de la température de paroi et de la température moyenne de l'air humide durant les cinq premières périodes lorsque $t_p = 60\ s$. La cavité est initialement remplie par de l'air chaud et humide ($\bar{T} = T_{w,h} = 350\ K$ et $RH = 50\%$). La condensation débute donc dès que la température de paroi tombe en dessous de la température de rosée. Dans ce cas, les conditions de saturation sont atteintes ($RH = 100\%$ en tout point de la cavité) avant une demi-période et les quatre parois sont partiellement humidifiées. Quand les parois sont réchauffées ($t \geq 30\ s$), l'évaporation commence rapidement. Comme la température moyenne de l'air humide n'est pas égale à la température chaude à la fin de la première période et des suivantes (Fig. 5.16), les conditions initiales pour la seconde période ne sont pas les mêmes qu'à $t = 0\ s$. Les parois sont asséchées

mais il y a toujours un faible mouvement convectif dans la cavité à cause du déphasage entre les oscillations de la température des parois et celles de la température moyenne. Ce déphasage dépend évidemment de la période et il est réduit lorsqu'elle est augmentée.

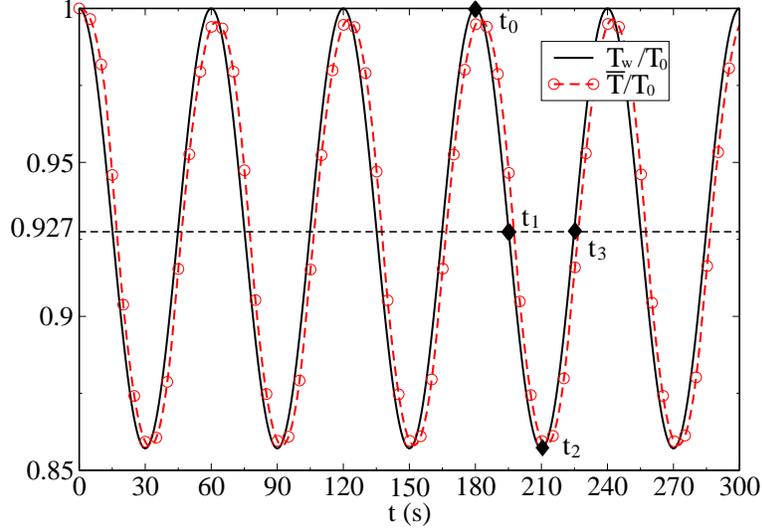


FIG. 5.16 – Evolutions périodiques de la température des parois et de la température moyenne de l'air humide.

Pour $t_p = 60$ s, les oscillations de la température moyenne de l'air humide peuvent être représentées par la relation

$$\bar{T}(t) \approx (T_{w,m} - 0.6) + \left(\frac{\Delta T}{2} - 0.8\right) \cos[2\pi(t - 2.32)/t_p] \quad (K) \quad (5.59)$$

Cette relation indique que l'oscillation de la température moyenne est proche de celle des parois avec une amplitude légèrement inférieure. La raison est que cette période est du même ordre de grandeur que les temps caractéristiques de diffusion thermique et massique $((L/2)^2/a_0 \approx 125$ s et $(L/2)^2/D_{av,0} \approx 75$ s). Par contre, des calculs effectués pour des périodes inférieures à $t_p = 1$ s conduisent à des solutions chaotiques. La figure 5.17 montre que la masse volumique moyenne et la pression thermodynamique oscillent quasiment en phase avec la température moyenne. L'amplitude de variation de la pression est $\Delta \bar{P} = 0,275 \bar{P}_0$, donc relativement plus importante que celle de la masse volumique moyenne et de la température moyenne parce que ces deux quantités oscillent en phase. La variation de la pression thermodynamique peut être représentée par la relation

$$\bar{P}(t) \approx \bar{P}_m + \frac{\Delta \bar{P}}{2} \cos[2\pi(t - 2.96)/t_p] \quad (K) \quad (5.60)$$

où $\bar{P}_m = 0,861 \bar{P}_0$.

On peut calculer, à partir de cette relation, le travail des forces de pression au cours d'une demi-période, soit $(\bar{P}(t + t_p/2) - \bar{P}(t))\Omega = \Delta \bar{P}\Omega = 278,6$ J/m. On trouve alors que cette énergie est approximativement égale à la chaleur sensible transférée aux quatre parois par diffusion thermique durant une demi-période. Par conséquent, l'augmentation ou

la diminution de l'énergie interne du mélange durant ce laps de temps est répartie entre la diffusion irréversible de chaleur sensible à travers les couches limites et le travail réversible des forces de pression (négatif quand T_w décroît, positif quand T_w croît). Il faut cependant noter que la chaleur latente associée à l'évaporation ou à la condensation représente la partie la plus importante de l'énergie transférée entre les parois et l'air humide.

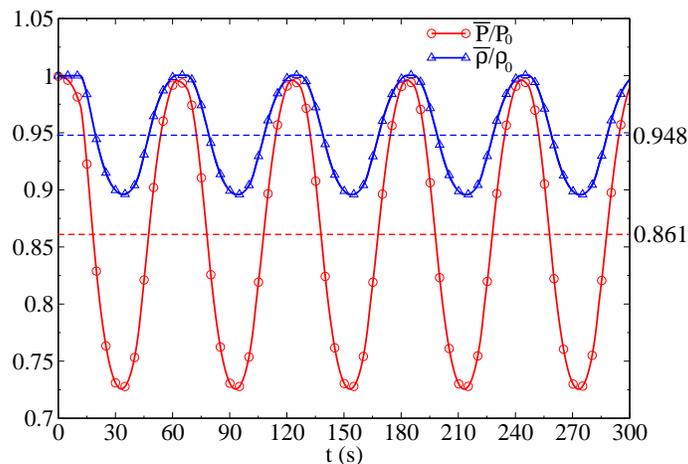


FIG. 5.17 – Evolutions de la pression thermodynamique et de la masse volumique adimensionnelles.

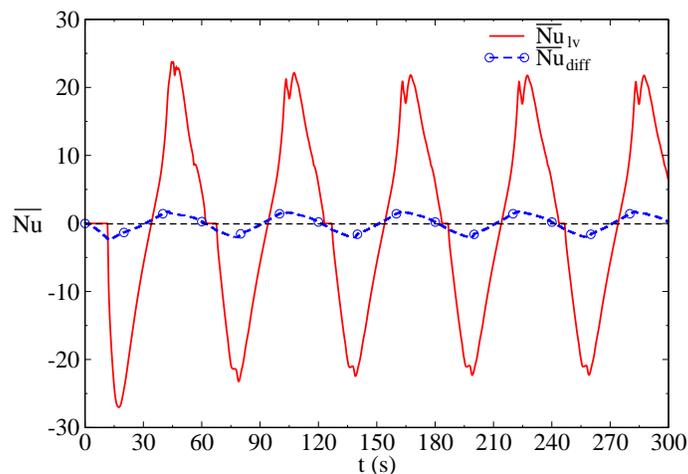


FIG. 5.18 – Variations des composantes du nombre de Nusselt moyen sur les parois verticales.

La figure 5.18 montre que le nombre de Nusselt moyen sur les parois verticales oscille avec un déphasage d'environ $\pi/2$ avec les quantités thermodynamiques mais que les deux composantes du nombre de Nusselt oscillent quasiment en phase. Ce déphasage s'explique par le temps nécessaire pour que la température des parois passe en dessous ou en dessus de la température de rosée. A la fin de chaque période, les parois verticales sont complètement

asséchées et le restent pendant 7,5 s (soit $\approx t_p/8$). La chaleur latente transférée aux parois verticales tend donc vers zéro et devient positive lorsque la température des parois devient inférieure à la température de rosée.

On peut supposer que la solution devient périodique établie (c'est-à-dire indépendante des conditions initiales) à la fin de la troisième période. Pour les périodes suivantes, l'état initial correspondant à l'instant où $T_w = 350\text{ K}$ (soit $t_0 = nt_p$, avec $n \geq 3$) est représenté sur la figure 5.19a (isolignes, isothermes, iso-fraction massique et humidité relative). Compte tenu du déphasage, la température et la fraction massique ne sont pas uniformes à $t = t_0$. Il en résulte qu'il existe un faible mouvement, essentiellement d'origine thermique, dans la partie inférieure de la cavité où les effets solutaux sont très faibles du fait de la stratification verticale de la fraction massique.

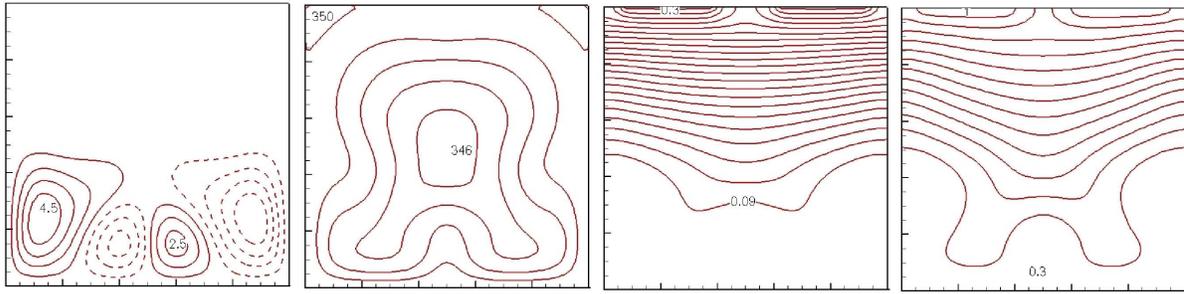
A $t = t_1$ (Fig.5.19b), la température des parois est $T_w(t_1) = 325\text{ K}$. Des couches d'air froid et presque saturé sont observées le long des quatre parois alors que le centre de la cavité reste occupé par de l'air chaud et moins humide. L'écoulement est caractérisé par deux rouleaux contrarotatifs se développant le long des parois verticales. Entre t_1 et t_2 , le centre de la cavité reste rempli d'air chaud et le gradient vertical de température entre le centre et la paroi supérieure provoque la naissance de deux rouleaux de type Rayleigh–Bénard sous cette paroi parce que les rouleaux latéraux ont perdu beaucoup de leur intensité.

A $t = t_2$ (Fig. 5.19c), le coeur de la cavité est pratiquement à la température des parois ($T_w = 300\text{ K}$) et rempli par de l'air saturé, à l'exception de poches d'air chaud sursaturé ($HR = 145\%$) sous la paroi supérieure. Il est à noter que la diminution de température entre t_0 et t_2 est aussi due à la forte diminution de la pression thermodynamique. Comme le travail négatif des forces de pression est uniformément réparti dans la cavité (compte tenu de la modélisation "faible Mach"), on pense que ces poches de sursaturation sont essentiellement dues à cette perte d'énergie.

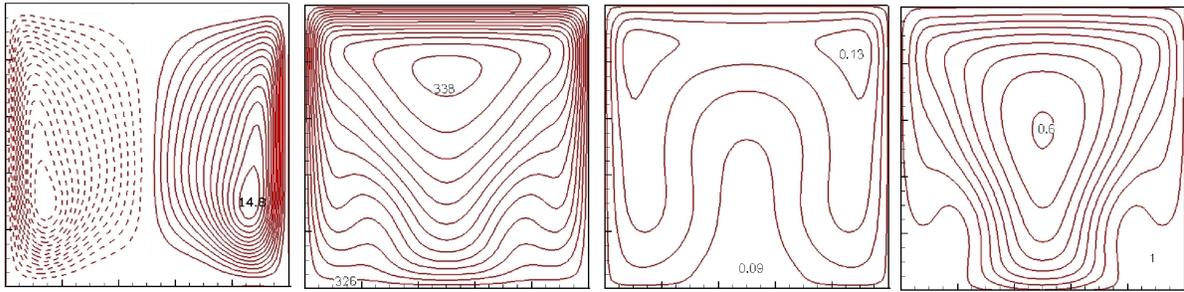
La figure 5.19d montre que l'écoulement s'inverse durant la phase d'évaporation et qu'il s'amplifie rapidement. A $t = t_3$, les rouleaux latéraux et au dessus de la paroi inférieure sont de grande intensité. La paroi inférieure s'assèche donc rapidement.

Les figures 5.20, 5.21 et 5.22 représentent les distributions des épaisseurs des films liquides le long des quatre parois aux quatre instants t_0 , t_1 , t_2 et t_3 . On remarque d'abord que la paroi supérieure (Fig. 5.20) n'est pas complètement sèche à t_0 , ce qui signifie qu'il reste pratiquement toujours un peu d'eau sur cette paroi. On remarque ensuite que la distribution de l'épaisseur du film d'eau représente fidèlement les périodes pendant lesquelles existent des rouleaux contrarotatifs, c'est-à-dire après $t = t_1$. Cette empreinte des rouleaux s'explique facilement parce que la masse volumique de la vapeur d'eau est plus faible que celle de l'air sec. Le profil uniforme à $t = t_1$ correspond aussi à la structure de l'écoulement à cet instant (Fig. 5.19b). En ce qui concerne les autres parois (Fig.5.21 et 5.22), elles sont complètement sèches au début de la période ($t = t_0$). Les différences entre les figures 5.21 et 5.22 s'expliquent comme suit : les parois verticales sont rapidement séchées pendant le dernier quart de la période (de t_3 à $t_0 + t_p$) alors que la paroi inférieure n'est humidifiée que pendant une courte durée correspondant au minimum de température des parois (c'est-à-dire au voisinage de t_2). Comme pour la paroi supérieure, l'évolution de la distribution des épaisseurs des films d'eau le long des parois verticales représente bien les changements dans la configuration de l'écoulement, selon que la vapeur se condense ou que l'eau s'évapore.

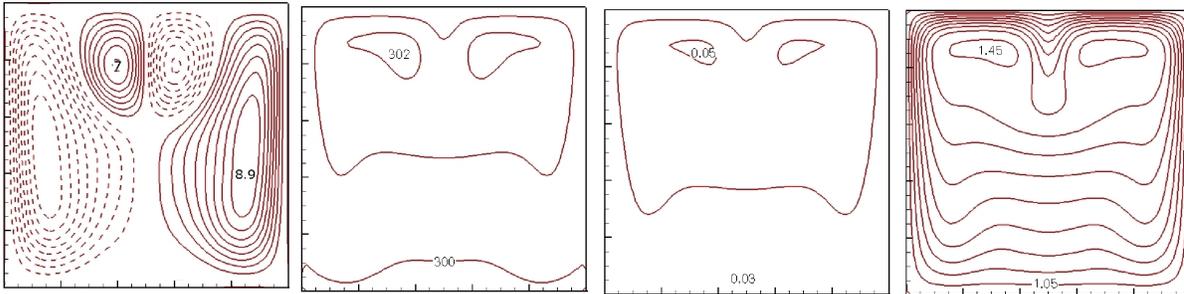
Les évolutions des masses d'eau sur les quatre parois, de la masse de vapeur d'eau et de la masse totale au cours d'une période sont représentées sur la figure 5.23. Ces résultats montrent, comme espéré, que la conservation de la masse est satisfaite à tout instant : la masse de vapeur est minimale lorsque la masse d'eau est maximale et leur somme reste constante. Ces courbes confirment que la masse d'eau condensée sur l'ensemble des deux parois verticales est la plus grande alors que celle condensée sur la paroi inférieure est la plus faible. Le maximum de masse d'eau sur les quatre parois se produit quelques secondes après que leur température soit minimale (à $t = t_2$) et le déphasage est maximal sur la paroi supérieure. La paroi inférieure est sèche pendant une demi période (environ), les parois verticales pendant un quart de période et la paroi supérieure pendant seulement 3 s. Un peu d'eau liquide reste donc quelques secondes après que les parois ont atteint leur température maximale, ce qui montre que l'évaporation continue quand la température redescend vers la température de rosée.



