



**HAL**  
open science

# Mélange et transferts thermiques en écoulements laminaires et leur modélisation.

Kamal El Omari

► **To cite this version:**

| Kamal El Omari. Mélange et transferts thermiques en écoulements laminaires et leur modélisation..  
| Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2011. tel-00651878

**HAL Id: tel-00651878**

**<https://theses.hal.science/tel-00651878>**

Submitted on 14 Dec 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.

---

# Mélange et Transferts Thermiques

en Écoulements Laminaires  
et leur Modélisation

KAMAL EL OMARI

Mémoire présenté pour l'obtention de  
**l'Habilitation à Diriger des Recherches**

Université de Pau et des Pays de l'Adour

**2011**



---

# Table des matières

<b>Préambule et présentation du document</b>	<b>7</b>
<b>I. Curriculum Vitae et synthèse d'activités</b>	<b>9</b>
I.1. Curriculum Vitae	9
I.1.1. Etat civil	9
I.1.2. Expérience professionnelle	10
I.1.3. Diplômes	10
I.1.4. Compétences informatiques	10
I.2. Activités pédagogiques	11
I.2.1. Module « Résistance des matériaux »	11
I.2.2. Module « Transferts thermiques »	12
I.2.3. Module « Machines frigorifiques et thermiques »	12
I.2.4. Module « Mécanique des fluides et aéraulique »	12
I.2.5. Module « Mathématiques »	13
I.2.6. Module « Programmation et calcul numérique »	13
I.2.7. Autres activités pédagogiques	13
I.3. Responsabilités collectives	13
I.4. Activités de recherche	14
I.4.1. Positionnement au sein du laboratoire d'accueil	14
I.4.2. Résumé des travaux de recherche	14
I.4.3. Production scientifique	18
I.4.4. Encadrement des travaux de recherche	22
I.4.5. Contrats de recherche et financements	23
I.4.6. Rayonnement	24
I.4.7. Congé pour recherche en 2012 (CRCT)	25
<b>II. Modélisation des écoulements incompressibles et des transferts</b>	<b>27</b>
II.1. Introduction	27
II.2. Modèle physique	28
II.2.1. Prise en compte du comportement rhéologique du fluide	29
II.2.2. Conditions aux limites	29
II.3. Schémas numériques	30
II.4. Modélisation du changement de phase solide-liquide	32
II.5. Implémentation parallèle	35
II.6. Perspectives	35
<b>III. Mélange chaotique thermique</b>	<b>37</b>
III.1. Introduction	37
III.1.1. Le mélange	37

III.1.2. Le mélange par advection chaotique . . . . .	38
III.1.3. Le mélange chaotique thermique . . . . .	39
III.2. Mélange chaotique thermique en géométrie fermée . . . . .	40
III.2.1. Mélangeur modèle : mélangeur à deux barreaux . . . . .	40
III.2.2. Conditions d'écoulement . . . . .	41
III.2.3. Indicateurs de qualité de mélange . . . . .	44
III.3. Quelques résultats pour l'écoulement de référence . . . . .	45
III.3.1. Effet du protocole d'agitation . . . . .	45
III.3.2. Topologies instationnaires de l'écoulement et mécanismes du mélange . . . . .	45
III.3.3. Effets de la configuration de l'écoulement et de la taille de la période . . . . .	48
III.3.4. PDF de la température et motifs autosimilaires . . . . .	48
III.3.5. Flux thermique imposé comme condition aux limites . . . . .	51
III.4. Mélange thermique de fluides non newtoniens . . . . .	52
III.4.1. Évolution des indicateurs statistiques de la température . . . . .	53
III.4.2. Motifs de l'écoulement de fluides non newtoniens . . . . .	53
III.5. Mélange de fluides à viscosité thermodépendante . . . . .	56
III.6. Conclusion et perspectives . . . . .	58
<b>IV. Emulsification laminaire</b>	<b>61</b>
IV.1. Introduction . . . . .	61
IV.2. Études préliminaires : émulsionneur à un barreau et application pétrolière . . . . .	62
IV.2.1. Matériel et propriétés . . . . .	62
IV.2.2. Quelques résultats . . . . .	63
IV.3. Émulsionneur batch à deux barreaux . . . . .	65
IV.3.1. Matériel et méthode de mesure . . . . .	65
IV.3.2. Quelques résultats . . . . .	67
IV.4. Intensification du procédé : l'émulsionneur continu . . . . .	71
IV.4.1. Description . . . . .	71
IV.4.2. Quelques résultats . . . . .	72
IV.5. Propriétés thermiques des émulsions très concentrées . . . . .	73
IV.5.1. Méthodologie . . . . .	73
IV.5.2. Quelques résultats marquants . . . . .	73
IV.6. Perspectives . . . . .	75
<b>V. Changement de phase liquide-solide et convection</b>	<b>77</b>
V.1. Étude de la convection autour d'un nodule sphérique contenant un Matériau à Changement de Phase au cours de sa cristallisation . . . . .	77
V.2. Fusion contrôlée par convection naturelle pour le refroidissement pariétal . . . . .	79
V.2.1. Introduction . . . . .	80
V.2.2. Systèmes étudiés . . . . .	80
V.2.3. Conditions d'écoulement et propriétés du MCP . . . . .	81
V.2.4. Résultats . . . . .	82
V.2.5. Conclusion . . . . .	84
V.3. Transport d'énergie par coulis stabilisés . . . . .	85
V.3.1. Fluide frigoporteur chargé de billes remplies de matériau à changement de phase . . . . .	85
V.3.2. Convection forcée dans une suspension de MCP microencapsulé surfondu . . . . .	86
V.4. Projet en cours : modélisation du comportement thermique d'un mur à inclusion de MCP . . . . .	88

<b>VI. Autres travaux</b>	<b>91</b>
VI.1. Écoulements à effets thermocapillaires . . . . .	91
VI.1.1. Simulation de la convection de Bénard-Marangoni dans des récipients cylindriques . . . . .	92
VI.1.2. Effets thermocapillaires sur la convection mixte en canal ouvert . . . . .	97
VI.2. Suivi thermique d'un front de polymérisation pour un procédé gel . . . . .	101
VI.2.1. Introduction . . . . .	101
VI.2.2. Matériel et procédure expérimentale . . . . .	101
VI.2.3. Résultats expérimentaux . . . . .	102
VI.2.4. Modèle thermique numérique . . . . .	103
VI.2.5. Analyse chromatographique du gel formé . . . . .	104
VI.2.6. Conclusion . . . . .	105
VI.3. Aérodynamique, turbulence et aéro-élasticité . . . . .	105
VI.3.1. Écoulement turbulent autour d'un dirigeable générique avec un grand angle d'incidence . . . . .	106
VI.3.2. Couplage aéro-élastique entre l'écoulement et une coque flexible . . . . .	107
<b>VII Projet de recherche</b>	<b>113</b>
VII.1. Écoulements avec interfaces . . . . .	113
VII.2. Mélange chaotique . . . . .	114
VII.3. Emulsification laminaire et changement de phase . . . . .	114
<b>Bibliographie</b>	<b>123</b>
<b>Annexes</b>	<b>123</b>
<b>A. Quelques exemples de validations du code Tamaris</b>	<b>125</b>
A.1. Écoulements en cavités entraînées . . . . .	125
A.1.1. Fluide newtonien en cavité carrée . . . . .	125
A.1.2. Fluide newtonien en cavité polaire . . . . .	126
A.1.3. Fluide non newtonien en cavité carrée . . . . .	126
A.1.4. Convection naturelle entre un cylindre et une cavité carrée . . . . .	127
A.1.5. Fusion de l'étain en cavité, couplée à la convection naturelle . . . . .	127
A.1.6. Écoulement de convection mixte Poiseuille-Rayleigh-Bénard . . . . .	129
A.1.7. Écoulements thermocapillaires en cavité 2D . . . . .	129
A.1.8. Écoulements thermocapillaires en cavité 3D . . . . .	130
<b>B. Sélection de publications</b>	<b>133</b>



---

# *Préambule et présentation du document*

Dans ce mémoire, je retrace mon parcours en tant que Maître de Conférences depuis 2005. Mes diverses activités de recherche se situent dans le domaine de la mécanique des fluides et des transferts. Si l'approche dominante dans ces recherches est la modélisation et la simulation numérique, je me suis toujours associé à mes collègues expérimentateurs pour mener des études pour lesquelles l'expérimentation est l'approche la plus pertinente. En effet, dans ma démarche de chercheur, j'ai toujours souhaité contribuer à résoudre des problèmes scientifiques et technologiques issus pour la plupart de préoccupations industrielles ou se situant directement en amont de celles-ci.

La principale thématique que j'ai abordée est celle du mélange laminaire. Que ce soit pour l'agitation chaotique ou pour l'émulsification, j'essaye à travers mes travaux, de promouvoir ce mode de mélange sobre, pour encourager son usage industriel. Une seconde thématique concerne les changements de phase liquide-solide, principalement en présence d'un écoulement. L'application principale concerne le contrôle de la température de parois et le transport d'énergie par chaleur latente. Aujourd'hui, ces thématiques d'émulsification laminaire et de changement de phase se rejoignent dans un nouveau projet pour la conception de nouveaux matériaux pour l'isolation thermique active.

Ce document comporte six chapitres. Le premier présente mon Curriculum Vitae, donne une synthèse de mes activités d'enseignement et effectue un bilan de mes activités de recherche (publications, encadrements, projets de recherche ...). Il présente également les résumés de mes principales thématiques de recherche actuelles. Dans les chapitres suivants, je détaille mes travaux de recherche, en montrant leur originalité et leurs principaux résultats.

Ainsi, le chapitre II présente les modèles et méthodes numériques utilisés dans le code de mécanique des fluides numérique que je développe. Cet outil de modélisation est utilisé dans une bonne partie de mes travaux.

Le chapitre III synthétise les différentes études que j'ai menées sur le mélange thermique par advection chaotique. En considérant un mélangeur modèle, ces études ont montré les particularités du mélange thermique pour des fluides de différents comportements rhéologiques et l'influence de facteurs tels que le mode d'agitation ou le mode de chauffage sur la qualité du mélange.

Dans le chapitre IV, j'expose les études qui ont concerné l'émulsification laminaire. Ce procédé basse énergie permet de réaliser des émulsions très concentrées huile dans eau. Son fonctionnement initialement en cuve a été étendu avec succès vers un fonctionnement continu. La cristallisation et les propriétés thermiques de ses émulsions ont été également étudiées.

Le chapitre V traite d'études relatives au changement de phase liquide-solide, depuis celle qui a concerné, pendant mon doctorat, le stockage d'énergie par chaleur latente, à mes études plus

récentes, sur le contrôle de la température de dispositifs dissipant un flux thermique, ou encore sur le transport d'énergie par des microencapsulations de matériaux à changement de phase.

Le chapitre VI regroupe quatre études achevées ou ayant démarré récemment. Je présente ainsi, en premier lieu deux études récentes de modélisation des écoulements avec effet thermo-capillaire, au sein de fluides dans un récipient ou en écoulement forcé dans un canal horizontal. L'étude suivante concerne le suivi thermique de la polymérisation frontale. Enfin, je présente rapidement mon ancienne activité postdoctorale. Celle-ci porte sur les écoulements turbulents autour d'un dirigeable modèle et sur le couplage fluide-structure.

Pour finir, j'esquisse mon projet personnel de recherche pour les prochaines années.

---

---

# CHAPITRE I

---

## *Curriculum Vitae et synthèse d'activités*

### I.1. Curriculum Vitae

#### I.1.1. Etat civil

Nom :	El Omari
Prénom :	Kamal
Age :	37 ans
Nationalité :	franco-marocaine
Situation familiale :	marié, sans enfant
Situation professionnelle :	Maître de Conférences
Établissement de rattachement :	IUT des Pays de l'Adour Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA)
Adresses professionnelles :	IUT des Pays de l'Adour, Dépt. Génie Thermique et Energie, 1 Av. de l'Université - 64000 Pau. Tél. : (33) 5 59 40 71 47 Fax : (33) 5 59 40 71 60
	<hr/>
	Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur Appliquées à la Mécanique et au génie Electrique (SIAME), EA 4581. Fédération de recherche CNRS IPRA, FR 2952. Bât. d'Alembert, rue Jules Ferry, 64075 Pau Tél. (33) 5 40 17 51 22
Courrier électronique :	kamal.elomari@univ-pau.fr
Site web professionnel :	<a href="http://www.univ-pau.fr/~omari">http://www.univ-pau.fr/~omari</a>

### I.1.2. Expérience professionnelle

<b>Septembre 2004 à aujourd'hui</b>	Maître de Conférences au département Génie Thermique et Énergie de l'IUT de Pau à Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA). Membre du Laboratoire de Thermique, Énergétique et Procédés (LaTEP) de 2004 à 2010, et du laboratoire des Sciences de l'Ingénieur Appliquées à la Mécanique et au génie Électrique (SIAME) depuis 2011.
<b>2002/2004</b>	Post-Doctorat à l'Université de Pau, Projet Régional/FEDER : « développement de dirigeables gros porteurs, simulation numérique en aérodynamique et aéro-élasticité » (18 mois).
<b>1999/2001</b>	Attaché Temporaire à l'Enseignement et à la Recherche, Université de Pau et des Pays de l'Adour.

### I.1.3. Diplômes

<b>2002 :</b>	Qualifié pour les fonctions de Maître de Conférences en 62 <sup>ème</sup> section.
<b>2001 :</b>	Doctorat de l'Université de Pau : « <i>Étude de la convection autour d'un nodule contenant un matériau à changement de phase au cours de sa cristallisation</i> », soutenue le 18 décembre 2001. Mention : Très honorable. <i>Jury :</i>
	<hr/>
	E. Arquis            Professeur, ENSCPB, Talence (Rapporteur).
	J.P. Bédécarrats    Maître de Conférences, UPPA.
	J.P. Dumas           Professeur , UPPA.
	D. Gobin             Directeur de Recherche CNRS, FAST, Université de Paris-Sud.
	M. Lacroix           Professeur, Université de Sherbrooke, Canada (Rapporteur).
	M. Mory              Professeur, UPPA.
	<hr/>
	Le travail de recherche relatif à cette thèse est détaillé à la section V.1.
<b>1997 :</b>	DEA d'Énergétique, Transferts et Systèmes Dispersés, Université de Pau.
<b>1996 :</b>	Maîtrise en Mécanique des Fluides et Transferts à l'Université de Fès, Maroc.

### I.1.4. Compétences informatiques

- Maîtrise de logiciels de mécanique des fluides : Fluent, OpenFoam, Aero3D (INRIA).
- Maîtrise de mailleurs : Simail, Gambit, Gmsh.
- Post-traitement : Paraview, gnuplot.
- Programmation Objet en C++, Java et maîtrise des langages C et Fortran.
- Programmation parallèle avec MPI et Petsc.
- Systèmes d'exploitation : Linux et Windows.
- Maîtrise du traitement de texte  $\text{\LaTeX}$  et des suites bureautiques MSOffice et OpenOffice.