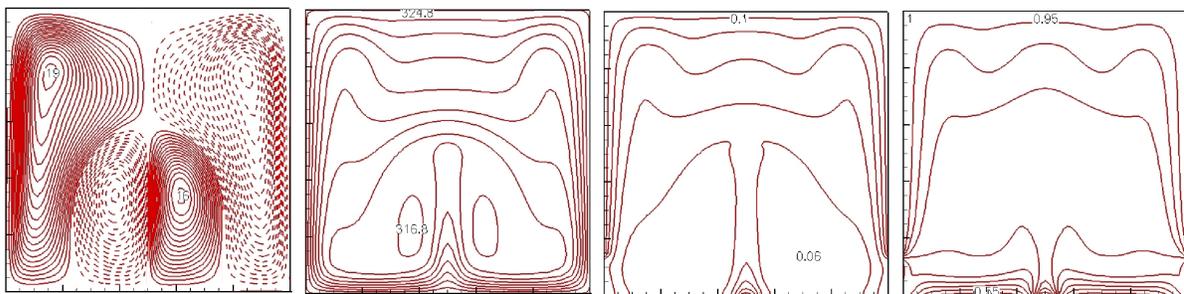
(a)



(b)



(c)



(d)

FIG. 5.19 – Lignes de courant [ψ_{min} (1) ψ_{max}], isothermes en Kelvin [T_{min} (1K) T_{max}], iso-fraction massique [W_{min} (0.01) W_{max}] et iso-humidité relative [RH_{min} (0,05%) RH_{max}] à quatre instants au cours d'une période (a) $t = t_0$, (b) $t = t_1$, (c) $t = t_2$, (d) $t = t_3$

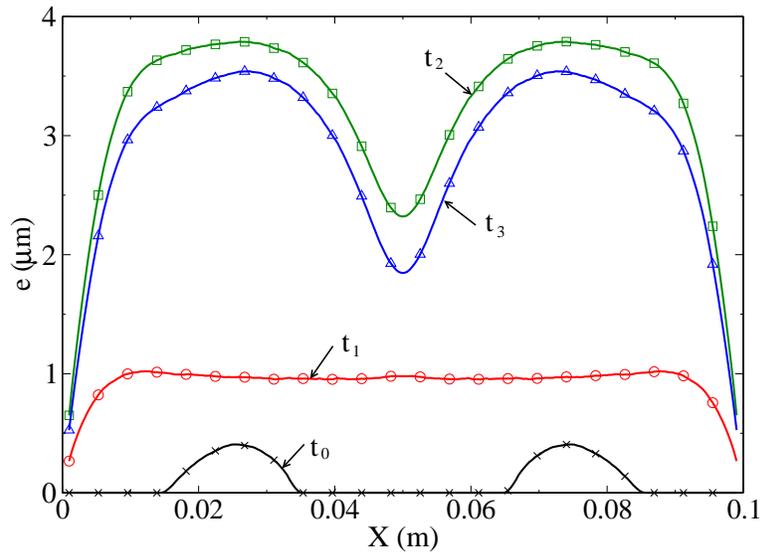


FIG. 5.20 – Variations de l'épaisseur du film liquide sur la paroi supérieure aux instants t_0 à t_3 (Fig. 5.19a à 5.19d)

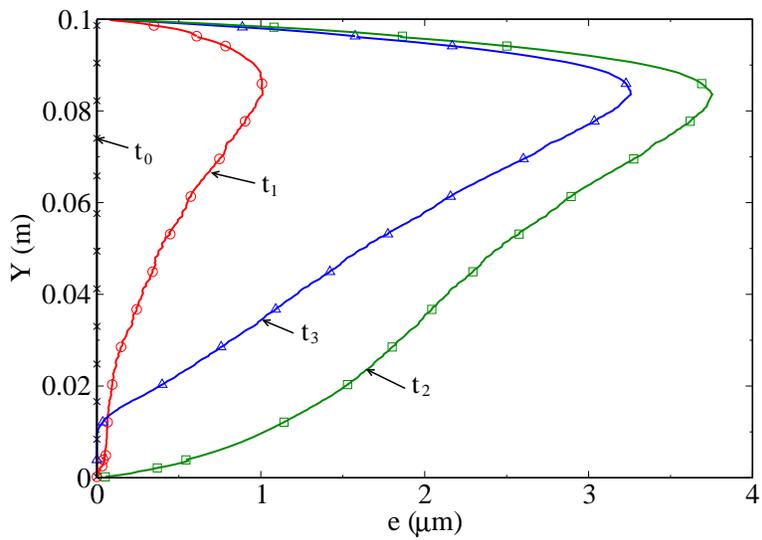


FIG. 5.21 – Variations de l'épaisseur du film liquide sur les parois verticales aux instants t_0 à t_3 (Fig. 5.19a à 5.19d)

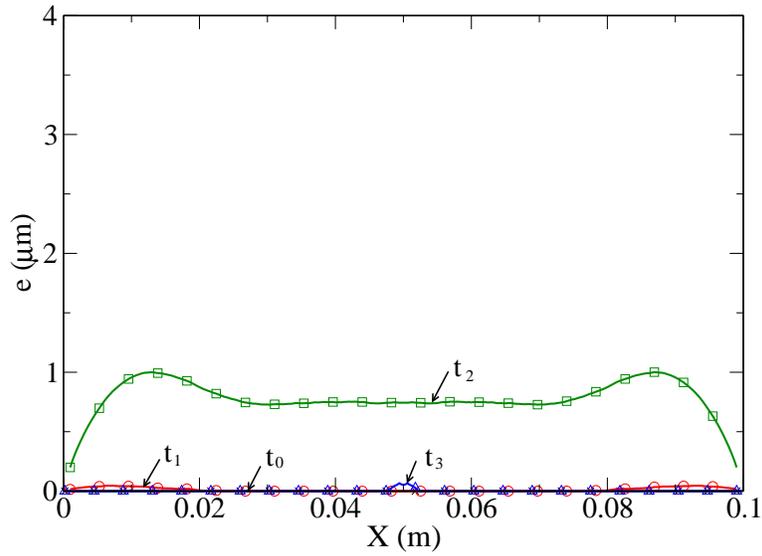


FIG. 5.22 – Variations de l'épaisseur du film liquide sur la paroi inférieure aux instants t_0 à t_3 (Fig. 5.19a à 5.19d)

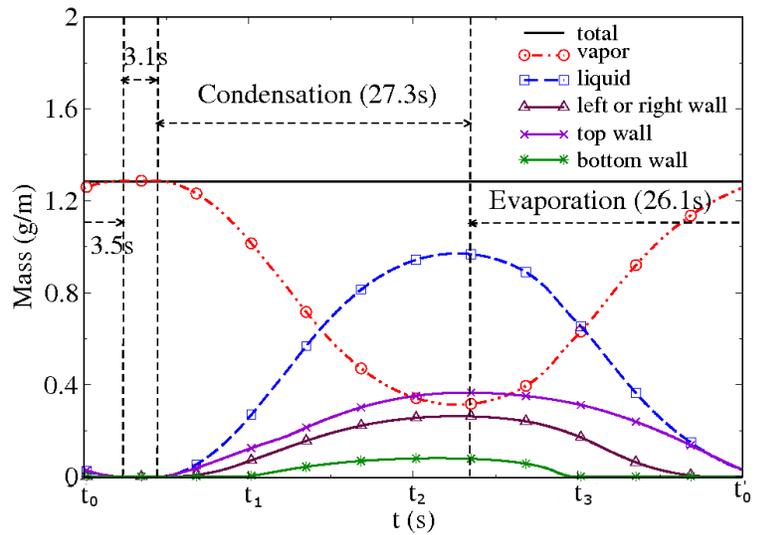


FIG. 5.23 – Evolutions des masses d'eau liquide sur les parois et de vapeur d'eau au cours d'une période.

5.6 Influence de l'allongement : condensation

Dans cette partie, nous étudions l'influence de l'allongement de la cavité sur la condensation et en ne considérant qu'une décroissance linéaire de la température des parois de 350 K à 300 K pendant 60 secondes. Dans tous les cas, la cavité est initialement remplie d'air à 350 K et d'humidité relative $HR = 50\%$.

L'effet de l'allongement n'est pas aussi simple que dans le cas de la convection thermique (sauf si le mélange binaire est supposé très dilué) parce que deux paramètres interviennent simultanément : l'allongement et la masse de vapeur d'eau. Par exemple, si la hauteur de la cavité est augmentée alors que la largeur est maintenue fixe (nombre de Froude constant), la masse de vapeur augmente. Si le volume de la cavité est maintenu constant, la masse de vapeur d'eau l'est aussi mais le nombre de Froude varie. On étudie donc ces deux cas séparément.

5.6.1 Augmentation de l'allongement et du volume de la cavité (largeur constante).

Quand l'allongement augmente en maintenant la largeur L fixe, la masse d'eau liquide condensée sur les quatre parois est proportionnelle à H parce que l'état thermodynamique final est identique ($m_{eau} = (\rho_{m,0} - \rho_{m,\infty})HL$). Par conséquent, l'épaisseur moyenne du film liquide augmente avec H (ou avec le rapport de forme). Par exemple, l'épaisseur moyenne, e_m , du film liquide pour $A = 2$ est deux fois plus importante que pour $A = 0,5$. On trouve immédiatement que $e_m = \kappa/6, \kappa/4$ et $\kappa/3$ pour $A = 0,5, 1$ et 2 avec $\kappa = (\rho_{m,0} - \rho_{m,\infty})L/\rho_{eau}$. La durée de la condensation doit donc augmenter avec la hauteur sauf si l'intensité de la convection thermosolutale augmente suffisamment.

La figure 5.24 montre l'évolution de la masse totale d'eau condensée pour les trois allongements considérés. Pendant les 20 premières secondes, la convection est principalement thermique parce que la température des parois est supérieure à celle du point de rosée ($T_{dp} \approx 333 K$) alors que les gradients de fraction massique causés par les différences de température sont faibles. Après cette période, la rapide augmentation de la masse condensée est associée à un fort mouvement convectif. Comme la pente des courbes de la figure 5.24 donne une indication globale de l'intensité de la convection, on en déduit que la convection augmente fortement avec l'augmentation de la hauteur de la cavité (résultat classique pour une cavité différentiellement chauffée, ce qui n'est pas le cas ici). Par exemple, la valeur maximale de la fonction de courant adimensionnelle passe de $\psi_{max} \approx 6$ à $\psi_{max} \approx 27$ quand A est augmenté de 0,5 à 2. Le plateau observé sur chacune des courbes de la figure 5.24 signifie que les transferts deviennent essentiellement diffusifs à partir d'une certaine durée qui dépend de A . Les instants notés t_d correspondent à 99% de la valeur asymptotique de la masse d'eau. A partir des valeurs des nombres de Rayleigh massique et thermique basés sur les écarts maximums de température et de fraction massique à $t = t_d$, nous considérons que la convection thermosolutale dégénère en double diffusion si ces maximums valent $\Delta W_{v,max} = 1,33 \cdot 10^{-3}$ et $\Delta T_{max} = 0,2 K$. Les points t_d reportés sur la figure 5.24 montrent que la fin du régime convectif passe de $t_d = 70 s$ pour $A = 0,5$ à $t_d = 100s$ pour $A = 2$. Comme la masse de vapeur condensée est deux fois plus importante pour $A = 2$ que pour $A = 0,5$, on en déduit que la vitesse de condensation augmente avec l'allongement. Par contre, si l'on suppose que le régime stationnaire est atteint lorsque $\Delta W_{v,max} = 1,33 \cdot 10^{-5}$ et $\Delta T_{max} = 2 \cdot 10^{-3} K$, les valeurs de t_∞ indiquées

sur la figure 5.24 montrent que la durée du régime purement diffusif ($t_\infty - t_d$) augmente avec A .

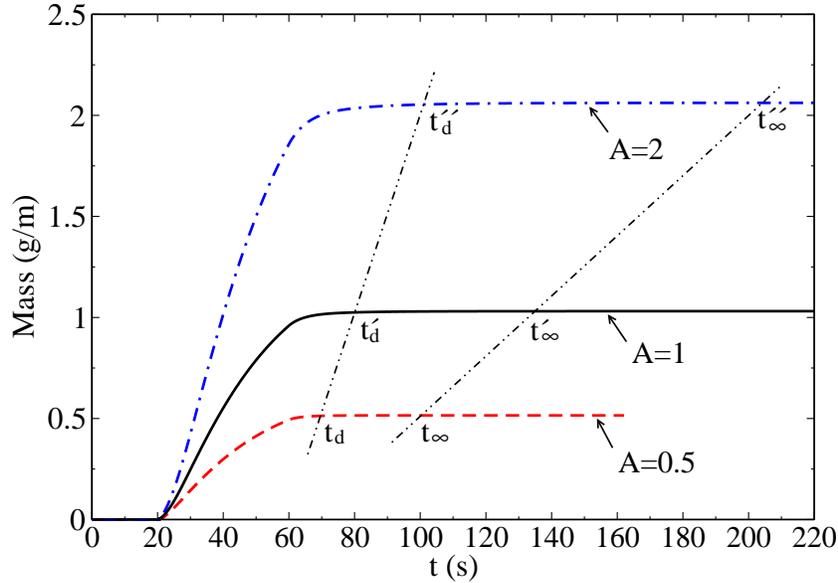


FIG. 5.24 – Evolutions de la masse d’eau condensée sur les quatre parois pour les allongements $A = 0,5, 1$ et 2 (largeur de la cavité : $L = 0,1 m$. t_d et t_∞ correspondent au début et à la fin du régime de diffusion.

Cette analyse globale des phénomènes thermosolutaux et de condensation peut être affinée en considérant l’évolution de quantités locales. Cette analyse est présentée dans les paragraphes et figures ci-dessous.

Les variations temporelles de la pression thermodynamique, du maximum de la fonction de courant et des différences maximales de température et de fraction massique sont représentées sur les figures 5.25a à 5.25d. ΔT_{max} et ΔW_{max} sont les différences entre la température (fraction massique) des parois et la température (fraction massique) maximale ou minimale de l’air humide dans la cavité. Ces extremums de T et W se situent dans la partie supérieure de la cavité et symétriquement par rapport à l’axe vertical passant par le centre de la cavité.

Le changement de pente observé sur la pression à $t \approx 20 s$ indique le début de la condensation et la valeur asymptotique caractérise le début du régime de diffusion. Si la variation de pression en fonction de l’allongement est assez faible (Fig. 5.25a), parce que la pression thermodynamique est une grandeur globale, les variations de ΔW_{max} (Fig. 5.25b) donnent une vue plus précise sur l’évolution du transfert de matière : elles indiquent clairement que l’instant correspondant au début de la condensation ne dépend pas de l’allongement, ce qui était espéré. ΔW_{max} augmente avec A parce que la masse de vapeur d’eau est proportionnelle à A alors que l’intensification des mouvements convectifs ne l’est pas. Il y a donc un pic plus élevé et la durée du régime convectif est plus longue.