## I.2. Activités pédagogiques

Après une première expérience d'enseignant en tant qu'Attaché Temporaire à l'Enseignement et à la Recherche (ATER) à l'UPPA, je suis actuellement Maître de Conférences au département Génie Thermique et Énergie (GTE) de l'IUT des Pays de l'Adour de l'UPPA. C'est un département très dynamique, avec une équipe pédagogique (enseignants et personnel administratif et technique) très soudée. J'ai donc un réel plaisir à enseigner et à participer au fonctionnement de ce département. Il s'agit d'un département technologique où les Travaux Pratiques (TP), les projets et les stages ont une part importante et où l'interaction avec les étudiants est permanente. Durant l'année universitaire 2007/2008, j'ai pris en charge la direction des études de la première année du DUT<sup>1</sup>. J'ai apprécié les échanges que j'ai eus avec les différents intervenants internes et externes sur les aspects pédagogiques et organisationnels. J'ai eu également à assumer la gestion de l'emploi du temps de 3 groupes de Travaux Dirigés (TD) et de 5 groupes de TP, en plus d'un groupe de Cours Magistral (CM). Cette tâche s'est révélée être un vrai défi au quotidien au vu d'un programme pédagogique dense.

Après mon arrivée au département en septembre 2004, celui-ci a connu plusieurs départs et arrivées d'enseignants. Avec d'autres collègues, j'ai contribué à assurer les modules restés vacants. Par conséquent, j'ai plusieurs fois changé de disciplines et eu à préparer de nouveaux cours, TD et TP, pour des matières très variées. Si cette variété s'est avérée consommatrice de temps, elle n'en a pas moins été très enrichissante et enthousiasmante.

Ci-dessous je détaille mes activités pédagogiques en tant que Maître de Conférences au département GTE pour le DUT et la Licence Professionnelle (LP) « Énergie et génie climatique ».

### I.2.1. Module « Résistance des matériaux »

- Public :** DUT, Semestre 2.  
**Volume :** 20 h CM ; 60 h TD (de 2004 à aujourd'hui).  
**Objectifs\* :** Familiarisation avec les notions de contraintes et déformations dans un solide et application aux calculs des déformations de solides dans plusieurs situations de chargement.
- Contenu :**
- Calcul d'équilibre statique à l'aide des torseurs.
  - Liaisons mécaniques.
  - État de contrainte et de déformation dans un solide sollicité. Loi de comportement.
  - Déformations simples (extension, compression, torsion ...).
  - Flexion plane simple.

---

\*Objectifs pour les étudiants.

---

1. Diplôme Universitaire Technologique.

### I.2.2. Module « Transferts thermiques »

- Public :** DUT, Semestre 3.
- Volume :** Conduction instationnaire : 10 h CM ; 20 h TD (de 2007 à aujourd'hui).  
Convection : 10 h CM ; 20 h TD (2007).
- Objectifs :** Être capable d'estimer les échanges ou déperditions thermiques dans diverses situations. Savoir déterminer les paramètres pertinents de la configuration étudiée et choisir la corrélation ou la méthode de calcul la plus adaptée.
- Contenu :**
- Conduction instationnaire en corps minces, milieux infinis, cylindre ...
  - Solutions analytiques mono et multidimensionnelles.
  - Convection forcée et naturelle autour de plaques planes, sphères ...

### I.2.3. Module « Machines frigorifiques et thermiques »

Ce module contient 6 manipulations de TP. Selon les années, j'ai assuré ce module en totalité ou j'ai encadré des étudiants vacataires qui en ont assuré une partie. J'ai fait également évoluer progressivement ce module en y intégrant de nouvelles manipulations : pile à combustible, éolienne et machine frigorifique à air.

- Public :** DUT, Semestre 3.
- Volume :** 60 à 120 h TP (de 2004 à aujourd'hui).
- Objectifs :** Familiarisation avec les bilans énergétiques et les notions d'efficacité d'une machine. Initiation à la technologie des machines frigorifiques et à l'identification des pannes.
- Contenu :** Pile à combustible, éolienne, machines frigorifiques à circuits d'eau ou à air, diagnostique de pannes.

### I.2.4. Module « Mécanique des fluides et aéraulique »

- Public :** Licence Professionnelle
- Volume :** 12 h CM ; 14 h TD (de 2008 à aujourd'hui).
- Objectifs :** Maîtrise du calcul des efforts subis par les parois immergées. Calcul des pertes de charge en conduites. Dimensionnement des circuits, pompes et ventilateurs.
- Contenu :**
- Statique des fluides.
  - Relation de Bernoulli généralisée.
  - Méthodes de calcul des circuits hydrauliques.
  - Pompes et ventilateurs.

### I.2.5. Module « Mathématiques »

- Public :** DUT, Semestre 2.  
**Volume :** 90 h TD (de 2008 à 2009).  
**Objectifs :** Maîtrise des outils mathématiques à l'usage du physicien.  
**Contenu :**
- Fonctions à plusieurs variables.
  - Différentiation, intégration.
  - Calcul vectoriel.
  - Calcul matriciel.

### I.2.6. Module « Programmation et calcul numérique »

- Public :** DUT, Semestre 2 et 3.  
**Volume :** 24 h TD ; 60 h TP (de 2005 à 2007).  
**Objectifs :** Formation à la programmation procédurale en langage C et au calcul numérique.  
**Contenu :**
- Notions de variables, boucles, fonctions ...
  - Algorithme et méthodes numérique.
  - Zéros de fonctions (Newton-Raphson, sécante et point fixe).
  - Intégration : méthodes du point milieu, des trapèzes et de Simpson.
  - Interpolation : polynômes de Lagrange et de Tchebychev.
  - Résolution numérique de l'équation de la chaleur.

### I.2.7. Autres activités pédagogiques

J'ai eu l'occasion d'encadrer des projets d'étudiants (groupes de 4) se déroulant le long de la seconde année du DUT. Les projets que j'ai proposés ont concerné la simulation numérique des transferts thermiques ainsi que la réalisation et l'amélioration d'une maquette expérimentale d'une tour/cheminée solaire. J'ai participé aussi à la mise en place d'une nouvelle manipulation en TP de mécanique des fluides (module que je n'assume pas), reposant sur l'utilisation du code Tamaris que je développe (cf. chapitre II). En outre, chaque année je suis deux étudiants durant leurs stages de fin d'étude en entreprise (conseil à l'étudiant, prise de contact avec le maître de stage ou visite sur place, évaluation du rapport ...). Je préside également une journée de jurys de soutenances de stages.

Je continue à être un enseignant passionné et enthousiaste, en essayant toujours de trouver un bon équilibre entre activités pédagogiques et préoccupations de recherche scientifique.

## I.3. Responsabilités collectives

- Directeur des études première année au département IUT GTE pour l'année scolaire 2007/08 : gestion des emplois du temps hebdomadaires, des enseignements, des notes, des relations avec les enseignants titulaires et vacataires et avec les étudiants.

- Membre du conseil de laboratoire LaTEP (2007-2010).

## I.4. Activités de recherche

### I.4.1. Positionnement au sein du laboratoire d'accueil

En 2004, j'ai intégré l'équipe « Énergétique et transferts » de mon ancien laboratoire d'accueil, le Laboratoire de Thermique, Énergétique et Procédés (LaTEP), en tant que Maître de Conférences. Quelques années plus tard, je me suis associé à une partie de mes collègues pour former un axe transversal du LaTEP « Écoulements et Transferts », afin de donner plus de visibilité à nos compétences dans ce domaine. Lors des grandes restructurations du paysage de la recherche dans l'UPPA, j'ai adhéré au projet de création du nouveau laboratoire des Sciences de l'Ingénieur Appliquées à la Mécanique et au génie Électrique (SIAME). Je me suis impliqué activement dans l'élaboration de ce projet qui comporte une composante mécanique forte. Le laboratoire SIAME a été labellisé équipe d'accueil (EA 4581) à partir du 1er janvier 2011. Je suis membre à 100 % de l'axe « Transports Multiphasiques » (TM) de l'équipe « Mécanique » du SIAME.

Mes activités de recherche sont au coeur des thématiques définies dans le contrat quadriennal pour l'axe TM, comme la thématique du mélange et de l'émulsification laminaires (cf. chap. III et IV) et celle des écoulements avec changement de phase (cf. chap. V). En outre, mes actions futures renforceront ces thématiques. Je fais référence notamment au projet de recherche du CRCT<sup>2</sup> que j'ai obtenu pour la modélisation des écoulements multiphasiques (cf. section I.4.7), ou encore à la nouvelle thèse que je co-dirige à partir de la rentrée 2011, dont le sujet concerne la modélisation des écoulements de fluides complexes avec changement de phase solide-liquide.

Par ailleurs, mes préoccupations autour de la modélisation numérique des écoulements et des transferts sont partagées au sein du laboratoire par les axes « Modélisation Aérodynamique et transferts » et « Interactions Vagues Structures ». La simulation numérique est aussi une composante importante de l'activité de recherche des axes « Géomatériaux et Structures » et « Décharge et Modélisation ». Cette préoccupation commune facilite la mutualisation des compétences, expériences et moyens.

### I.4.2. Résumé des travaux de recherche

Je présente ici un résumé de mes principales thématiques de recherche actuelles. Un exposé plus détaillé de mes activités de recherche actuelles et passées est dressé le long des chapitres suivants. Aujourd'hui, mon activité de recherche concerne principalement la modélisation des écoulements incompressibles avec des applications pour le mélange chaotique, l'émulsification laminaire et les transferts thermiques avec changement de phase liquide-solide. A la suite de chaque résumé sont listés les numéros des publications concernées.

#### Modélisation des écoulements incompressibles et des transferts

J'entreprends depuis 2005 le développement d'un solveur numérique parallèle de mécanique des fluides qui résout les équations tridimensionnelles (3D) de conservation de la masse, de la

---

2. Congé pour Recherche ou Conversion Thématique. J'ai obtenu un congé de 6 mois pour le second semestre 2012.

quantité de mouvement et de l'énergie. Ce code, que j'ai baptisé Tamaris, utilise la méthode des volumes finis non structurés à maillage hybride pouvant contenir différents types de cellules de calcul (hexaèdres, tétraèdres, prismes et pyramides), ce qui permet une grande flexibilité pour les géométries étudiées. Ce code a les propriétés suivantes :

- Transferts thermiques : convection forcée et naturelle, effets thermocapillaires, transferts conjugués (conduction dans les solides).
- Fluides incompressibles newtoniens ou newtoniens généralisés.
- Changement de phase liquide-solide.
- Géométries 2D ou 3D.
- Formulation instationnaire implicite du second ordre de précision.
- Schémas spatiaux convectifs et diffusifs précis au second ordre.
- Couplage vitesse-pression par l'algorithme SIMPLE.
- Parallélisation (MPI) par décomposition de domaine sans chevauchement.
- Solveurs linéaires de la bibliothèque Petsc : BiCGStab, GMRES, AMG, ...
- Programmation orientée objet (langage C++).

La modélisation des écoulements et des transferts intervient dans la majorité de mes thématiques de recherche et de ce fait le code Tamaris est utilisé principalement dans les études entreprises dans le cadre des thématiques du mélange chaotique (cf. chap. III), des changements de phase (cf. section V.2) et des écoulements thermocapillaires (cf. section VI.1). Concernant cette dernière thématique, deux thèses s'appuyant sur ce code sont en cours. L'évolution future du code s'orientera vers l'implémentation de méthodes d'interfaces diffuses, pour les écoulements diphasiques (congé CRCT) ou pour la solidification de fluides complexes (nouvelle thèse qui démarre à la rentrée 2011).

**Publications concernées :** [A12, A9, A8, A4, A11, A12, C11, C10, C9, C8, CN16, CN15, CN13, CN11, CN10, CN8, CN6] (voir liste I.4.3)

### Mélange chaotique thermique

L'étude du mélange d'un ou de plusieurs fluides avec ou sans transfert de chaleur est toujours d'un grand intérêt pour les industriels, surtout lorsqu'il s'agit de fluides très visqueux et/ou très délicats pour lesquels les méthodes classiques de mélange turbulent peuvent s'avérer coûteuses en énergie et/ou destructrices des propriétés physiques de ces fluides, ou tout simplement inefficaces. Le mélange par advection chaotique a montré son efficacité pour le mélange d'un champ scalaire (concentration, température) pour des fluides très visqueux ou en microfluidique. En effet, il est possible à partir d'un écoulement simple d'obtenir des trajectoires lagrangiennes complexes, en apportant une modulation temporelle adéquate, par exemple. Nous nous sommes intéressés au mélange thermique (à l'échelle macroscopique) au sein d'un fluide très visqueux à grand nombre de Prandtl. Nous avons modélisé l'écoulement instationnaire au sein d'un mélangeur bidimensionnel type, constitué d'une cuve et de deux barreaux cylindriques. Le caractère chaotique de l'écoulement est obtenu par la modulation temporelle des vitesses de rotation de la cuve et des barreaux.

En plus de l'analyse de l'évolution des formes de l'écoulement, nous nous sommes attachés au suivi de grandeurs statistiques comme la valeur moyenne et la déviation standard de la température, ainsi qu'à sa densité de probabilité (PDF). Nous avons mis en évidence l'existence de motifs récurrents auto-similaires dans le champ scalaire et nous avons montré l'importance de certains paramètres (protocoles de mélange, période de modulation, excentricité des barreaux ...) pour l'obtention d'un mélange de bonne qualité et pour la prévention contre la persistance de zones de non mélange. Nous avons montré les particularités liées à ce mode de mélange dont la source

du scalaire (la température) se situe au niveau de la paroi. Ainsi, contrairement au cas d'une concentration d'espèce initialement présente au sein du mélangeur, la rotation continue des parois inhibe le transfert thermique pariétal, en empêchant la formation de points paraboliques sur ces parois.

Parmi les autres originalités de ces travaux, on peut citer l'étude de l'impact de la rhéologie du fluide (newtonien, rhéofluidifiant ou rhéoépaississant) et de la thermodépendance de la viscosité sur les performances du mélange thermique ainsi que l'effet du type de chauffage/refroidissement aux parois (température imposée ou flux thermique imposé) sur l'homogénéisation et les extremums de la température du fluide. L'extension de ces études vers des situations 3D et vers l'analyse des effets inertiels seront les étapes suivantes de ce travail, utiles pour le dimensionnement d'un pilote expérimental, nécessaire au transfert de ce concept vers l'industrie.

**Publications concernées :** [A15, A13, A9, A8, A4, A11, C11, C10, C9, C8, CN14, CN10, CN6] (voir liste I.4.3)

### Émulsification basse énergie

Cette activité a démarré en 2005 dans le cadre d'une collaboration avec l'Institut Français du Pétrole (IFP Pau et Rueil Malmaison). L'objectif est de mettre au point un procédé basse énergie de mise en émulsion d'une huile lourde (très visqueuse) dans de l'eau, en partant d'une solution d'huile très concentrée (env. 90%) dans laquelle de l'eau et du surfactant (env. 10 %) sont introduits. Une des applications serait la réduction de la viscosité pour le transport en conduite. Nous cherchons à identifier et comprendre les mécanismes physiques et les paramètres qui contrôlent l'émulsification laminaire.