L'évolution du maximum de la fonction de courant (Fig. 5.25c) donne une indication sur la structure de l'écoulement : elle montre que l'air humide, immobile à $t = 0$, se met rapidement en mouvement sous l'effet de l'écart entre la température des parois et la température moyenne du fluide. Le taux maximum de recirculation est atteint au bout de $t \approx 10s$ pour $A = 1$ et $A = 2$ alors que le taux de recirculation reste quasiment constant entre $t = 10s$ et $t = 60s$ pour $A = 0,5$. Cet écoulement, d'origine purement thermique, devient localement moins intense mais il envahit l'ensemble de la cavité à mesure que la température des parois diminue : les petits rouleaux le long des parois verticales atteignent progressivement leur taille maximale, soit la moitié de la section de la cavité.

Au bout de $t \approx 20s$, la condensation débute et la contribution des forces solutales induit immédiatement une intensification de l'écoulement jusqu'à ce qu'un second pic soit atteint (pour les mêmes raisons que dans le cas purement thermique). La localisation temporelle de ce second pic dépend peu de l'allongement. Il se situe à $t \approx 30s$ pour les trois valeurs de A considérées. Les mouvements convectifs sont ensuite d'origine thermosolutale et l'écoulement s'atténue à mesure que la fraction massique et la température s'uniforment.

Cependant, l'évolution de ΔT_{max} fait apparaître un second pic à $t \approx 60s$, quel que soit l'allongement (Fig. 5.25d). Cette augmentation de l'écart de température s'explique par la diminution de l'intensité de l'écoulement qui précède le régime de diffusion, ce qui signifie que l'écart de température maximal n'est alors plus significatif : le travail des forces de pression (puits de chaleur en condensation) s'annule (Fig. 5.25a) et ΔW_{max} diminuant fortement, la partie centrale de la cavité se refroidit moins vite que les parois. Cet effet semble être directement lié à la pente de la décroissance temporelle de la température des parois.

Les lignes de courant, isothermes, iso-fractions massiques et iso-humidités relatives tracées sur les figures 5.26 à 5.28 pour $A = 0,5, 1$ et 2 aux instants $t = 10s, 30s$ et $60s$ donnent une représentation plus précise de l'évolution de la structure de l'écoulement. Deux rouleaux de type Rayleigh-Bénard apparaissent au bout de quelques secondes sous la paroi supérieure pour $A = 1$ et $A = 2$ parce que le centre de la cavité est plus chaud. Ils disparaissent progressivement lorsque $t > 60s$. Ces rouleaux n'apparaissent pas pour $A = 0,5$ parce que le nombre de Froude (ou de Rayleigh thermique) basé sur la demi-hauteur de la cavité est trop faible. Il faut noter que cette topologie de l'écoulement dépend fortement de la durée du refroidissement des parois.

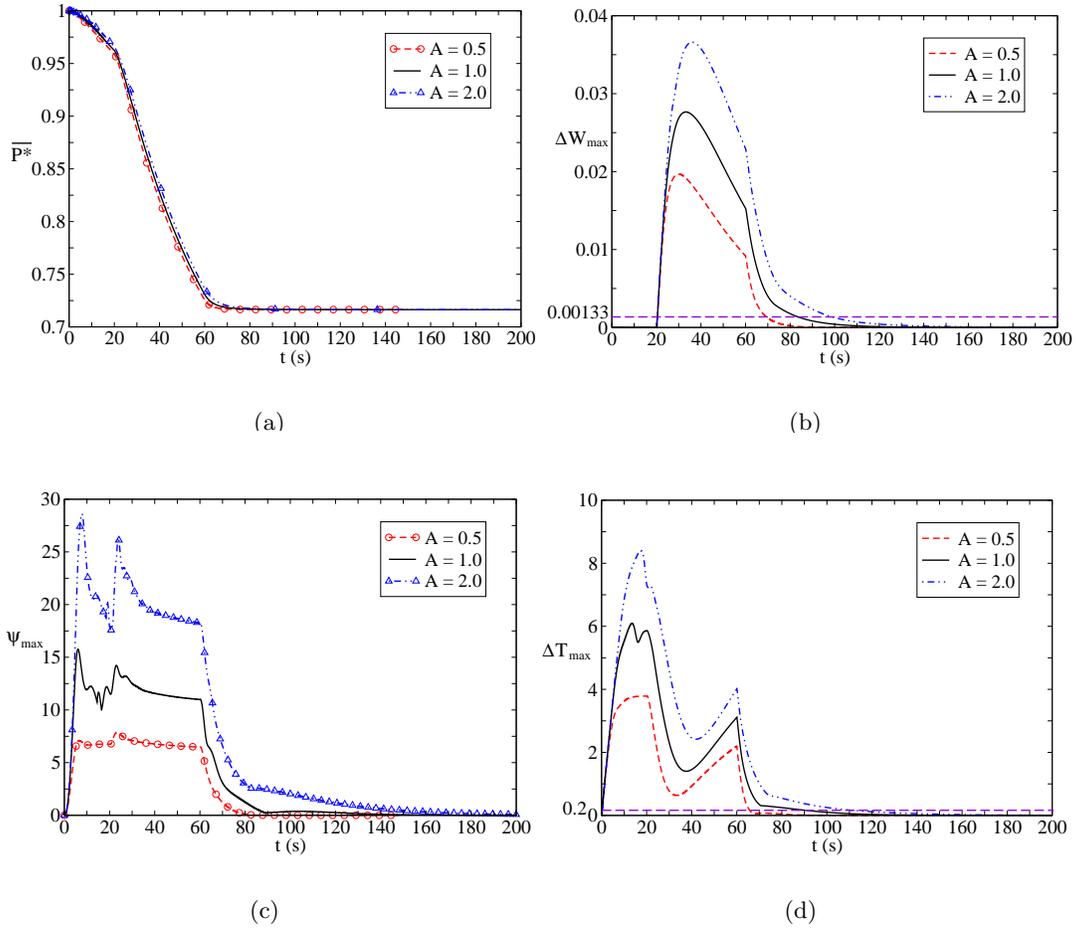
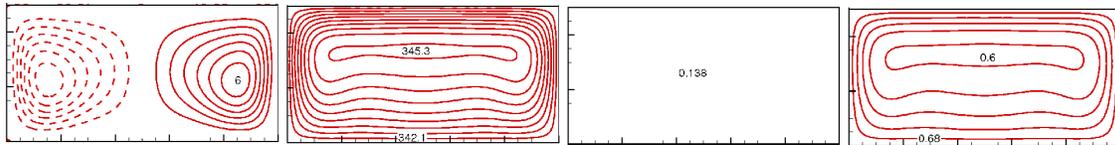


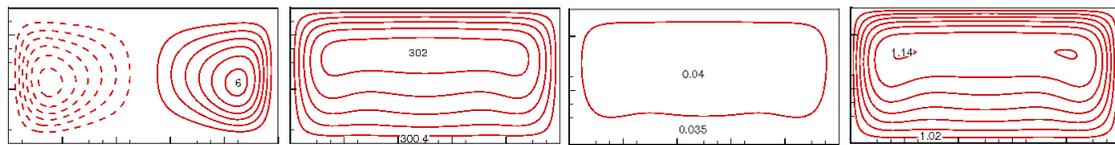
FIG. 5.25 – *Largeur de la cavité constante* : Evolution de quantités caractéristiques au cours du refroidissement des parois pour différents allongements. (a) Pression thermodynamique réduite, (b) différence maximale de fraction massique de vapeur d'eau, (c) fonction de courant maximale, (d) différence maximale de température.



(a)

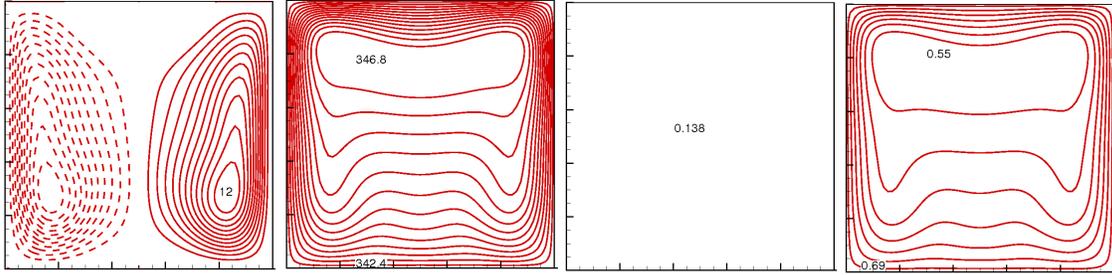


(b)

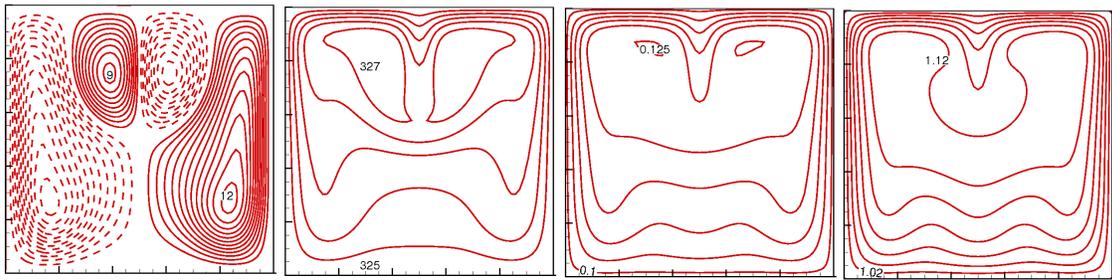


(c)

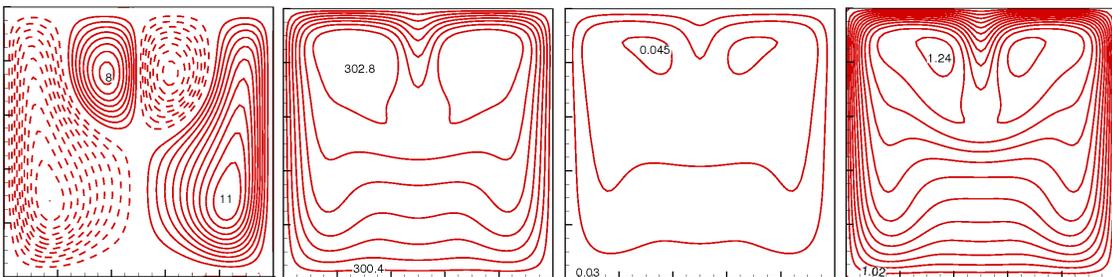
FIG. 5.26 – *Largeur de la cavité constante* : $\mathbf{A} = \mathbf{0,5}$: lignes de courant $[\psi_{min} (4) \psi_{max}]$, isothermes en Kelvin $[T_{min} (0,5K) T_{max}]$, iso-fraction massique $[W_{min} (0.005) W_{max}]$ et iso-humidité relative $[HR_{min} (2\%) HR_{max}]$ (a) $t = 10 s$, (b) $t = 30 s$, (c) $t = 60 s$.



(a)

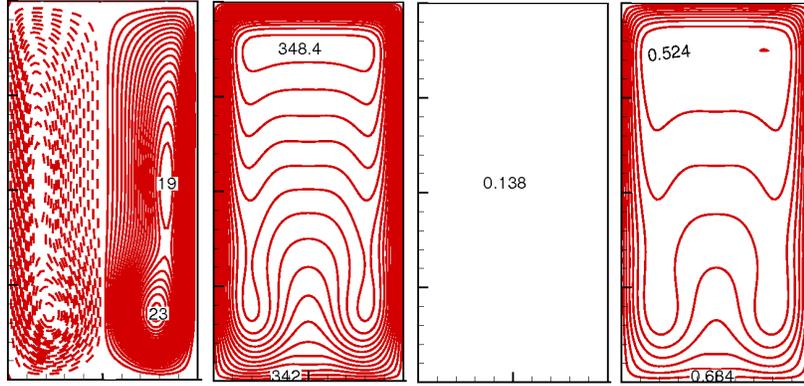


(b)

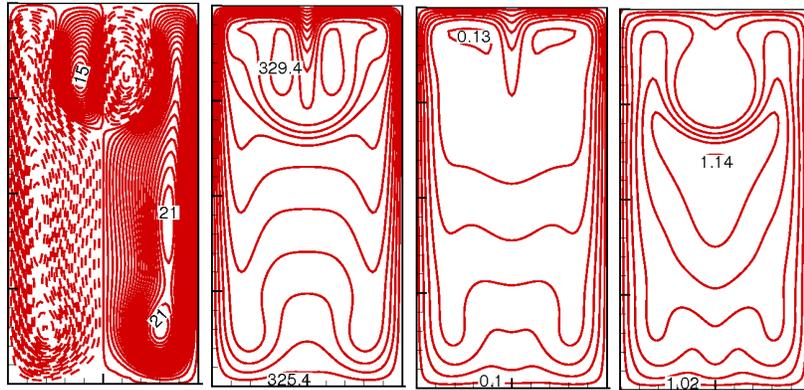


(c)

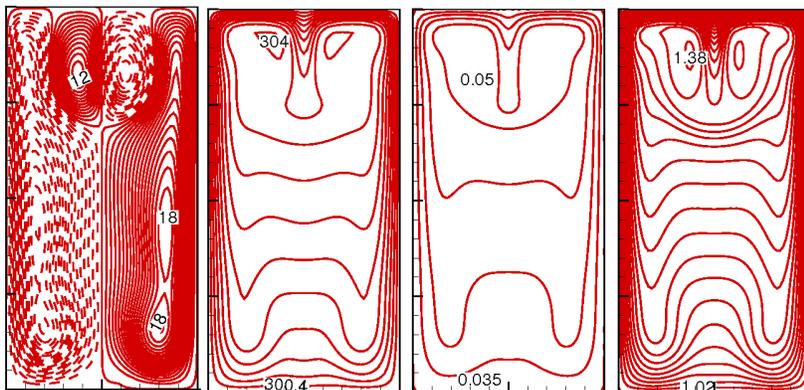
FIG. 5.27 – Largeur de la cavité constante : $\mathbf{A} = \mathbf{1}$: lignes de courant [ψ_{min} (4) ψ_{max}], isothermes en Kelvin [T_{min} (0, 5K) T_{max}], iso-fraction massique [W_{min} (0.005) W_{max}] et iso-humidité relative [HR_{min} (2%) HR_{max}] (a) $t = 10$ s, (b) $t = 30$ s, (c) $t = 60$ s.



(a)



(b)



(c)

FIG. 5.28 – Largeur de la cavité constante : $\mathbf{A} = \mathbf{2}$: lignes de courant [ψ_{min} (4) ψ_{max}], isothermes en Kelvin [T_{min} (0, 5K) T_{max}], iso-fraction massique [W_{min} (0.005) W_{max}] et iso-humidité relative [HR_{min} (2%) HR_{max}] (a) $t = 10$ s, (b) $t = 30$ s, (c) $t = 60$ s.

5.6.2 Variation de l'allongement à volume constant

Les variations du rapport de forme à volume constant sont ensuite étudiées pour une cavité de volume $\Omega = 10^{-2} m^3/m$, soit $5 \text{ cm} \leq H$ ou $L \leq 20 \text{ cm}$. Le nombre de Froude varie donc de $Fr = 1,08 \cdot 10^{-8}$ à $Fr = 6,94 \cdot 10^{-7}$ quand A augmente de $A = 0,25$ à $A = 4$. Comme la masse de vapeur d'eau est constante ($m_{eau} = 1,03 \text{ g/m}$), la pression thermodynamique finale est la même ($P = 0,716 \text{ atm}$). La figure 5.29 montre que l'évolution de la masse condensée est très peu sensible au rapport de forme. Les taux de recirculation sont sensiblement les mêmes alors que la structure des écoulements dépend fortement de A .

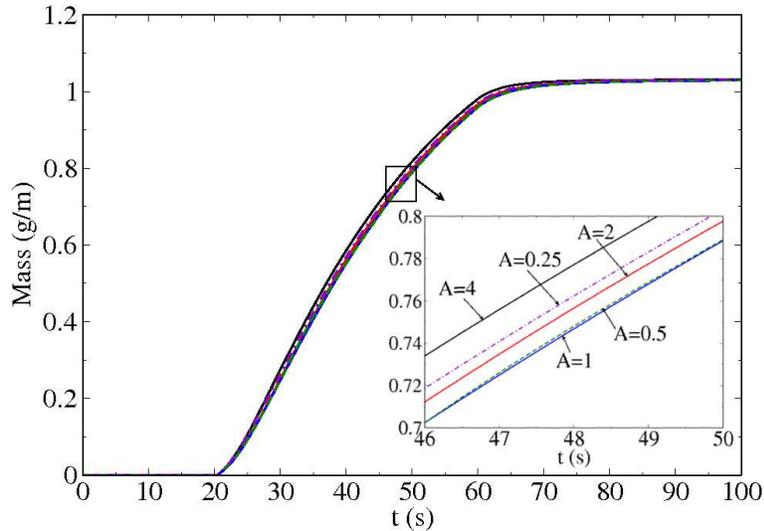


FIG. 5.29 – Evolutions de la masse d'eau condensée sur les quatre parois pour des allongements $0,25 \leq A \leq 4$ lorsque le volume de la cavité est maintenu constant ($\Omega = 10^{-2} m^3/m$).

Les rouleaux de type Rayleigh–Bénard sous la paroi supérieure (voir Fig. 5.13) existent toujours lorsque $A = 0,5, 1$ et 2 mais disparaissent pour $A = 0,25$ et $A = 4$. Dans ces deux derniers cas, les recirculations ne consistent qu'en deux rouleaux le long des parois verticales dont l'extension latérale est $L/2$ (c'est-à-dire $2,5 \text{ cm}$ pour $A = 4$ et 10 cm pour $A = 0,5$). En conséquence, le profil stationnaire de l'épaisseur du film d'eau sur la paroi supérieure est très différent selon le rapport de forme puisque, comme on l'a souligné précédemment, le profil reflète la structure convective se développant en régime transitoire. L'épaisseur du film d'eau au centre de la paroi supérieure est donc maximale pour $A = 0,25$ et $A = 4$ alors qu'elle est minimale pour les trois autres rapports de forme (Fig. 5.30).

Les répartitions de masse d'eau condensées sur les quatre parois sont reportées dans le tableau 5.3. Comme prévu, les masses d'eau condensées sur les parois verticales augmentent avec le rapport de forme. L'inverse est donc observé sur les parois horizontales, la différence entre les masses étant maximale pour $A = 1$ parce que les recirculations dans les deux rouleaux sommitaux sont plus intenses que pour $A = 0,5$ ou $A = 2$.

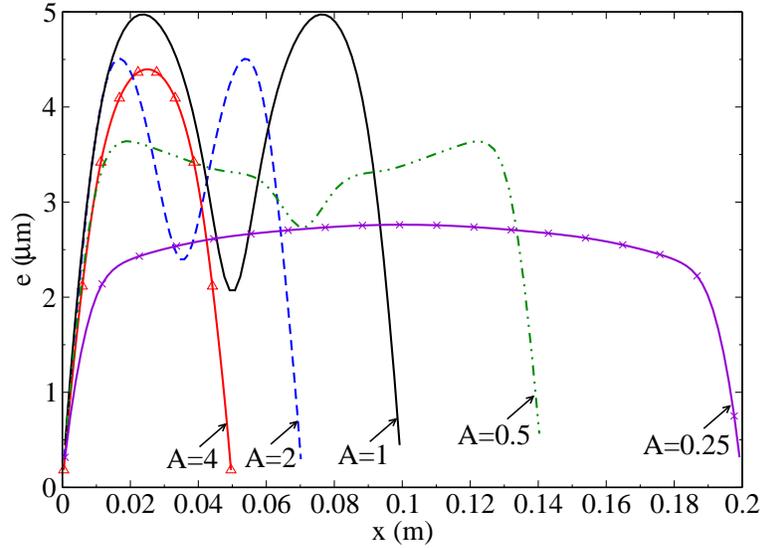


FIG. 5.30 – Epaisseur du film d’eau sur la paroi supérieure en régime stationnaire pour $0,25 \leq A \leq 4$ lorsque le volume de la cavité est maintenu constant ($\Omega = 10^{-2} m^3/m$).

Rapport de forme	$A = 0.25$	$A = 0.5$	$A = 1$	$A = 2$	$A = 4$
Paroi droite ou gauche	0.099	0.186	0.264	0.362	0.417
Paroi supérieure	0.494	0.444	0.372	0.230	0.151
Paroi inférieure	0.337	0.215	0.130	0.077	0.046

TAB. 5.3 – Masse d’eau liquide condensée sur chacune des parois (en g/m) selon le rapport de forme.

5.7 Conclusion

La condensation et l’évaporation sur les parois d’une cavité fermée ont été étudiées en régime transitoire. Ces changements de phase surfaciques sont associés à la convection thermosolutale d’air humide se développant dans une cavité dont la température uniforme et égale des quatre parois varie au cours du temps. L’approximation ”faiblement compressible” a été employée afin de tenir compte des variations de masse volumique dues aux variations de température et de la composition du mélange, assimilé à un gaz parfait avec le gaz porteur non condensable.

Malgré les valeurs modérées des différences maximales de température, $\Delta T_{max} = 50 K$ autour de $\bar{T} = 325 K$, et de fraction massique de vapeur d’eau, $\Delta W_{max} < 0,15$, l’approximation de Boussinesq n’est pas applicable compte-tenu des variations temporelles

importantes de la pression thermodynamique et de la masse volumique. Les variations de toutes les propriétés physiques avec la température, la concentration de vapeur et avec la pression ayant été prises en compte, la modélisation permet une extension à tout autre type de mélanges binaires, pourvu que le gaz porteur ne soit pas condensable. Les principales restrictions du modèle sont dues aux hypothèses d'écoulement laminaire et de non formation de brouillard, ce qui empêche de considérer de forts taux d'évaporation ou de condensation.

Ce modèle permet cependant de calculer à tout instant les épaisseurs des films de liquide sur les parois et de s'assurer que la masse totale de vapeur et de liquide reste constante, que ce soit en période de condensation ou en période d'évaporation. En démarrant les calculs à partir d'un état thermodynamique bien défini, il a été montré que l'état thermodynamique final, résultant de calculs élémentaires basés sur le premier principe et sur la loi des gaz parfaits, était obtenu avec une excellente précision (écarts relatifs inférieur à 0,1% sur toutes les grandeurs thermodynamiques), quel que soit le type de variation temporelle de la température des parois. Les analyses temporelles des solutions calculées pour un grand nombre de configurations ont en outre permis de dégager des explications physiques cohérentes.

Des calculs ont d'abord été effectués dans le cas plus simple de variations linéaires de la température des parois afin d'expliquer les différences entre les structures d'écoulement observées pendant la condensation ou pendant l'évaporation. Ces différences sont principalement causées par le changement de sens des forces thermique et solutale, agissant toujours en coopération dans le cas de l'air humide. On observe, en particulier, l'existence transitoire de deux cellules contra-rotatives (de type Rayleigh-Bénard) sous la paroi haute en période de condensation alors qu'elles se situent au dessus de la paroi basse en période d'évaporation. L'intensité des écoulements générés par ces cellules dépend de la vitesse de variations de la température des parois. Lorsque la température des parois évolue périodiquement, les grandeurs thermodynamiques globales (grandeurs intégrées sur le volume de la cavité) caractérisant la convection thermosolutale et le changement de phase oscillent autour de valeurs moyennes avec de faibles déphasages par rapport à la température des parois. Les flux massique et thermique pariétaux évoluent en suivant des lois périodiques très différentes.

L'influence de l'allongement de la cavité, qui n'a été étudié qu'en période de condensation, s'avère beaucoup plus complexe que dans le cas de mélanges binaires dilués car, pour des conditions thermodynamiques initiales données (pression, température et fraction massique) la masse de vapeur varie avec l'allongement si l'une des dimensions de la cavité est fixée, ou bien le nombre de Froude varie avec l'allongement si la masse de vapeur est fixée. Les structures des écoulements observées dans ces deux cas diffèrent donc considérablement. D'autres études seraient nécessaires pour mieux comprendre l'effet de l'allongement sur la convection thermosolutale de gaz binaires non dilués.

5.8 ANNEXES

5.8.1 Propriétés thermophysiques

Air et vapeur d'eau

Les propriétés de l'air sec et de la vapeur d'eau sont calculées en utilisant les équations proposées par Lide and Kehiaian (1994) [48], valables dans l'intervalle de température [273K, 600K]

- Viscosité dynamique :

$$\mu = A_1T + A_2T^2 + A_3T^3 + A_4T^4 \quad (kg \ m^{-1} \ s^{-1}) \quad (5.1)$$

	μ at 298.15 K	A_1	A_2	A_3	A_4
<i>Air sec</i>	$18.5 \ 10^{-6}$	$7.72488 \ 10^{-8}$	$-5.95238 \ 10^{-11}$	$2.71368 \ 10^{-14}$	— — —
<i>Vapeur d'eau</i>	$9.9 \ 10^{-6}$	$5.75100 \ 10^{-8}$	$-1.73637 \ 10^{-10}$	$3.90133 \ 10^{-13}$	$-2.69021 \ 10^{-16}$

TAB. 5.4 – Coefficients du polynôme représentant la viscosité dynamique.

- Conductivité thermique :

$$k = A_1T + A_2T^2 + A_3T^3 + A_4T^4 \quad (Wm^{-1}K^{-1}) \quad (5.2)$$

	k at 298.1 K	A_1	A_2	A_3	A_4
<i>Air sec</i>	$26.1 \ 10^{-3}$	$0.965 \ 10^{-4}$	$-9.960 \ 10^{-9}$	$-9.310 \ 10^{-11}$	$8.882 \ 10^{-14}$
<i>Vapeur d'eau</i>	$18.6 \ 10^{-3}$	$0.349 \ 10^{-4}$	$1.511 \ 10^{-7}$	$-2.576 \ 10^{-10}$	$2.050 \ 10^{-13}$

TAB. 5.5 – Coefficients du polynôme représentant la conductivité thermique.

- Capacité calorifique :

+ Air sec :

$$C_{p,a} = 1000.0 + 2.5 \ 10^{-7}T^3 \quad (JK^{-1}kg^{-1}) \quad (5.3)$$

+ Vapeur d'eau :

$$C_{p,v} = A_0 + A_1T + A_2T^2 + A_3T^3 \quad (JK^{-1}kg^{-1}) \quad (5.4)$$

- Chaleur latente de changement d'état de la vapeur d'eau à la température de paroi :

$$h_{lv} = 2.7554 \times 10^6 - 3.464T_w^2 \quad (J \ kg^{-1}) \quad (5.5)$$

- Pression de vapeur saturante :

$$P_{H_2O,sat} = 10^5 \ exp\left(18.79 - 0.0075T - \frac{5965.6}{T}\right) \quad (5.6)$$

	$C_{p,v}$ at 298.15K	A_0	A_1	A_2	A_3
Vapeur d'eau	1866.1	1877.8	-0.4417	$1.568 \cdot 10^{-3}$	$-7.286 \cdot 10^{-7}$

TAB. 5.6 – Coefficients du polynôme pour le calcul de la chaleur spécifique de la vapeur d'eau.

où T est en Kelvin et $P_{H_2O,sat}$ en Pa.

- Température de rosée correspondant à la pression de vapeur P_{H_2O}

$$T_d = 66.67(B - \sqrt{B^2 - 178.968}) \quad (5.7)$$

où $B = 18.79 - \ln(10^{-5}P_{H_2O})$, T en Kelvin et P_{H_2O} en Pa.

Mélange

- Humidité relative :

$$HR = \frac{P_v}{P_{v,sat}} = \frac{x_v \bar{P}}{P_{v,sat}} \quad (\%) \quad (5.8)$$

où x_v est la fraction molaire de vapeur déduite de la fraction massique par la relation

$$x_v = \frac{W_v}{W_v + M^*(1 - W_v)}$$

Les propriétés de l'air humide sont calculées en fonction de celles de l'air et de la vapeur d'eau en utilisant les relations suivantes données par Rao et al. [3].

- Viscosité dynamique :

$$\mu = \frac{(\sqrt{18}\mu_v x_v + \sqrt{29}\mu_a x_a)}{(\sqrt{18}x_v + \sqrt{29}x_a)} \quad (N \cdot s \cdot m^{-2}) \quad (5.9)$$

- Conductivité thermique :

$$k = \frac{x_v k_v}{(x_v + x_a A)} + \frac{x_a k_a}{(x_a + x_v A)} \quad (W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}) \quad (5.10)$$

où

$$A = \frac{[0.8876(1 + \sqrt{k_v/k_a})]^2}{3.6}$$

- Chaleur spécifique à pression constante :

$$C_p = (1 - W_v)C_{p,a} + W_v C_{p,v} \quad (J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}) \quad (5.11)$$

Comme la partie fluctuante de la pression motrice est supposée être très petite devant la pression thermodynamique (approximation faiblement compressible), le coefficient de diffusion de la vapeur d'eau dans l'air, D_{av} , est calculé par l'expression suivante en fonction de la pression thermodynamique \bar{P} et de la température locale T

$$D_{av} = \frac{1.87 \times 10^{-10} \times T^{2.072}}{\bar{P}} \quad (m^2 \cdot s^{-1}) \quad (5.12)$$

5.8.2 Tableaux

Grandeur	Ψ			T		
	0.5	1.0	2.0	0.5	1.0	2.0
A	6.69	11.9	23.5	345.4	347.3	348.6
	-6.69	-11.9	-23.5	341.7	341.7	341.7
10 s	7.06	12.4	22.0	325.8	327.3	329.6
	-7.06	-12.4	-22.0	325.0	325.0	325.0
30 s	6.45	11.0	18.2	302.2	303.1	304.1
	-6.45	-11.0	-18.2	300	300	300

TAB. 5.7 – Valeurs maximales et minimales de la fonction de courant et de la température à trois instants pour différents allongements (Fig. 5.26 à 5.28).

Grandeur	W			HR %		
	0.5	1.0	2.0	0.5	1.0	2.0
A	0.138	0.138	0.138	69	70	70
	0.138	0.138	0.138	60	55	52
10 s	0.119	0.125	0.130	114	114	114
	0.1	0.1	0.1	100	100	100
30 s	0.04	0.045	0.053	114	125	138
	0.03	0.03	0.03	100	100	100

TAB. 5.8 – Valeurs maximales et minimales de la fraction massique et de l'humidité relative à trois instants pour différents allongements (Fig. 5.26 à 5.28).