Un émulsionneur batch a été mis au point et amélioré. Il est constitué d'une cuve cylindrique dans laquelle peut tourner un barreau cylindrique. Un cylindre supplémentaire immobile crée une seconde zone de cisaillement en plus de celle qui se trouve entre le barreau tournant et la cuve. Le procédé de mise en émulsion directe a été validé pour des émulsions très concentrées. L'évolution de la granulométrie des émulsions au cours du processus de mélange a été déterminée par le suivi de grandeurs telles que le diamètre moyen et le facteur d'uniformité. La rhéologie des émulsions a été caractérisée au cours du temps, et il a été établi qu'elle pouvait constituer un indicateur supplémentaire de l'avancement du processus d'émulsification. Des caractérisations thermiques par DSC ont été également réalisées. Nous avons montré que le procédé développé permet de contrôler la granulométrie de l'émulsion en agissant sur la vitesse de rotation du barreau et sur la durée du mélange. Ainsi, il est possible d'obtenir une émulsion au diamètre moyen voulu avec un bon degré d'uniformité. Une analyse énergétique nous permet de classer cet émulsionneur parmi les moins énergivores, surtout pour l'obtention d'émulsions très concentrées, grâce à l'écoulement laminaire du fluide dans le mélangeur. Ce procédé a été étendu au fonctionnement continu avec succès. Dans le cadre de la thèse de S. Caubet (soutenue en 2010), un procédé en ligne au sein d'une conduite a été mis au point avec un écoulement axial.

En dehors du champ pétrolier, ce procédé innovant d'émulsification, trouverait de multiples applications dans des domaines tels que l'agroalimentaire, les cosmétiques et la pétrochimie. Il est utilisé actuellement, dans le cadre d'une collaboration avec l'Institut des Sciences Moléculaires de Bordeaux, pour la synthèse de biomousse à partir d'un sous-produit de l'industrie papetière. En contrôlant précisément la porosité de la mousse, cette dernière peut être utilisée comme isolant thermique ou comme milieu de filtration. Nous étudions actuellement son utilisation pour la fabrication de panneaux avec des inclusions en matériaux à changement de phase (collaboration avec l'Université de Saragosse).

**Publications concernées :** [A10, A5, A3, C15, C14, C13, C7, C6, CN17, CN7, B1] (voir liste I.4.3)

### **Modélisation des changements de phase liquide-solide et de la convection naturelle**

J'ai abordé cette thématique en premier lieu au cours de ma thèse. Récemment, j'ai amorcé de nouveaux travaux dans ce domaine. Mon sujet de recherche doctoral (1997-2001) se situait dans le domaine du stockage d'énergie par chaleur latente. Il s'agissait de modéliser numériquement la convection naturelle autour d'un nodule contenant un Matériau à Changement de Phase (MCP) surfondu qui cristallise. Cette modélisation a été couplée à la modélisation de la cristallisation interne.

Actuellement, j'étudie les MCP comme moyen de contrôle de la température d'une paroi débitant un flux thermique dans deux situations différentes :

- Le cas d'une paroi verticale, débitant un flux thermique et englobée par une cavité remplie de MCP initialement solide, est modélisé par le code Tamaris. Nous avons montré l'impact important de la forme et de la disposition de la cavité sur les courants de convection naturelle dans le MCP fondu et sur la température maximale de la paroi. En étudiant cinq cavités de différentes formes, contenant la même quantité de MCP, il a été établi que l'usage d'une cavité allongée et décalée verticalement vers le haut, pouvait réduire la température au point le plus chaud de la paroi de 40 °C par rapport à une géométrie centrée en demi-cylindre.
- Pour une application de transport d'énergie par chaleur latente, nous avons étudié la solution qui consiste à faire circuler un fluide chargé de MCP micro-encapsulé dans un tube refroidi par un flux thermique. Nous prenons en compte le caractère stochastique de la rupture de la surfusion en suivant les évolutions des cristallisations étalées dans le temps de plusieurs populations de micro-capsules. Avec ce modèle, nous avons montré l'impact de paramètres tels que la taille et la fraction volumique des micro-capsules sur l'efficacité du dispositif.

Dans le cadre de notre collaboration avec l'Université de Saragosse, une étude par modélisation du comportement d'un mur chargé d'inclusion de MCP de différentes tailles, réalisé par émulsification laminaire, est en cours (cf. section V.4). Elle permettra de caractériser le comportement de ce type de matériau en tant qu'isolant actif.

**Publications concernées :** [A12, A11, A7, A6, A2, A1, C15, C12, C1, CN11, CN8, CN3, CN2, CN1] (voir liste I.4.3)

### **Écoulements à effet thermocapillaire**

Lorsqu'un liquide à surface libre subit un gradient thermique, la thermodépendance de la tension de surface peut provoquer des courants convectifs. Ces courants seront à l'origine de l'écoulement du liquide ou se superposeront à un écoulement forcé. Ces deux situations ont été l'objet de deux thèses que je co-encadre (projet HC Volubilis (2009-2012)). Il s'agit de l'étude numérique des instabilités hydrodynamiques et thermocapillaires d'une couche fluide sujette à un gradient thermique. Cette couche fluide est statique pour la première thèse (convection Bénard-Marangoni), et en écoulement pour la seconde (Poiseuille-Bénard-Marangoni). Ces deux thèses reposent principalement sur l'utilisation du code Tamaris que je développe (cf. chap. II).

Dans la première étude, un récipient cylindrique équipé d'un fond épais et conducteur de la chaleur est chauffé par un flux thermique sur sa partie centrale. Selon le rapport des conductivités du liquide et du solide, un profil de température non uniforme se forme à l'interface entre ces deux milieux et provoque des cellules de convection naturelle et thermocapillaire. Nous étudions

l'impact de plusieurs paramètres tels que les nombres de Marangoni, Biot, Rayleigh et Prandtl sur la structure des cellules convectives et sur le transfert thermique. D'autres paramètres, comme le rapport de forme du récipient et le rapport des conductivités, sont également étudiés.

La seconde étude concerne l'écoulement dans un canal ouvert horizontal, chauffé par le bas. Pour des valeurs de Reynolds suffisamment élevées, des rouleaux convectifs longitudinaux apparaissent au sein d'un écoulement stationnaire. Quand les effets thermocapillaires augmentent (augmentation du nombre de Marangoni), ces rouleaux se déforment et se restructurent suite à l'augmentation de l'énergie cinétique dans le fluide, ce qui influe sur les transferts thermiques à la paroi basse du canal. D'autres paramètres influent sur la structure de l'écoulement et sur les transferts thermiques comme les nombres de Reynolds, Rayleigh, Biot ainsi que le facteur de forme du canal.