Conclusions et Perspectives

L'objectif de ce travail de thèse est d'apporter une contribution à la modélisation et la simulation numérique de la convection thermosolutale de mélanges binaires de gaz parfaits contenus dans des cavités. L'attention a été plus particulièrement focalisée sur la convection d'air humide en considérant des changements de phase surfaciques en régime périodique. Ainsi, un modèle relatif aux écoulements de convection naturelle avec transfert de matière et changement de phase a été proposé en se basant sur l'approximation de faible compressibilité (modèle à faible nombre de Mach). Un code de simulation des écoulements de gaz en régime instationnaire, laminaire ou de transition, a été élaboré afin de traiter les différents types de conditions aux limites et de conditions de références hydrostatiques analysés dans la deuxième partie du mémoire.

Le premier chapitre précise d'abord la démarche suivie dans la modélisation des écoulements purement thermiques dont les bases sont rappelées afin que le lecteur trouve l'origine de toutes les approximations qui ont été introduites, en particulier dans l'écriture de l'équation de l'énergie, écriture qui conditionne le traitement numérique du terme représentant le travail des forces de pression. Cette démarche est ensuite étendue au cas de la convection thermosolutale et une modélisation originale est proposée. Afin de ne pas trop alourdir la démonstration, certains calculs intermédiaires sont reportés dans les annexes qui complètent ce chapitre. On suggère aussi une formulation adimensionnelle du problème qui est applicable à toutes les configurations traitées dans ce mémoire.

Nous avons profondément modifié un code de calcul existant au laboratoire MSME (équipe TCM). Ce code, basé sur la méthode des volumes finis appliquée à des maillages structurés et décalés, avait fait la preuve de son efficacité pour résoudre des problèmes de convection naturelle ou mixte en régime instationnaire. Les approximations de Boussinesq et de propriétés physiques constantes étaient admises. Notre contribution au développement de ce code a été d'étendre la méthode numérique au traitement des équations de conservation écrites dans le cadre de l'approximation de faible compressibilité pour l'étude de la convection naturelle en cavité de mélanges binaires non dilués de gaz parfaits. Nous avons introduit des procédures de calculs des variations de toutes les propriétés physiques avec la température, la concentration et, si nécessaire, avec la pression thermodynamique dans le cas des lois de mélange. Enfin, nous avons implémenté un nouvel algorithme pour traiter plus efficacement le couplage vitesse-pression. La procédure suivie est présentée en détail dans le second chapitre qui comporte aussi plusieurs annexes donnant les éléments nécessaires à une reprogrammation complète de la méthode.

Le chapitre 3 porte sur la validation de l'outil et de l'approche numérique. Plusieurs problèmes classiques de convection naturelle (effet thermique ou thermosolutal) en cavité fermée ont été traités. Le modèle de Boussinesq et le modèle faiblement compressible

ont été considérés, en régime stationnaire ou en régime instationnaire. Les tests présentés dans ce chapitre sont parmi les plus significatifs que nous avons réalisés mais ils ne recouvrent qu'une petite partie des nombreuses comparaisons effectuées. Les comparaisons présentées dans ce chapitre montrent que nous sommes capables de retrouver des solutions de référence pour des problèmes "raides", en régime stationnaire comme en régime transitoire. Nous avons aussi montré que nos solutions sont en parfait accord avec celles fournies par un code commercialisé dans le cas de la convection thermique instationnaire à masse volumique variable. L'efficacité de l'algorithme utilisé pour traiter le couplage vitesse-pression est discuté en détail dans la dernière partie de ce chapitre.

La deuxième partie de cette thèse, constituée par les chapitres 4 et 5, est consacrée à l'étude de la convection thermosolutale induite par des gradients de température et de concentration.

L'influence des variations de masse volumique sur la convection thermosolutale générée dans une cavité verticale remplie par un mélange binaire de gaz parfaits est étudiée dans le chapitre 4. L'analyse est limitée au modèle usuel consistant à supposer que le gaz porteur (espèce "1") ne diffuse pas dans les parois. Un apport de matière de l'espèce "2" est créé sur la paroi chaude (évaporation d'un film d'eau, par exemple) alors que la paroi froide "aspire" l'espèce "2" (paroi poreuse sèche par exemple). Dans ces conditions, la masse volumique et la pression thermodynamique du mélange de gaz subissent des variations qui ne peuvent pas être correctement prédites en utilisant l'approximation de Boussinesq, sauf si le mélange est très dilué. L'emploi d'une formulation faiblement compressible montre d'abord que l'analogie transfert de chaleur - transfert de matière n'est pas satisfaite dans le cas de mélanges binaires non dilués. Elle montre ensuite que l'influence des variations de masse volumique est plus importante dans le cas de la diffusion d'un gaz plus léger que le gaz porteur. Enfin, lorsque les forces solutale et thermique sont de même intensité ($\epsilon_T = |\epsilon_m|$), les effets hors-Boussinesq sont beaucoup plus importants si les forces sont opposées que si elles sont dans le même sens.

Dans le chapitre 5, la condensation de vapeur d'eau ou l'évaporation d'un film d'eau liquide sur les parois d'une cavité fermée ont été étudiées en régime transitoire. Ces changements de phase surfaciques sont associés à la convection naturelle d'air humide se développant dans une cavité dont la température uniforme et égale des quatre parois varie au cours du temps. L'approximation "faiblement compressible" a été employée afin de tenir compte des variations de masse volumique dues aux variations de température et de la composition du mélange, assimilé à un gaz parfait avec le gaz porteur non condensable. Malgré les valeurs modérées des différences maximales de température, $\Delta T_{max} = 50 K$ autour de la température moyenne $\bar{T} = 325 K$, et de fraction massique de vapeur d'eau, $\Delta W_{max} < 0,15$, l'approximation de Boussinesq n'est pas applicable compte-tenu des variations temporelles importantes de la pression thermodynamique et de la masse volumique. Les variations de toutes les propriétés physiques avec la température, la concentration de vapeur et avec la pression ayant été prises en compte, la modélisation permet une extension à tout autre type de mélanges binaires, pourvu que le gaz porteur ne soit pas condensable. Les principales restrictions du modèle sont dues aux hypothèses d'écoulement laminaire et de non formation de brouillard, ce qui empêche de considérer de forts taux d'évaporation et de condensation. Ce modèle permet cependant de calculer à tout instant les épaisseurs des films d'eau sur la parois et de s'assurer que la masse totale de vapeur d'eau et d'eau liquide reste constante, que ce soit en période de condensation ou en période d'évaporation. En démarrant les calculs à partir d'un état thermodynamique bien défini, il a été montré

que l'état thermodynamique final, résultant de calculs élémentaires basés sur le premier principe et sur la loi des gaz parfaits, était obtenu avec une excellente précision, quel que soit le type de variation transitoire de la température des parois. Les analyses temporelles des solutions calculées pour un grand nombre de configurations ont en outre permis de dégager des explications physiques cohérentes.

Des calculs ont d'abord été effectués dans le cas de variations linéaires de la température des parois afin d'expliquer les différences entre les structures d'écoulement observées pendant la condensation ou pendant l'évaporation. Ces différences sont principalement causées par le changement de sens des forces thermique et solutale, agissant toujours en coopération dans le cas de l'air humide. On observe en particulier l'existence transitoire de deux cellules contra-rotatives (de type Rayleigh-Bénard) sous la paroi haute en période de condensation alors qu'elles se situent au dessus de la paroi basse en période d'évaporation. L'intensité des écoulements générés par ces cellules dépend, en particulier, de la vitesse de variation de la température des parois. Lorsque la température des parois évolue périodiquement, les grandeurs thermodynamiques globales (grandeurs intégrées sur le volume de la cavité) caractérisant la convection thermosolutale et le changement de phase oscillent autour de valeurs moyennes avec de faibles déphasages par rapport à la température des parois. Les flux massique et thermique pariétaux évoluent en suivant des lois périodiques très différentes. L'influence de l'allongement de la cavité, qui n'a été étudié qu'en période de condensation, s'avère beaucoup plus complexe que dans le cas de mélanges binaires dilués car, pour des conditions thermodynamiques initiales données (pression, température et fraction massique) la masse de vapeur varie avec l'allongement si l'une des dimensions de la cavité est fixée, ou bien le nombre de Froude varie avec l'allongement si la masse de vapeur est fixée. Les structures d'écoulement observées dans ces deux cas diffèrent donc considérablement.

Plusieurs extensions de ce travail sont envisageables :

- Les résultats discutés dans les chapitre 4 et 5 montrent que des études de stabilité des solutions devraient être conduites, notamment lorsque les forces solutales et thermiques sont opposées et en ce qui concerne l'influence de l'allongement sur les transitions vers des états instationnaires dans des cavités remplies d'air humide. Le code de calcul permet, en son état actuel, d'effectuer des calculs préliminaires.
- L'hypothèse de parois thermiquement minces restreint l'intérêt pratique des solutions obtenues. Des modifications en cours permettront de se soustraire de cette hypothèse en modélisant la conduction thermique instationnaire dans les parois.
- Les performances du code de calcul pourraient être sensiblement améliorées en reconsidérant les méthodes d'intégration temporelles et les méthodes de résolution des systèmes linéaires.

Les deux améliorations de la modélisation qui nous semblent être les plus intéressantes seraient :

- de permettre d'étudier la condensation sous l'effet d'une décompression rapide (principe de fonctionnement des chambres à condensation),
- de tenir compte des déformations des parois sous l'effet de variations de la pression thermodynamique (cavités à parois souples).

Ces deux problèmes nécessitent de recourir à des méthodes de suivi de frontières ou à des maillages adaptatifs et, pour le second, à une modélisation de couplages thermomécaniques. L'introduction d'un modèle de formation et d'évaporation de brouillard permettrait aussi d'élargir le champ d'étude.

Bibliographie

- [1] G. Accary, I. Raspo, P. Bontoux, B. Zappoli, Reverse transition to hydrodynamic stability through the Schwarzschild line in a supercritical fluid layer, *Physical Review E* 72 035301(R)(2005).
- [2] H.A. Barrios-Pina, Développement d'un code de calcul non Boussinesq dédié aux écoulements de gaz chauffé en convection naturelle, Thèse de doctorat en Mécanique et Physique des Fluides, Université Paul Cézanne Aix-Marseille III, (2010).
- [3] C. Béghein , F. Haghghat, F. Allard , Numerical Study of double-diffusive natural convection in a square cavity, *Int. J. Heat Mass Transfer* 35, 833-846, (1992).
- [4] A. Bejan, *Convection heat Transfer*, second edition, Wiley, (1996).
- [5] S. Ben Jabrallah, A. Belghith, J.P. Corriou, Etude des transferts couplés de matière et de chaleur dans une cavité rectangulaire : application à une cellule de distillation, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 45, 891-904, (2002).
- [6] S. Ben Jabrallah, A.S. Cherif, B. Dhifaoui, A. Belghith, J.P. Corriou, Experimental study of the evaporation of a falling film in a closed cavity, *Desalination* 180, 197-206, (2005).
- [7] S. Ben Jabrallah, A. Belghith, J.P. Corriou, Convective heat and mass transfer with evaporation of a falling film in a cavity, *Int. J. Thermal Sciences* 45, 16-28, (2006).
- [8] R. Bennacer, D. Gobin, Cooperating thermosolutal convection in enclosures -1- Scale analysis and mass transfer, *Int. J. Heat Mass Transfer* 39 (13), 2671-2681, (1996).
- [9] E. Blosch, W.Shyy and R.Smith, The Role of Mass Conservation in Pressure-Based Algorithm, *Numerical Heat Transfer B*, vol 24, 415-429, (1993).
- [10] J. Boussinesq, *Théorie analytique de chaleur*, volume 2, Gauthier Villars, Paris, (1903).
- [11] S. Chapman, T.G. Cowling, *Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, McGraw-Hill, New York (1958)
- [12] M.A. Christon, P.M. Gresho, S.B. Sutton, Computational predictibility of time-dependent natural convection flows in enclosures (including a benchmark solution),

Int. J. for Numerical Methods in Fluids 40, 953-980 (2002)

- [13] K. H. Chung, H.S. Kwak, J.M. Hyun, Finite-wall effect on buoyant convection in an enclosure with pulsating exterior surface temperature, *Int. J. Heat Mass Transfer* 44, 721-732 (2001).
- [14] V.A.F. Costa, Double diffusive natural convection in a square enclosure with heat and mass diffusive walls, *Int. J. Heat Mass Transfer* 40, 4061-4071, (1997).
- [15] R. Courant, K.O. Friedrichs, H. Lewy, Uber die partiellen differenzgleichungen der mathematischen physik, *Mathematische Annalen*. 100, 32-74 (1928)
- [16] M. Darbandi, S.F. Hosseinizadeh, Numerical study of natural convection in vertical enclosures using a novel non-Boussinesq algorithm, *Numerical Heat Transfer, Part A*, 52, 849-873 (2007).
- [17] A. Desrayaud, G. Lauriat, Flow reversal of laminar mixed convection in the entry region of symmetrically heated, vertical plate channels, *International Journal of Thermal Sciences*, 48 (11) (2009) 2036-2045.
- [18] L. Dufour, *Arch. Soc. Phys. et nat.* 45, 9 (1872)
- [19] K. Fahem, S. Ben Jabrallah, A. Belghith, J.P. Corriou, Numerical simulation of the behaviour of a distillation cell with influence of the characteristics of the heating wall, *Desalination* 201, 185-197, (2006).
- [20] J. Fröhlich, Résolution numérique des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach par méthode spectrales. Thèse de doctorat Sciences de l'Ingénieur, Université de Nice Sophia-Antipolis, (1990).
- [21] B. Gebhart, *Heat Transfer*, 2d ed., McGraw-Hill, New York, (1971)
- [22] B. Gebhart, Y. Jaluria, R.L. Mahajan, B. Sammakia, *Buoyancy-induced flows and transport*, reference ed., Hemisphere, New York, (1988).
- [23] D. Gobin, R. Bennacer, Cooperating thermosolutal convection in enclosures -1- Heat transfer and flow structure, *Int. J. Heat Mass Transfer* 39 (13), 2683-2697, (1996).
- [24] D. Gobin, R. Bennacer, Double diffusion in a vertical fluid layer - Onset of the convective regime, *Physics of Fluids* 6 (1), 59-67, (1994).
- [25] D. D. Gray et A. Giorgini, The validity of the Boussinesq approximation for liquids and gases. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 19 : 545-551, (1976).
- [26] D.W. Greenwell, B.L. Markham, F. Rosenberger, Numerical modeling of diffusive physical vapor transport in cylindrical ampoules, *Journal of Crystal Growth* 51, 413-425, (1981).

- [27] H. Han, T. H. Kuehn, Double diffusive natural convection in a vertical rectangular enclosure : 1 Experimental study, *Int. J. Heat Mass Transfer* 34, 449-459, (1991).
- [28] H. Han, T. H. Kuehn, Double diffusive natural convection in a vertical rectangular enclosure : 2 Numerical study, *Int. J. Heat Mass Transfer* 34, 461-471, (1991).
- [29] F.H. Harlow et J.E. Welch, Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface, *Phys. Fluids* 8, 2182 (1965)
- [30] T. Hayase, J.A.C Humphrey, R. Greif, A consistently formulated QUICK scheme for fast and stable convergence using finite-volume iterative calculation procedures, *Journal of Computational Physics* 98, 108-118, (1992).
- [31] D.Z. Jeng, C.S. Yang, C. Gau, Experimental and numerical study of transient natural convection due to mass transfer in inclined enclosures, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 52, 181-192, (2009)
- [32] H. Johnston et R. Krasny. Fourth-order finite difference simulation of the differentially heated cavity. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 40 : 1031-1037, (2002)
- [33] Y. Joshi et B. Gebhart, Effect of pressure stress work and viscous dissipation in some natural convection flow. *International Journal of Heat and Mass transfer*, 24 (10) : 1577-1588, (1981).
- [34] E.V. Kalabin, M.V. Kanashina, P.T. Zubkov, Natural-convective heat transfer in a square cavity with time-varying side-wall temperature, *Num. Heat Transfer, Part A*, 47, 621-631, (2005).
- [35] E.V. Kalabin, M.V. Kanashina, P.T. Zubkov, Heat transfer from the cold wall of a square cavity to the hot one by oscillatory natural-convection, *Num. Heat Transfer, Part A*, 47, 609-619, (2005).
- [36] Y. Kamotani, L. W. Wang, S. Ostrach, H.D. Jiang, Experimental study of natural convection in shallow enclosures with horizontal temperature and concentration gradients, *Int. J. Heat Mass Transfer* 28, 165-173, (1985).
- [37] N. Laaroussi, G. Lauriat, Conjugate thermosolutal convection and condensation of humid air in cavities, *Int. J. Thermal Sciences* 47(12), 1571-1586, (2008).
- [38] N. Laaroussi, G. Lauriat, Numerical simulation of natural convection and condensation of humid air in a partially divided square cavity, *Computational Thermal Sciences* 1, 461-488, (2009).
- [39] N. Laaroussi, Contribution à la simulation numérique des transferts de chaleur par conduction, rayonnement et convection thermosolutale dans des cavités, Thèse de doctorat, université Paris-Est, Marne-la-Vallée, (2008).

- [40] O. Laguerre, S. Benamara, D. Remy, D. Flick, Experimental and numerical study of heat and moisture transfers by natural convection in a cavity filled with solid obstacles, *Int. J. Heat Mass Transfer* 52 (12), 5691-5700, (2009).
- [41] P. Lascaux et R. Théodor, *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur*, Tome1, Masson (1985)
- [42] G. Lauriat et D. Gobin, *Convection naturelle : (I) Aspects théoriques*, *Les Techniques de l'Ingénieur*, AF4 – 080, 1-16 (2008).
- [43] G. Lauriat, *Transfert de Chaleur et de Matière*, cours polycopié, Master PCI, Université Paris-Est, Marne-la-Vallée, (2009).
- [44] G. Lauriat, *Contribution à la modélisation et à la simulation numérique de l'interaction entre la convection naturelle et le rayonnement thermique*, Thèse de doctorat ès Sciences, université P. et M. Curie (1981)
- [45] G. Lauriat, I. Altimir, A new formulation of the SADI method for the prediction of natural convection flows in cavities, *Computers & Fluids* 13(2), 141-155, (1985).
- [46] P. Le Quéré, C. Weisman, H. Paillère, J. Vierendeels, E. Dick, R. Becker, M. Braack and J. Locke, Numerical Simulation of Thermobuoyant Flow with Large Temperature Variation, *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, (ESAIM) vol 39, 609-621, (2005).
- [47] J. W. Lee, J. M. Hyun, Double-diffusive convection in a rectangle with opposing horizontal temperature and concentration gradients, *Int. J. Heat Mass Transfer* 33, 1619-1632, (1990).
- [48] D.R. Lide, H.V. Kehiaian, *CRC Handbook of thermophysical and thermochemical data*, CRC Press (1994).
- [49] T. F Lin, C.C. Huang, T.S. Chang, Transient binary mixture natural convection in square enclosures, *Int. J. Heat Mass Transfer* 33, 287-299, (1990).
- [50] T.F. Lin, T.F. Lin, C.J. Chang, W.M. Yan, Analysis of combined buoyancy effects of thermal and mass diffusion on laminar forced convection heat transfer in a vertical tube, *ASME J. Heat Transfer* 110, 337-344 (1988).
- [51] C. Ludwig, Diffusion zwischen ungleich erwärmten orten gleich zusammengesetzter lösungen, *Sitz. Ber. Akad. Wiss. Wien Math-Naturw Kl.* 20, 539, (1856).
- [52] B.L. Markham, F. Rosenberger, Diffusive-Convective vapor transport across horizontal and inclined rectangular enclosures, *Journal of Crystal Growth* 67, 241-254, (1984).
- [53] G.D. McBain, Natural convection with unsaturated humid air in vertical cavities, *Int. J. Heat Mass Transfer* 40, 3005-3012, (1997).

- [54] S. Mergui, D. Gobin, Transient double diffusive convection in a vertical enclosure with asymmetrical boundary conditions, *Trans. ASME, J. Heat Transfer*, 122(3), 598-602, (2000).
- [55] J.M. Mihaljan, A Rigorous Exposition of the Boussinesq Approximations Applicable to a Thin Layer of Fluid. *Astrophys, Jour.* 136, 1126, (1962).
- [56] Oberbeck, Über die Wärmeleitung der Flüssigkeiten bei Berücksichtigung der Strömungen infolge von Temperatur Differenzen, *Ann Phys. Chem.* 7, 271-292 (1879).
- [57] S. Paolucci, On the filtering of sound from the Navier-Stokes equations, Technical report, Sandia National Laboratory, SAND82-8257, (1982).
- [58] S. V. Patankar, *Numerical Heat and Fluid Flow*, London, Taylor & Francis, (1980).
- [59] S.V. Patankar et D.B. Spalding, A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows, *Int. J. Heat Mass Transfer* 15, 1787, (1972)
- [60] S. V. Patankar, A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations, *Num. Heat Transfer* 4, 409-425 (1981)
- [61] J. Patterson, J. Imberger, Unsteady natural convection in a rectangular cavity, *J. Fluid Mec* 122 (3)h. 100, 65-86 (1980).
- [62] M. Pavageau et C. Rey, Observation of volume variation effects in turbulent free convection. *International Journal of Heat and Mass transfer*, 45 : 181-192, (2002).
- [63] D.W. Peaceman et H.H. Rachford, The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations, *J. Soc. Indust. Applied Mathematics* 3, 28-41 (1955)
- [64] M. Pons, Les routes vers l'équilibre en convection naturelle - le travail des forces de pression. *Congrès Français de Thermique, Efficacité Energétique*, 1 : 75-80, (2009).
- [65] M. Pons et P. Le Quéré, An exemple of entropy balance in natural convection, Part 1 : the usual Boussinesq equations. *C.R.Mécanique*, 333 : 127-132, (2005)a.
- [66] M. Pons et P. Le Quéré, An exemple of entropy balance in natural convection, Part 2 : the thermodynamic Boussinesq equations. *C.R.Mécanique*, 333 : 133-138, (2005)b.
- [67] M. Pons et P. Le Quéré, Modeling natural convection with the work of pressure-forces, a thermodynamic necessity. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 17 (3) : 322-332, (2007).
- [68] C. Rey, Analyse des effets de la variation de volume des gaz dans les équations générales de bilan. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43 : 4311-4326, (2000)a.

- [69] B. Roux, J.C. Grondin, P. Bontoux, G. de Vahl Davis, Reverse transition from multicellular to monocellular motion in vertical fluid layer, PCH 80, Madrid, 1-6, (1980).
- [70] A.R. Rubel et F. Landis, Laminar Natural Convection in a Rectangular Enclosure with Moderately Large Temperature Differences. Heat Transfer, Publishers V.D.I., Dusseldorf, Paper NC2.10, P. 1, (1970).
- [71] Ch. Soret, Sur l'état d'équilibre que prend au point de vue de sa concentration une dissolution saline primitivement homogène dont deux parties sont portées à des températures différentes, Arch. Sci. Phys. Nat. 2, 48-61 (1879)
- [72] E.A. Spiegel, G. Veronis, On the Boussinesq approximation for a compressible fluid, Astrophys. J. 131, 442-447, (1960).
- [73] D.L. Sun, Z.G. Qu, Y.L. He, W.Q. Tao, An efficient segregated algorithm for incompressible fluid flow and heat transfer problems - IDEAL (Inner Doubly iterative Efficient Algorithm for Linked equations). - Part 1 : Mathematical formulation and solution procedure, Numerical Heat Transfer, Part B 53,1-17 (2008).
- [74] D.L. Sun, Z.G. Qu, Y.L. He, W.Q. Tao, An efficient segregated algorithm for incompressible fluid flow and heat transfer problems - IDEAL (Inner Doubly iterative Efficient Algorithm for Linked equations). - Part 2 : Application examples, Numerical Heat Transfer, Part B 53, 18-38 (2008) .
- [75] D.L. Sun, Z.G. Qu, Y.L. He, W.Q. Tao, Performance analysis of IDEAL algorithm for three-dimensional incompressible fluid flow and heat transfer problems, Int. J. for Numerical Methods in Fluids 61, 1132-1160 (2009).
- [76] D.L. Sun, Y.P. Yang, J.L. Xu, W.Q. Tao, Performance analysis of IDEAL algorithm combined with Bi-CGSTAB method, Numerical Heat Transfer, Part B 56, 411-431 (2009).
- [77] O. Touazi, E. Chenier, R. Eymard, Simulation of natural convection with the collocated clustered finite volume scheme, Computers and Fluids, 37, 1138-1147 (2008).
- [78] J. Vierendeels, B. Merci, E. Dick, Numerical study of natural convective heat transfer with large temperature differences, Int. J. Numerical Methods for Heat and Fluid Flows 11(4),329-341 (2001).
- [79] R. Viskanta, T.L. Bergman, F.P. Incropera, Double-Diffusive Natural Convection,. In Natural Convection : Fundamentals and Applications (Edited by S. Kakaç, W. Aung and R. Viskanta), 1075-1099, Hemisphere, Washington, DC (1985).
- [80] G. Wang, Q-W ; Wang, M. Zeng, H. Ozoe, Natural convection heat transfer in an inclined porous cavity under time-periodic boundary conditions with positive/negative

inclined angles, *J. Porous Media* 11(6), 541-555, (2008).

- [81] J.A. Weaver, R. Viskanta, Natural convection due to horizontal temperature and concentration gradients - 1. Variable thermophysical properties effects, *Int. J. Heat Mass Transfer* 34 (12), 3107-3120, (1991).
- [82] J.A. Weaver, R. Viskanta, Natural convection due to horizontal temperature and concentration gradients - 2. Species interdiffusion, Soret and Dufour effects, *Int. J. Heat Mass Transfer* 34 (12), 3121-3133, (1991).
- [83] J.A. Weaver, R. Viskanta, Natural convection in binary gases due to horizontal thermal and solutal gradients, *ASME J. Heat Transfer* 113, 140-147, (1991).
- [84] H. K. Wee, R. B. Keey, M. J. Cunningham, Heat and moisture transfer by natural convection in a rectangular cavity, *Int. J. Heat Mass Transfer* 32, 1765-1778, (1989).
- [85] S. Xin et P. Le Quéré. An extended Chebyshev pseudo-spectral benchmark for the 8 :1 differentially heated cavity. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 40 : 981-998, (2002)
- [86] W.M. Yan, T.F. Lin, C.J. Chang, Combined heat and mass transfer in natural convection between vertical parallel plates, *Wärme und Stoffübertragung*, 23, 69-76 (1988).

PUBLICATIONS

- [1] SUN H., LAURIAT G., *On the heat and mass transfer analogy for natural convection of non-dilute binary mixture of ideal gases in cavities*, Comptes Rendus Mécanique, 337(3), 141-149 (2009).
- [2] SUN H., LAURIAT G., SUN D.L., TAO W.Q., *Transient double-diffusive convection in an enclosure with large density variations*, International Journal of Heat and Mass Transfer, 53(2), 615-625 (2010).
- [3] SUN H., LAURIAT G., *A numerical study based on a weakly-compressible formulation for thermosolutal convection in vertical cavities*, Heat and Mass Transfer, 46, 495-508 (2010).
- [4] SUN H., LAURIAT G., NICOLAS X., *Natural convection and wall condensation or evaporation in humid air-filled cavities subjected to wall temperature variations*, International Journal of Thermal Sciences, THESCI-D-10-00168, accepted.
- [5] SUN H., CHÉNIER E., LAURIAT G., *Effect of surface radiation on the breakdown of steady natural convection flows in a square, air-filled cavity containing a centered inner body*, Applied Thermal Engineering, ATE-2010-351, accepted.

COMMUNICATIONS

- [6] SUN H., NICOLAS X., SOMMERER Y., *Caractérisation de modèle URANS pour la simulation des écoulements turbulents et des transferts thermiques autour d'un cylindre chauffé de section carrée*, Congrès Français de Thermique, Toulouse, 3-6 juin 2008, pp 79-84.
- [7] SUN H., LAURIAT G., *Transient thermosolutal natural convection in cavities : effects of initial conditions and density variations*, Int. Symp. on Convective Heat and Mass Transfer in Sustainable Energy (Conv-09), April 26 - May 1, Tunisia, paper 147, 15p, 2009.
- [8] SUN H., LAURIAT G., NICOLAS X., *Transient evaporation of liquid water films and condensation of humid air at the isothermal wall of a square cavity*, IHTC 14, Washington D.C., 8-12/2010, n° 22467, 6 pages(CDROM).
- [9] SUN H., LAURIAT G., CHÉNIER E., *Combined surface radiation and natural convection in a square cavity partially filled with a centered square body*, 7th Intern. Conf. on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, HEFAT 2010, Antalya, Turquie, paper 817, 6 pages (CD-ROM), 2010.