**Publications concernées :** [CN16, CN15, CN13, CN12](voir liste I.4.3)

### I.4.3. Production scientifique

#### Journaux à comité de lecture

- [A14] Rigolini J., Bombled F., Ehrenfeld F., **El Omari K.**, Le Guer Y., Grassl B., 2D-infrared thermography monitoring of ultrasound-assisted polymerization of water-soluble monomer in a gel process. *Macromolecules*, 44, pp. 4462-4469, 2011.
- [A13] Le Guer Y., **El Omari K.**, Chaotic advection for thermal mixing, *Advances in Applied Mechanics*, article invité, mars 2011, à paraître.
- [A12] **El Omari K.**, Kousksou T., Le Guer Y., Impact of shape of container on natural convection and melting inside enclosures used for passive cooling of electronic devices, *Applied Thermal Engineering*, 31, pp. 3022-3035, 2011.
- [A11] Kousksou T., Jamil A., **El Omari K.**, Zeraouli Y., Le Guer, Y., Effect of Heating Rate and Sample Geometry on the Apparent Specific Heat Capacity : DSC Applications, *Thermochimica Acta*, 519(1-2), pp. 59-64, 2011.
- [A10] Jamil A., Caubet S., Grassl B., Kousksou T., **El Omari K.**, Zeraouli Y., Le Guer Y., Thermal properties of non crystallizable oil-in-water highly concentrated emulsions, *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects*, 382(1-3), pp. 266-273, 2011.
- [A9] **El Omari K.**, Le Guer Y., Alternate rotating walls for thermal chaotic mixing. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, 53, pp. 123-134, 2010.
- [A8] **El Omari K.**, Le Guer Y., Thermal chaotic mixing of power law fluids in an alternate rotating walls mixer. *Journal of Non-Newtonian fluid mechanics*, 165, pp. 641-651, 2010.
- [A7] Kousksou T., El Rhafiki T., **El Omari K.**, Zeraouli Y., Le Guer Y., Forced Convective Heat Transfer in Supercooled Phase-Change Material Suspensions with Stochastic Crystallization. *Int. J. of Refrigeration*, 33(8), pp. 1569-1582, 2010.
- [A6] Jamil A., Kousksou T., **El Omari K.**, Zeraouli Y., Le Guer Y., Heat Transfer in Salt Solutions Enclosed in DSC Cells, *Thermochimica Acta*, 507-508, pp. 15-20, 2010.
- [A5] Caubet S., Le Guer Y., Grassl B., **El Omari K.**, Normandin E., A Low-Energy Emulsification Batch Mixer For Concentrated Oil-In-Water Emulsions. *AIChE Journal*, 57(1), pp. 27-39, 2011.
- [A4] **El Omari K.**, Le Guer Y., A numerical study of thermal chaotic mixing in a two rod rotating mixer. *Computational Thermal Sciences*, 1, pp. 55-73, 2009.

- [A3] Fournanty S., Le Guer Y., El Omari K., Dejean J-P., Laminar flow emulsification process to control the viscosity reduction of heavy crude oils. *J. of Dispersion Science and Technology*, 29(10), pp. 1355-1366, 2008.
- [A2] El Omari K., Dumas J.P., Crystallization of supercooled spherical nodules in a flow, *Int. J. Thermal Sciences*, 43(12), pp. 1171-1180, 2004.
- [A1] El Omari K., Dumas J.P., Flow around a spherical nodule during its crystallization, *Int. J. of Heat and Technology*, 21(2) 175-182, 2003.

#### Article soumis :

- [A15] El Omari K., Le Guer Y., Thermal Chaotic Mixing : Comparison of constant wall temperature and constant heat flux boundary conditions. Soumis à *Heat and Mass Transfer*.

#### Articles en cours de rédaction :

- Moguen Y., El Omari K., Le Guer Y., Heating and cooling of temperature-dependent complex fluids by chaotic mixing. Rédaction avancée à 75 %, pour *Physics of Fluids*.
- Bammou L., El Omari K., Blancher S., Le Guer Y., Benhamou B., Thermocapillary effect on mixed convection in a horizontal open channel. En cours de rédaction pour *International Journal of Heat and Fluid Flow*.
- Caubet S., Grassl B., El Omari K., Le Guer Y., Study of a new mixer : the continuous two-rod mixer (C-TRM) for the production of concentrated O/W emulsions and comparison with a similar batch device (B-TRM). En cours de rédaction pour *Chemical Engineering and Processing : Process Intensification*.
- Aref H., Blake J.R., Cartwright J.H.E., Clercx H.J.H., Le Guer Y., de Moura A.P.S., El Omari K., Speetjens M.F.M., Frontiers of chaotic mixing, en cours de rédaction collaborative pour *Reviews of Modern Physics*.

#### Communications internationales avec actes et comité de lecture

- [C15] Jamil A., Caubet S., Kousksou T., El Omari K., Zéraouli Y., B. Grassl and Le Guer Y., 2010, Kinetics of crystallization of water in highly concentrated Ricin Oil-in-Water emulsions. World Congress on Emulsions, october 12-14, Lyon.
- [C14] Caubet S., Grassl B., El Omari K., Normandin E. and Le Guer Y., 2010, Production of highly concentrated O/W emulsions in two rod batch and continuous mixers. World Congress on Emulsions, october 12-14, Lyon.
- [C13] Jamil A., S. Caubet S., Kousksou T., El Omari K., Zeraouli Y., Grassl B., Le Guer Y., Thermal properties of oil-in-water highly concentrated emulsions, EUFOAM 2010 Conference and COST Symposium, 14-16 July, Borovets, Bulgaria.
- [C12] Kousksou T., Jamil A., El Omari K., Zeraouli Y., Le Guer Y., Phase-change Materials : Numerical and DSC Analysis, 9th IIR Conference on phase-change materials and slurries, Sofia, Bulgaria, 2010.
- [C11] El Omari K., Le Guer Y., Thermal chaotic mixing of non-Newtonian fluids in a two rod mixer. 4th ASME Symposium on Flow Manipulation and Active Control, 2009, Vail, Colorado, USA.
- [C10] Le Guer Y. and El Omari K., Thermal chaotic mixing in a two rod mixer with imposed heat flux. 2nd ASME Symposium on the transport Phenomena in Mixing, 2009, Vail, Colorado, USA.

- [C9] El Omari K., Le Guer Y., Chaotic thermal mixing in a two rod mixer. XXII International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM), Adelaide, Australia, 2008.
- [C8] El Omari K., Le Guer Y., A numerical study of heat convection in a thermal chaotic mixer with two rods. International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer (ICHMT), Marrakech, Morocco, 2008.
- [C7] Jamil A., Caubet S., Kousksou T., El Omari K., Zeraoui Y., B. Grassl, Le Guer Y., DSC characterization of O/W concentrated emulsions obtained by a low energy mixing process. 18th European Conference on Thermophysical Properties, Pau, France, 2008.
- [C6] Le Guer Y., Fournanty S., El Omari K., Dejean J-P., A low energy emulsification process to control viscosity reduction of heavy crude oil. The 8th International Conference on Petroleum Phase Behavior and Fouling, Pau, France, 2007.
- [C5] El Omari K., Schall E., Le Guer Y., Amara M., Numerical study of turbulent flow around a generic airship at high angle of attack. Fourth International Conference on Computational Heat and Mass Transfer (ICCHMT 2005 Congress), Cachan, France, 2005.
- [C4] El Omari K., Schall E., Koobus B., Dervieux A., Amara M., Dumas J.P., Fluid-structure coupling of a turbulent flow and a generic blimp structure at high angle of attack, 9th Conference of Applied Mathematics and Statistics, Jaca, Spain, 2005.
- [C3] El Omari K., Schall E., Koobus B., Dervieux A., Turbulence modelling challenges in airship CFD studies, 8th Conference of Applied Mathematics and Statistics, Jaca, Spain, 2003.
- [C2] El Omari K., Schall E., Koobus B., Dervieux A., Inviscid flow calculation around a flexible airship, 8th Conference of Applied Mathematics and Statistics, Jaca, Spain, 2003.
- [C1] Dumas J.P., El Omari K., Bédécarrats J.P., Strub M., Crystallisation of a supercooled spherical nodule in a flow Eurotherm n° 69 : Heat and Mass Transfer In Solid-Liquid Phase Change Processes, Ljubljana (Slovenia) 2003.

#### Communications internationales

- [Ci2] Le Guer Y., El Omari K., Gibout S., Dejean J-P., Water drops deformation and breakup in a highly viscous oil by chaotic mixing. Presentation at the Eurotherm 79 Summer School on "Mixing and Heat Transfer in Chemical Reaction Processes", Cargèse, France, 2006.
- [Ci1] Alessi J., Gibout S., Schall E., El Omari K., Le Guer Y., Reactive mixing study by a mapping method in periodic flows. Presentation at the Eurotherm 79 Summer School on "Mixing and Heat Transfer in Chemical Reaction Processes", Cargèse, France, 2006.

#### Communications nationales avec actes et comité de lecture

- [CN17] Caubet S., El Omari K., Grassl B., Le Guer Y., Etude de la cinétique de formation d'une émulsion très concentrée huile dans eau en écoulement continu. Actes du congrès français de mécanique, Besançon, 2011.
- [CN16] Bammou L., El Omari K., Blancher S., Le Guer Y., Benhamou B., Effet thermocapillaire sur la convection mixte en canal ouvert. Actes du congrès français de mécanique, Besançon, 2011.
- [CN15] Es Sakhy R., El Omari K., Blancher S., Le Guer Y., Convection de Bénard-Marangoni induite par un flux pariétal non-uniforme en récipient cylindrique. Actes du congrès français de mécanique, Besançon, 2011.

- [CN14] Moguen Y., **El Omari K.**, Le Guer Y., Efficacité du mélange chaotique pour des fluides non newtoniens thermodépendants chauffés ou refroidis. Actes du congrès français de mécanique, Besançon, 2011.
- [CN13] Bammou L., **El Omari K.**, Blancher S., Le Guer Y., Benhamou B., Étude numérique de la convection mixte dans un canal horizontal à surface libre. Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Perpignan, 2011.
- [CN12] Es Sakhy R., **El Omari K.**, Le Guer Y., Blancher S., Feddaoui M., Mediouni T., Simulation de la convection de Bénard-Marangoni dans des récipients cylindriques chauffés par un flux non uniforme. Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Perpignan, 2011.
- [CN11] **El Omari K.**, Kousksou T., Le Guer Y., Fusion et convection naturelle dans des capsules de différentes géométries avec une paroi à flux imposé. Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Le Touquet, 2010.
- [CN10] **El Omari K.**, Le Guer Y., Mélange chaotique thermique de fluides non newtoniens. Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Le Touquet, 2010.
- [CN9] Rigolini J., Bomblet F., Ehrenfeld F., Grassl B., Le Guer, **El Omari K.**, Suivi thermique d'un front de polymérisation pour un procédé gel. Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Le Touquet, 2010.
- [CN8] **El Omari K.**, Kousksou T., Le Guer Y., Étude numérique de la fusion et de la convection naturelle dans différentes cavités à paroi à flux imposé. Actes du Congrès de l'Association Marocaine de Thermique, Settat, 2010.
- [CN7] Caubet S., Le Guer Y., Grassl B., **El Omari K.** and Normandin E., A Low-Energy Emulsification Batch Mixer For Concentrated Oil-In-Water Emulsions. 12ème Congrès de la Société Française de Génie des Procédés, Marseille, 2009.
- [CN6] **El Omari K.**, Le Guer Y., Etude numérique de la convection thermique dans un mélangeur à deux barreaux. Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Toulouse, 2008.
- [CN5] Schall E., Bentaleb Y., **El Omari K.**, Koobus B., Aérodynamique externe d'un dirigeable. Actes du 16ème congrès français de mécanique, Nice, 2003.
- [CN4] Schall E., **El Omari K.**, Bentaleb Y., Le Guer Y. et Gibout S., Simulation numérique d'un écoulement compressible à bas nombre de Mach autour d'un dirigeable. Colloque National de la Recherche dans les IUT (CNRIUT), Tarbes, 2003.
- [CN3] **El Omari K.**, Stutz B., Dumas J.P., Caractérisation de fluides frigoporteurs chargés en matériaux à changement de phase encapsulés, Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Vittel, 2002.
- [CN2] **El Omari K.**, Bedecarrats J-P., Strub M., Dumas J-P., Etude de la convection autour d'un nodule sphérique couplée à la cristallisation du matériau à changement de phase interne. Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Lyon., 2000.
- [CN1] **El Omari K.**, Strub M., Dumas J.P., Etude de la convection mixte autour d'un nodule sphérique à la rupture de surfusion, Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Arcachon, 1999.

### Rapports INRIA

- [R1] **El Omari K.**, Schall E., Koobus B., Dervieux A., Aeroelastic Coupling Between a Low Mach Inviscid Flow and a Flexible Generic Airship. INRIA report, N° 5456, 2005.
- [R2] **El Omari K.**, Schall E., Koobus B., Dervieux A. Numerical Investigations of Turbulent Flow Past a Generic Airship. INRIA report, N° 5455, 2005.

## Brevet

**[B1]** Dispositif et méthode pour effectuer un mélange basse énergie, IFP/UPPA, 2006. Le Guer Y. (UPPA), Fournanty S. (IFP), Dejean J-P. (IFP), **El Omari K.** (UPPA), Hénaut I. (IFP), BF n° dépôt 06/09.439.

## I.4.4. Encadrement des travaux de recherche

### Doctorats

► **Sylvain Caubet** : thèse soutenue le 3 décembre 2010, « Procédé basse énergie pour la production d'émulsions très concentrées huile dans eau : caractérisation, intensification et applications ». Financement : Communauté d'Agglomération Pau-Pyrénées et Monitorat IUT, Dépt. GTE Pau. Directeur de thèse : Y. Le Guer (40 %), co-directeurs : K. El Omari (30 %) et B. Grassl (30 %).

Différentes collaborations ont été initiées dans le cadre de cette thèse, avec l'IFP, le Laboratoire FIRP au Venezuela (Mérida) et le « Laboratory of Chemical Physics and Engineering (LCPE) » de l'Université de Sofia en Bulgarie (S. Tchlolakova). S. Caubet a effectué un séjour d'un mois et demi au FIRP à Mérida en juin-juillet 2008. Une collaboration est engagée avec l'Institut des Sciences Moléculaires de l'Université de Bordeaux I pour la réalisation de biocomposites polymères à partir d'émulsions très concentrées.

Publications pendant la thèse : [A10, A5, C15, C14, C13, C7, CN17, CN7] (voir liste I.4.3).

Dans le cadre du programme de recherche HC Volubilis 2009-2012, je participe activement à l'encadrement des travaux de deux thèses en co-tutelles avec les Universités d'Agadir et de Marrakech au Maroc. Ce sont deux études numériques dont les modélisations numériques sont réalisées grâce au code Tamaris que je développe.

► **Rachid Es-Sakhy** : depuis décembre 2009, « Simulation de la convection de Bénard-Marangoni dans des récipients cylindriques ». Co-directeurs UPPA : Y. Le Guer et S. Blancher. Co-directrice au Maroc : T. Mediouni (Agadir). Publications à ce jour : [CN15, CN12].

► **Lahcen Bammou** : depuis décembre 2009, « Effets thermocapillaires sur la convection mixte en canal ouvert ». Co-directeurs à l'UPPA : Y. Le Guer et S. Blancher. Co-directeurs au Maroc : B. Benhamou (Marrakech) et T. Mediouni (Agadir). Publications à ce jour : [CN16, CN13].

► À partir de la rentrée 2011, je vais co-diriger une thèse sur la modélisation numérique des changements de phase solide-liquide lors d'un écoulement en conduite à paroi refroidie. Directeur : T. Kousksou (50 %), co-directeur : K. El Omari (50 %). Financement : bourse du ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche. Dans le cadre de la collaboration transfrontalière entre l'UPPA et l'université de Saragosse, cette thèse bénéficiera également d'une co-tutelle espagnole (Pr. J. M. Marin).

### Masters

**Adil Achhoud** : Master 2-R Génie Energétique et Environnement, Université de Tétouan, 2009, « Simulation numérique du mélange chaotique au sein d'un canal plan muni d'arcs tour-

nants ». Financement CDAPP. Co-directeur : Y. Le Guer (20 %).