Table des figures

1.1	Représentation schématique de la cavité et système de coordonnées.	27
2.1	Volume de contrôle de la méthode des volumes finis.	52
2.2	Position du point de coordonnée s_k sur les parois de la cavité.	62
2.3	Schéma de résolution du modèle faible Mach.	66
2.4	Organigramme de l'algorithme IDEAL	70
2.5	Maillage décalé	74
2.6	Maillage des quantités scalaires	75
2.7	Maillage pour la composante horizontale de vitesse	75
2.8	Maillage pour la composante verticale de vitesse	76
2.9	Organigramme de l'algorithme SIMPLE	82
2.10	Organigramme de l'algorithme SIMPLER	84
3.1	Schéma de la cavité différentiellement chauffée ($A = 1$)	88
3.2	Comparaison de l'évolution de la pression thermodynamique dans le cas $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$	90
3.3	Comparaisons entre les évolutions du nombre de Nusselt dans le cas $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$	91
3.4	Comparaisons des champs de température (traits pleins pour notre code et traits en pointillés pour Fluent) aux instants $\tau = 0,05$ (gauche) et $\tau = 0,1$ (droite) pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$	91
3.5	Comparaisons des champs des composantes horizontale et verticale de la vitesse (traits pleins pour notre code et traits en pointillés pour Fluent) à l'instant $\tau = 0,05$ pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$	92
3.6	Comparaisons des champs des composantes horizontale et verticale de la vitesse (traits pleins pour notre code et traits en pointillés pour Fluent) à l'instant $\tau = 0,1$ pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$	92
3.7	Comparaisons entre les profils de température dans les plans médians (horizontal et vertical) à l'état stationnaire pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$	93
3.8	Comparaison entre les profils des composantes de vitesse dans les plans médians (horizontal et vertical) à l'état stationnaire	93
3.9	Comparaison entre les profils des nombres de Nusselt locaux sur les deux parois verticales à l'état stationnaire pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$	94
3.10	Comparaison entre les profils des composantes de vitesse dans les plans médians (horizontal et vertical) à l'état stationnaire avec ceux de Darbandi et al. (2007) [16] dans le cas $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$	95
3.11	Comparaisons des profils des nombres de Nusselt locaux sur les deux parois verticales avec ceux de Darbandi et al. (2007) [16] dans le cas $Ra = 10^6$, $Pr = 0,71$ et $\epsilon_T = 1,2$	96

3.12	Convergence de la discrétisation spatiale sur des maillages uniformes ou variables pour $Ra = 10^6$ ($N = N_x = N_y$ compris entre $N = 64$ et $N = 512$).	97
3.13	Géométrie de la cavité différentiellement chauffée d'allongement $A = 8$	98
3.14	Evolution de la température au point 1 pour le maillage 68×132	100
3.15	Evolution de la température au point 1 pour le maillage 100×260	100
3.16	Champs moyens de fonction de courant, température, vitesse horizontale et pression statique dans le cas $Ra = 3,4 \cdot 10^5$, $Pr = 0,71$ et $A = 8$ traité dans le cadre de l'approximation de Boussinesq.	102
3.17	Schéma de la cavité dans le cas de la convection thermosolutale.	102
3.18	Influence du pas de temps sur l'évolution de la masse volumique du mélange pour le cas 3 reporté dans le tableau 3.10	104
3.19	Influence du pas de temps sur l'erreur absolue commise dans le calcul de la masse volumique adimensionnelle en régime stationnaire ($\rho^*(\infty)_{exacte} = 2,5$)	105
3.20	Influence du pas de temps sur les évolutions du nombre de Nusselt moyen sur la paroi chaude et de la pression thermodynamique.	107
3.21	Influence de la valeur du critère de convergence de la deuxième boucle d'IDEAL sur l'évolution du nombre de Nusselt moyen sur la paroi chaude.	109
3.22	Evolution du nombre d'itérations de la première boucle de l'algorithme IDEAL ($A = 1$, $Pr = 0,71$, $Ra = 10^7$, $\epsilon_T = 1,2$, propriétés physiques variables).	110
3.23	Evolution du nombre d'itérations de la deuxième boucle de l'algorithme IDEAL ($A = 1$, $Pr = 0,71$, $Ra = 10^7$, $\epsilon_T = 1,2$, propriétés physiques variables).	110
3.24	Evolution du nombre total d'itérations de l'algorithme IDEAL ($A = 1$, $Pr = 0,71$, $Ra = 10^7$, $\epsilon_T = 1,2$, propriétés physiques variables).	111
4.1	Représentation schématique de la cavité et système de coordonnées.	118
4.2	Variations transitoires des nombres de Nusselt moyens sur les parois chaude et froide selon la valeur de ϵ_T en convection purement thermique ($A = 1$, $Pr = 0.71$, $\gamma = 1.4$, $\theta_0 = 0$). (a) $Ra_T = 10^6$, (b) $Ra_T = 10^7$	125
4.3	Variations transitoires des nombres de Sherwood moyens sur les parois chaude et froide selon la valeur de ϵ_m en convection purement solutale ($A = 1$, $M^* = 0.6$, $Sc = 0.71$, $W_{2,0}^* = 0.$, $\Delta W_2 = 0.33$ for $\epsilon_m = 0.2$ and $\Delta W_2 = 0.75$ for $\epsilon_m = 0.4$). (a) $Ra_m = 10^6$, (b) $Ra_m = 10^7$	126
4.4	Comparaison de θ (lignes en traits pleins) et W_2^* (lignes en traits pointillés) pour le cas 4 dans les tableaux 4.4 à 4.9 : (a) $Ra = 10^3$, (b) $Ra = 10^6$, (c) $Ra = 10^7$	129
4.5	<u>Convection solutale</u> : Dépendance du nombre de Sherwood moyen avec le rapport des masses molaires selon les conditions initiales et comparaison avec la solution basée sur l'approximation de Boussinesq ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Le = 1$, $Sc = 0.71$, $\Delta W_2 = 0.1$).	130
4.6	<u>Convection solutale</u> : Lignes de courant et iso-fractions massiques a) $M^* = 0.1$ b) $M^* = 10$ ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Le = 1$, $Sc = 0.71$, $\Delta W_2 = 0.1$, $W_{2,0}^* = -0.5$).	131
4.7	Profils des vitesses d'injection et d'aspiration le long des parois verticales ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Le = 1$, $Sc = 0.71$, $\Delta W_2 = 0.1$, $W_{2,0}^* = -0.5$) a) $M^* = 0.1$ b) $M^* = 10$	132
4.8	Profils de vitesses verticales dans les plans horizontaux $y^* = 0,25, 0,5$ et $0,75$ ($A = 1$, $Fr = 10^{-7}$, $Le = 1$, $Sc = 0.71$, $\Delta W_2 = 0.1$, $W_{2,0}^* = -0.5$) a) $M^* = 0.1$ b) $M^* = 10$	132

4.9	Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime stationnaire dans le cas : $A = 1, Fr = 10^{-7}, Pr = 0.71, Le = 1, M^* = 0.25, C_w = 13.0$ or $\Delta W_2 = 0.074, \theta_0 = W_{2,0}^* = -0.5, \epsilon_m = \epsilon_T = 0.2, \gamma = 1.4$	133
4.10	Distributions stationnaires des nombres de Nusselt et de Sherwood ainsi que de leurs composantes advective et diffusive le long des parois chaude (a) et froide (b) dans le cas : $A = 1, Fr = 10^{-7}, Pr = 0.71, Le = 1, M^* = 0.25, C_w = 13.0$ or $\Delta W_2 = 0.074, \theta_0 = W_{2,0}^* = -0.5, \epsilon_m = \epsilon_T = 0.2, \gamma = 1.4$	134
4.11	Lignes de courant (a), isothermes and iso-fractions massiques (b) en régime stationnaire : solutions basées sur l'approximation de Boussinesq lorsque les forces solutales et thermiques sont opposées et en tenant compte des vitesses massiques le long des parois verticales ($A = 1, Ra_T = 2.187 \times 10^6, Ra_m = -2.187 \times 10^6, Pr = 0.71, Le = 1, M^* = 2, x_{2,h} = 0.364, x_{2,c} = 0.0, \theta_0 = \eta_0 = -0.5, \epsilon_T = 0.2, \epsilon_m = -0.2, \gamma = 1.4$	135
4.12	Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime stationnaire dans le cas : $A = 1, Fr = 10^{-7}, Pr = 0.71, Le = 1, M^* = 4, C_w = 3.625$ or $\Delta W_2 = 0.242, \theta_0 = W_{2,0}^* = -0.5, \epsilon_T = 0.2, \epsilon_m = -0.2, \gamma = 1.4$	136
4.13	Distributions stationnaires des nombres de Nusselt et de Sherwood ainsi que de leurs composantes advective et diffusive le long des parois chaude (a) et froide (b) dans le cas : $A = 1, Fr = 10^{-7}, Pr = 0.71, Le = 1, M^* = 4, C_w = 3.625$ or $\Delta W_2 = 0.242, \theta_0 = W_{2,0}^* = -0.5, \epsilon_T = 0.2, \epsilon_m = -0.2, \gamma = 1.4$	136
4.14	Variations des nombres de Nusselt et de Sherwood locaux le long de la paroi gauche pour $Le = 0.5$ and $Le = 2.0$ ($A = 1, Fr = 10^{-7}, Pr = 0.71, M^* = 0.25, x_{2,h} = 0.074, x_{2,c} = 0.0, \theta_0 = \eta_0 = -0.5, \epsilon_T = \epsilon_m = 0.2, \gamma = 1.4$).	139
4.15	Isothermes pour $Le = 0.5$ et $Le = 2.0$ ($A = 1, Fr = 10^{-7}, Pr = 0.71, M^* = 0.25, x_{2,h} = 0.074, x_{2,c} = 0.0, \theta_0 = \eta_0 = -0.5, \epsilon_T = \epsilon_m = 0.2, \gamma = 1.4$).	139
4.16	Iso-fractions massiques pour $Le = 0.5$ et $Le = 2.0$ ($A = 1, Fr = 10^{-7}, Pr = 0.71, M^* = 0.25, x_{2,h} = 0.074, x_{2,c} = 0.0, \theta_0 = \eta_0 = -0.5, \epsilon_T = \epsilon_m = 0.2, \gamma = 1.4$).	140
4.17	Variations du nombre de Nusselt moyen avec l'allongement pour différents nombres de Rayleigh (convection thermique, approximation de Boussinesq, $Pr = 0.71$, simulations effectuées avec notre code).	141
4.18	$A = 0,5$: Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime permanent lorsque les forces solutale et thermique agissent dans le <u>même sens</u> ($Fr = 10^{-7}, Pr = 0.71, Le = 1.0, M^* = 0.5, x_{2,h} = 0.222, x_{2,c} = 0.0, \theta_0 = \eta_0 = -0.5, \epsilon_T = 0.2, \epsilon_m = 0.2, \gamma = 1.4$).	142
4.19	$A = 2$: Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime permanent lorsque les forces solutale et thermique agissent dans le <u>même sens</u> ($Fr = 10^{-7}, Pr = 0.71, Le = 1.0, M^* = 0.5, x_{2,h} = 0.222, x_{2,c} = 0.0, \theta_0 = \eta_0 = -0.5, \epsilon_T = 0.2, \epsilon_m = 0.2, \gamma = 1.4$).	143
4.20	$A = 0,5$: Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime permanent lorsque les forces solutale et thermique agissent <u>en sens opposés</u> ($Fr = 10^{-7}, Pr = 0.71, Le = 1.0, M^* = 2, x_{2,h} = 0.364, x_{2,c} = 0.0, \theta_0 = \eta_0 = -0.5, \epsilon_T = 0.2, \epsilon_m = -0.2, \gamma = 1.4$).	144

4.21	$A = 2$: Tracés instantannés d'un écoulement chaotique. Lignes de courant (a), comparaisons entre les isothermes (traits pleins) et les iso-fractions massiques (lignes en pointillés) (b) et iso-masses volumiques (c) en régime permanent lorsque les forces solutale et thermique agissent <u>en sens opposés</u> ($Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1.0$, $M^* = 2$, $x_{2,h} = 0.364$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = 0.2$, $\epsilon_m = -0.2$, $\gamma = 1.4$).	144
4.22	$A = 2$: Variation temporelle du nombre de Sherwood moyen sur la paroi chaude ($Fr = 10^{-7}$, $Pr = 0.71$, $Le = 1.0$, $M^* = 2$, $x_{2,h} = 0.364$, $x_{2,c} = 0.0$, $\theta_0 = \eta_0 = -0.5$, $\epsilon_T = 0.2$, $\epsilon_m = -0.2$, $\gamma = 1.4$).	145
5.1	Représentation simplifiée de la physique de la condensation	152
5.2	Schéma de la cavité rectangulaire, système de coordonnées et conditions aux limites thermiques.	156
5.3	Algorithme de calcul de la masse condensée ou évaporée sur les parois.	160
5.4	Position du point de coordonnée s_k sur les parois de la cavité.	161
5.5	Evolution de la masse volumique moyenne de l'air humide en fonction du maillage.	163
5.6	Evolution du nombre de Sherwood moyen selon le maillage.	163
5.7	Représentations des évolutions de la température des parois dans le cas de l'évaporation (gauche) ou de l'évaporation (droite).	165
5.8	<i>Evaporation</i> : Evolutions de la température moyenne de l'air humide (a) et de la masse volumique (b) pour les quatre cas considérés (Fig. 5.7). Les symboles en cercle gras correspondent à la valeur de la masse volumique à l'instant où $\bar{T} = 325 K$	166
5.9	<i>Evaporation</i> : iso-contours d'humidité relative à l'instant correspondant au maximum d'humidité relative lorsque la température des parois chute brutalement (Fig. 5.7).	167
5.10	<i>Evaporation</i> : Variations temporelles des composantes advectives et diffuses des nombres de Nusselt et de Sherwood (Eqs. 5.38 et 5.42) le long des parois verticales pour $\delta t = 20 s$ et $\delta t = 120 s$	169
5.11	<i>Evaporation</i> : lignes de courant [ψ_{min} (4) ψ_{max}], isothermes en Kelvin [T_{min} (1K) T_{max}], iso-fraction massique [W_{min} (0.002) W_{max}] et iso-humidité relative [RH_{min} (2%) RH_{max}] lorsque la température moyenne est égale à $\bar{T} = 325 K$ et selon la durée de l'augmentation de température des parois. (a) $\delta t = 20 s$, (b) $\delta t = 60 s$, (c) $\delta t = 120 s$	170
5.12	<i>Condensation</i> : Evolutions de la température moyenne de l'air humide (a) et de la masse volumique (b) pour les quatre cas considérés (Fig. 5.7 b).	171
5.13	<i>Condensation</i> : lignes de courant [ψ_{min} (4) ψ_{max}], isothermes en Kelvin [T_{min} (0,5K) T_{max}], iso-fraction massique [W_{min} (0.005) W_{max}] et iso-humidité relative [RH_{min} (2%) RH_{max}] lorsque la température moyenne est égale à $\bar{T} = 325 K$ et selon la durée de l'augmentation de température des parois. (a) $\delta t = 20 s$, (b) $\delta t = 60 s$, (c) $\delta t = 120 s$,	172
5.14	<i>Condensation</i> : profils des épaisseurs des films liquides le long des parois en régime permanent $\delta t = 120s$	173
5.15	<i>Condensation</i> : evolutions of the mean Sherwood components along the vertical walls for $\delta t = 20 s$ and $\delta t = 120 s$	173
5.16	Evolutions périodiques de la température des parois et de la température moyenne de l'air humide.	175
5.17	Evolutions de la pression thermodynamique et de la masse volumique adimensionnelles.	176

5.18	Variations des composantes du nombre de Nusselt moyen sur les parois verticales.	176
5.19	Lignes de courant $[\psi_{min} (1) \psi_{max}]$, isothermes en Kelvin $[T_{min} (1K) T_{max}]$, iso-fraction massique $[W_{min} (0.01) W_{max}]$ et iso-humidité relative $[RH_{min} (0,05\%) RH_{max}]$ à quatre instants au cours d'une période (a) $t = t_0$, (b) $t = t_1$, (c) $t = t_2$, (d) $t = t_3$	179
5.20	Variations de l'épaisseur du film liquide sur la paroi supérieure aux instants t_0 à t_3 (Fig. 5.19a à 5.19d)	180
5.21	Variations de l'épaisseur du film liquide sur les parois verticales aux instants t_0 à t_3 (Fig. 5.19a à 5.19d)	180
5.22	Variations de l'épaisseur du film liquide sur la paroi inférieure aux instants t_0 à t_3 (Fig. 5.19a à 5.19d)	181
5.23	Evolutions des masses d'eau liquide sur les parois et de vapeur d'eau au cours d'une période.	181
5.24	Evolutions de la masse d'eau condensée sur les quatre parois pour les allongements $A = 0,5, 1$ et 2 (largeur de la cavité : $L = 0,1 m$. t_d et t_∞ correspondent au début et à la fin du régime de diffusion.	183
5.25	<i>Largeur de la cavité constante</i> : Evolution de quantités caractéristiques au cours du refroidissement des parois pour différents allongements. (a) Pression thermodynamique réduite, (b) différence maximale de fraction massique de vapeur d'eau, (c) fonction de courant maximale, (d) différence maximale de température.	185
5.26	<i>Largeur de la cavité constante</i> : $\mathbf{A} = \mathbf{0,5}$: lignes de courant $[\psi_{min} (4) \psi_{max}]$, isothermes en Kelvin $[T_{min} (0,5K) T_{max}]$, iso-fraction massique $[W_{min} (0.005) W_{max}]$ et iso-humidité relative $[HR_{min} (2\%) HR_{max}]$ (a) $t = 10 s$, (b) $t = 30 s$, (c) $t = 60 s$	186
5.27	<i>Largeur de la cavité constante</i> : $\mathbf{A} = \mathbf{1}$: lignes de courant $[\psi_{min} (4) \psi_{max}]$, isothermes en Kelvin $[T_{min} (0,5K) T_{max}]$, iso-fraction massique $[W_{min} (0.005) W_{max}]$ et iso-humidité relative $[HR_{min} (2\%) HR_{max}]$ (a) $t = 10 s$, (b) $t = 30 s$, (c) $t = 60 s$	187
5.28	<i>Largeur de la cavité constante</i> : $\mathbf{A} = \mathbf{2}$: lignes de courant $[\psi_{min} (4) \psi_{max}]$, isothermes en Kelvin $[T_{min} (0,5K) T_{max}]$, iso-fraction massique $[W_{min} (0.005) W_{max}]$ et iso-humidité relative $[HR_{min} (2\%) HR_{max}]$ (a) $t = 10 s$, (b) $t = 30 s$, (c) $t = 60 s$	188
5.29	Evolutions de la masse d'eau condensée sur les quatre parois pour des allongements $0,25 \leq A \leq 4$ lorsque le volume de la cavité est maintenu constant ($\Omega = 10^{-2} m^3/m$).	189
5.30	Epaisseur du film d'eau sur la paroi supérieure en régime stationnaire pour $0,25 \leq A \leq 4$ lorsque le volume de la cavité est maintenu constant ($\Omega = 10^{-2} m^3/m$).	190

Liste des tableaux

2.1	Coefficients et termes de source des équations du modèle "faible Mach" . . .	51
2.2	Coefficients et termes de source du modèle "Boussinesq"	52
2.3	Coefficients des équations discrétisées spatialement.	54
2.4	Coefficients des équations discrétisées spatialement.	55
2.5	Coordonnées des points des maillages décalés en fonction de x_i et y_j	74
3.1	Grandeurs dimensionnelles introduites dans le calcul Fluent pour obtenir $Ra_T = 10^6$, $Pr = 0.71$, et $\epsilon_T = 1.2$ (Propriétés physiques constantes)	88
3.2	Paramètres de calcul avec Fluent pour $Ra_T = 10^6$, $Pr = 0, 71$ et $\epsilon_T = 1.2$.	89
3.3	Paramètres numériques utilisés dans notre code pour la comparaison avec Fluent dans le cas $Ra_T = 10^6$, $Pr = 0, 71$, et $\epsilon_T = 1, 2$	90
3.4	Comparaison entre la pression thermodynamique et les nombres de Nusselt moyens pour $Ra = 10^6$, $Pr = 0, 71$ et $\epsilon_T = 1, 2$	93
3.5	Comparaisons entre nos résultats (maillage uniforme) et ceux de Vierendeels et al. (2001) [78] en convection purement thermique et en supposant les propriétés physiques constantes ($A = 1$, $Pr = 0, 71$, $Ra_T = 10^6$, $\epsilon_T = 1, 2$, $\gamma = 1, 4$, $\theta_0 = 0$.)	95
3.6	Comparaisons entre nos résultats (maillage non uniforme) et ceux de Vierendeels et al. (2001) [78] et d'Accary et Raspo (2006) [1] à propriétés physiques constantes pour $A = 1$, $Pr = 0, 71$, $Ra_T = 10^6$, $\epsilon_T = 1, 2$, $\gamma = 1, 4$, $\theta_0 = 0$	96
3.7	Comparaisons entre nos résultats et ceux de Vierendeels et al. (2001) [46] en convection thermique faiblement compressible, conductivité et viscosité dynamique dépendant de la température selon la loi de Sutherland. Cas $A = 1$, $Pr = 0, 71$, $Ra_T = 10^6$, $\epsilon_T = 1, 2$, $\gamma = 1, 4$, $\theta_0 = 0$	97
3.8	Comparaisons entre nos résultats et ceux de Vierendeels et al. (2001) [46] en convection thermique faiblement compressible, conductivité et viscosité dynamique dépendant de la température selon la loi de Sutherland. Cas $A = 1$, $Pr = 0, 71$, $Ra_T = 10^7$, $\epsilon_T = 1, 2$, $\gamma = 1, 4$, $\theta_0 = 0$	98
3.9	Comparaisons des solutions au point 1 dans le cas $Ra = 3, 4 \cdot 10^5$, $Pr = 0.71$ et $A = 8$	101
3.10	Comparaisons entre les valeurs stationnaires de la masse volumique et de la pression thermodynamique avec la solution exacte basée sur la loi des gaz parfaits (équation 3.9). Les autres paramètres utilisés dans les simulations numériques sont : $A = 1$, $Le = 1$, $Pr = 1$, $M^* = 2$, $\gamma = 1, 4$, $\theta_0 = -0, 5$, $W_{2,0}^* = -0, 5$. Les calculs sont effectués avec un pas de temps adimensionnel initial $\Delta\tau_0 = 10^{-6}$	103
3.11	Comparaison des solutions stationnaires obtenues avec les algorithmes SIMPLER et IDEAL. Les temps de calcul sont reportés dans les colonnes 3 et 4. Les tirés signifient que la solution ne converge pas.	107

3.12	Influence du pas de temps (ou du CFL à l'instant $\tau = 0, 1$) sur la pression thermodynamique et sur les nombres de Nusselt moyens sur les parois chaude ($X^* = 0$) et froide ($X^* = 1$) à l'instant $\tau = 0, 1$	108
4.1	Convection thermique : influence des conditions initiales sur la solution stationnaire ($A = 1, Fr = 0,4225 \cdot 10^{-6}, Pr = 0,71, \epsilon_T = 0,3, \gamma = 1,4$).	122
4.2	Convection solutale : influence des conditions initiales sur la solution stationnaire ($A = 1, Fr = 0,4225 \cdot 10^{-6}, Sc = 0,71, \epsilon_m = 0,3, C_W = 1,387$ ou $M^* = 0,6, W_{2,h} = 0,53$ et $W_{2,c} = 0,0$).	123
4.3	Convection thermosolutale : influence des conditions initiales sur la solution stationnaire ($A = 1, Fr = 10^{-7}, Pr = 0,71, Le = 1, \epsilon_T = 0,2, \epsilon_m = -0,2, M^* = 4, W_{2,h} = 0,242, W_{2,c} = 0,0, \gamma = 1,4$).	123
4.4	Nombre de Nusselt et pression thermodynamique en régime stationnaire selon la valeur de ϵ_T ($A = 1, Pr = 0,71, Ra_T = 10^3$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-3} \epsilon_T, \gamma = 1,4, \theta_0 = 0$).	124
4.5	Nombre de Sherwood, pression thermodynamique, masse volumique moyenne et flux massique aux parois en régime stationnaire pour différentes valeurs de ϵ_m ($A = 1, M^* = 0,6, Ra_m = 10^3$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-3} \epsilon_m, Sc = 0,71, W_{2,0}^* = 0$). Cas 1 : $\epsilon_m = 0,1, C_w = 5,83$, cas 2 : $\epsilon_m = 0,2, C_w = 2,5$, cas 3 : $\epsilon_m = 0,3, C_w = 1,39$, cas 4 : $\epsilon_m = 0,4, C_w = 0,83$	124
4.6	Nombre de Nusselt et pression thermodynamique en régime stationnaire selon la valeur de ϵ_T ($A = 1, Pr = 0,71, Ra_T = 10^6$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-6} \epsilon_T, \gamma = 1,4, \theta_0 = 0$).	127
4.7	Nombre de Sherwood, pression thermodynamique, masse volumique moyenne et flux massique aux parois en régime stationnaire pour différentes valeurs de ϵ_m ($A = 1, M^* = 0,6, Ra_m = 10^6$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-6} \epsilon_m, Sc = 0,71, W_{2,0}^* = 0$). Cas 1 : $\epsilon_m = 0,1, C_w = 5,83$, cas 2 : $\epsilon_m = 0,2, C_w = 2,5$, cas 3 : $\epsilon_m = 0,3, C_w = 1,39$, cas 4 : $\epsilon_m = 0,4, C_w = 0,83$	127
4.8	Nombre de Nusselt et pression thermodynamique en régime stationnaire selon la valeur de ϵ_T ($A = 1, Pr = 0,71, Ra_T = 10^7$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-7} \epsilon_T, \gamma = 1,4, \theta_0 = 0$).	127
4.9	Nombre de Sherwood, pression thermodynamique, masse volumique moyenne et flux massique aux parois en régime stationnaire pour différentes valeurs de ϵ_m ($A = 1, M^* = 0,6, Ra_m = 10^7$ ou $Fr = 1,408 \cdot 10^{-7} \epsilon_m, Sc = 0,71, W_{2,0}^* = 0$). Cas 1 : $\epsilon_m = 0,1, C_w = 5,83$, cas 2 : $\epsilon_m = 0,2, C_w = 2,5$, cas 3 : $\epsilon_m = 0,3, C_w = 1,39$, cas 4 : $\epsilon_m = 0,4, C_w = 0,83$	128
4.10	Grandeurs adimensionnelles moyennes en régime stationnaire pour deux valeurs du rapport des masses molaires ($A = 1, Fr = 10^{-7}, Le = 1, Pr = 0,71, \epsilon_T = 0,2, \gamma = 1,4, \theta_0 = W_0^* = -0,5, W_{2,c} = 0, W_{2,h} = 0,074$ si $M^* = 0,25$ et $W_{2,h} = 0,242$ si $M^* = 4$).	134
4.11	Grandeurs moyennes en régime stationnaire pour quatre valeurs de la masse molaire réduite ($A = 1, Fr = 10^{-7}, Pr = 0,71, Le = 1, \epsilon_T = 0,2, \gamma = 1,4, C_w = 9,5, W_{2,h} = 0,1, W_{2,c} = 0,0, \theta_0 = \eta_0 = -0,5$).	137
4.12	Grandeurs moyennes en régime stationnaire pour différents nombres de Lewis ($A = 1, Fr = 10^{-7}, Pr = 0,71, M^* = 0,25, W_{2,h} = 0,074, W_{2,c} = 0,0, C_w = 13,01, \epsilon_T = \epsilon_m = 0,2, \gamma = 1,4, \theta_0 = W_{2,0}^* = -0,5$).	138
4.13	Grandeurs moyennes pour différents allongements ($Fr = 10^{-7}, Pr = 0,71, Le = 1, \epsilon_T = 0,2, \gamma = 1,4, \theta_0 = W_{2,0}^* = -0,5, W_{2,h} = 0,222, W_{2,c} = 0,0$ pour $M^* = 0,5$, et $W_{2,h} = 0,364, W_{2,c} = 0,0$ pour $M^* = 2$).	142

5.1	Propriétés thermophysiques de l'air humide correspondant aux quatre états thermodynamique initiaux ou finaux.	166
5.2	Comparaisons entre des quantités moyennes obtenues pour des propriétés thermophysiques constantes ou variables.	174
5.3	Masse d'eau liquide condensée sur chacune des parois (en g/m) selon le rapport de forme.	190
5.4	Coefficients du polynôme représentant la viscosité dynamique.	192
5.5	Coefficients du polynôme représentant la conductivité thermique.	192
5.6	Coefficients du polynôme pour le calcul de la chaleur spécifique de la vapeur d'eau.	193
5.7	Valeurs maximales et minimales de la fonction de courant et de la température à trois instants pour différents allongements (Fig. 5.26 à 5.28).	194
5.8	Valeurs maximales et minimales de la fraction massique et de l'humidité relative à trois instants pour différents allongements (Fig. 5.26 à 5.28).	194

Modélisation et simulation numérique de la convection naturelle dans des mélanges binaires de gaz parfaits contenus dans des cavités. Application à la condensation ou à l'évaporation surfaciques.

L'objectif de ce mémoire est d'apporter une contribution à la modélisation et la simulation numérique de la convection thermosolutale de mélanges binaires de gaz parfaits contenus dans des cavités. Un modèle a été élaboré en se basant sur l'approximation de faible compressibilité. Le premier chapitre précise la démarche suivie dans la modélisation et une formulation originale en est déduite afin de traiter les différents types de conditions aux limites et de conditions de références hydrostatiques analysés dans le mémoire. Les variations de masse volumique sont déduites de la loi des gaz parfaits et la pression thermodynamique est calculée à partir de la conservation de la masse totale. La méthode numérique repose sur la méthode des volumes finis mise en œuvre sur des maillages décalés. Le couplage vitesse-pression est traité par un nouvel algorithme dont l'efficacité est discutée en détail. La démarche numérique est validée via des comparaisons avec des solutions de références, en régime stationnaire comme en régime transitoire pour des écoulements transitionnels. Dans la seconde partie du mémoire, on considère d'abord la convection thermosolutale dans une cavité rectangulaire verticale dans le cas où les écoulements sont induits par des gradients horizontaux de température et de concentration. On discute en particulier les limites de l'approximation d'extrême dilution. La condensation de vapeur d'eau et l'évaporation d'un film d'eau liquide sur les parois d'une cavité sont ensuite étudiées en régime transitoire. Ces changements de phase surfaciques sont associés à la convection naturelle dans une cavité dont les températures des quatre parois varient au cours du temps.

Mots clefs : Convection thermosolutale, modèle faiblement compressible, simulation numérique, écoulements en cavité rectangulaire, condensation, évaporation.

Modeling and numerical simulation of natural convection of ideal gas mixtures enclosed in cavities. Applications to surface condensation or evaporation.

The aim of this dissertation is at modeling and numerically simulating thermosolutal convection within cavities filled by binary gas mixtures of ideal gases. A new problem formulation, based on the weakly compressible approximation, has been derived in order to account for the changes in density as well as thermodynamic pressure. The ideal gas law and global conservation of mass are invoked for the predictions of density field and thermodynamic pressure. The first part of the manuscript is devoted to the mathematical derivation of the governing equations and boundary conditions, numerical procedure implemented and, checks of the accuracy of the results through deeply comparisons with updated benchmark solutions. The emphasis is put on the efficiency of algorithm used for solving the pressure-velocity coupling for unsteady, transitional flow regimes. Thermosolutal convection without phase changes at the cavity surfaces is first considered in the second part of the manuscript. We investigated the case of vertical cavities with horizontal gradients of concentration and temperature. The results clearly show that the dilute approximation fails to be valid as soon as the maximum concentration difference exceeds a critical value function of the flow parameters. Surface condensation of water vapor or evaporation of liquid water film in vertical cavities is then considered. The specific thermal boundary conditions of uniform but time-varying temperatures of the four walls are considered. Periodic variations of the flow, temperature and relative humidity fields are discussed in detail. The evolutions of thicknesses of the water film over the four walls are also predicted.

Keywords: Thermosolutal convection, weakly compressible formulation, numerical simulation, fluid flows in rectangular cavities, condensation, evaporation.