**Samba Deme** : Master 2-R Génie des Systèmes Thermiques de l'UPPA, 2008, « Dispersion par advection chaotique en milieu poreux ». Financement IFP. Co-directeurs : T. Kousksou (20 %), Y. Le Guer (30 %).

**Desdan Ercan** : Master 2-R, ENSIASET Toulouse, 2008, « Etude d'un pilote d'émulsification en continu ». Financement IFP et la société ERTECH Pau. Co-directeur : Y. Le Guer (70 %).

**Ahmadi Aras** : Master 2-R, ENSGTI-UPPA, 2007, « Etude de l'efficacité du mélange chaotique à travers l'estimation et le suivi de l'évolution du gradient de traceur ». Co-directeur : Y. Le Guer (20 %).

**Sophie Fournanty** : Master 2-R, UPPA, 2007, « Rhéocinétique d'un procédé d'émulsification basse énergie pour la réalisation d'émulsion huile lourde dans eau ». Financement IFP. Co-directeur : Y. Le Guer (80 %).

**Malick Cissokho** : Master 2-R, ENSGTI-UPPA, 2007, « Etude de la formation d'une émulsion huile lourde dans eau par mélange chaotique ». Financement IFP. Co-directeur : Y. Le Guer (80 %).

**Pierre-Alexandre Cazalet** : Master 2-R, ENSGTI-UPPA, 2006, « Caractérisation du mélange au sein d'un mélangeur chaotique ».

#### I.4.5. Contrats de recherche et financements

Les contrats et financements cités ci-dessous ont été obtenus dans le cadre de mes activités de recherche :

IFP <sup>1</sup>	Mélangeur huile lourde basse énergie.	2005-2006	27 000 €
IFP	Emulsification basse énergie huile lourde.	2006-2007	36 000 €
IFP	Drainage d'huile par une solution polymérique et dispersion chaotique en milieu poreux.	2007-2008	25 000 €
CDAPP <sup>2</sup>	Financement bourse de thèse de S. Caubet.	2007-2010	120 000 €
CDAPP	Bourse d'excellence Master de A. Achhoud.	2009	4 500 €
EGIDE	Programme Hubert Curien Volubilis	2009-2012	50 000 €
FCCAA <sup>3</sup>	Projet Polysol-PCM. Collaboration avec le GITSE-I3A de l'Université de Saragosse.	2010-2011	25 000 €
MESR <sup>4</sup>	Financement d'une bourse de thèse démarrant en novembre 2011.	2011-2013	120 000 €
CINES <sup>5</sup>	Attribution d'heures de calcul sur le supercalculateur Jade, « Simulation des écoulements tridimensionnels à surface libre à effets thermocapillaires avec ou sans convection forcée ».	2011	50 000 h

<sup>1</sup> Institut Français du Pétrole. <sup>2</sup> Communauté d'Agglomération de Pau Pyrénées.

<sup>3</sup> Fond commun de coopération Aquitaine-Aragon. <sup>4</sup> Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche. <sup>5</sup> Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur.

### I.4.6. Rayonnement

#### Publication sur invitation des éditeurs

Le Guer Y., El Omari K. Chaotic advection for thermal mixing. *Advances in Applied Mechanics* (43 pages), article sur invitation, accepté par l'éditeur H. Aref le 22 mars 2011.

#### Conférence donnée à l'invitation du comité d'organisation dans un workshop international

Application of chaotic advection for thermal mixing of highly viscous fluids. Workshop on "Physics of Mixing", 24-28 janvier 2011 au Lorentz Center, Leiden, Netherlands.

#### Participation à plusieurs projets de recherche :

- Collaboration scientifique IFP/LaTEP de 2005 à 2008. Les travaux ont concerné le développement de procédés autour des huiles très visqueuses : mélange par advection chaotique, émulsification basse-énergie, dispersion chaotique en milieux poreux, écoulement diphasique, polymère associatif/huile, J.P. Dejean, F. Jurado (IFP Pau); J.F. Argillier, I. Hénaut (IFP Rueil), (voir chap. IV).
- Projet transfrontalier Aquitaine-Aragon (Fond commun de coopération) 2010-2011. Projet Polysol-PCM : développement de composites isolants thermiques actifs comportant une matrice polymère avec inclusion de matériaux à changement de phase (MCP). Partenaires : I3A (Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón), GITSE (Grupo de Ingeniería Termal y Sistemas Energéticos) de l'Université de Saragosse, IPREM (porteur B. Grassl) et SIAME pour l'UPPA (voir section V.4).
- Programme Hubert Curien Volubilis avec le Maroc (Université Cadi Ayyad de Marrakech et Ibn Zohr d'Agadir) 2009-2012, porteur SIAME UPPA : S. Blancher (voir section VI.1).

#### Brevet

Brevet IFP/UPPA FR2907690 (2008). Dispositif et méthode pour effectuer un mélange basse énergie. Le Guer Y. (UPPA), Fournant S. (IFP), Dejean J-P. (IFP), El Omari K. (UPPA), Hénaut I. (IFP) - dépôt n° 06/09.439

#### Expertises

Rapporteur d'articles scientifiques pour les journaux suivants : AICHE Journal, Numerical Heat Transfer, Heat and Mass Transfer, Kuwait Journal of Science and Engineering.

#### Séminaires et présentations diverses

- « Développements pour les écoulements incompressibles », Journée scientifique Mécanique des Fluides Numérique à l'UPPA (UPPA-CFD), 3 juillet 2008.
- « Production et transport de bruts lourds », Journées de Rencontres Scientifiques IFP-UPPA, le 18 décembre 2007.

- « Contribution à la modélisation et à la simulation numérique d'écoulements et interaction fluide-structure ». Journée scientifique Mécanique des Fluides et Simulation Numérique de l'UPPA (UPPA-CFD), le 8 juin 2006.

#### Participation à des écoles et formation

- Co-organisation et participation à la formation au calcul sur la grille du mésocentre Aquitain, 19-20 mai 2011, Pau.
- Participation à l'Eurotherm 79 Summer School « Mixing and Heat Transfer in Chemical Reaction Processes », 31 juillet au 5 août 2006, Cargèse, France.
- Participation à l'école d'été : « Modélisation des Fronts et Interfaces », du 26 juin au 2 juillet, 2005 sur l'Ile de Porquerolles.
- Participation à la 8<sup>ème</sup> Ecole de printemps : « Mécanique des Fluides Numérique », du 1er au 7 juin 2003, Fréjus.

#### I.4.7. Congé pour recherche en 2012 (CRCT)

Je serai, à partir de février 2012 et pendant 6 mois, en Congé pour Recherche ou Conversion Thématique (CRCT). Mon projet de recherche pour ce congé vise à renforcer mes compétences dans le domaine de la modélisation des écoulements diphasiques fluide-fluide et de se doter, au sein de l'équipe « Transports Multiphasiques » du laboratoire SIAME, des outils nécessaires à l'étude de ces écoulements. Il s'agit de développer la méthode des interfaces diffuses. Dans cette méthode [1], basée sur la théorie de Van der Waals et développée à l'origine par Cahn et Hilliard [2], l'interface a une épaisseur par définition non nulle. Cette épaisseur découle des équations d'équilibre hydro-thermodynamique à l'interface. Les propriétés physiques (masse volumique et viscosité) du mélange des deux fluides varient de manière progressive et continue à travers cette épaisseur. La modélisation par la méthode des interfaces diffuses présente tout son intérêt quand le phénomène étudié possède une longueur caractéristique ayant le même ordre de grandeur que celui de l'épaisseur de l'interface. C'est le cas par exemple pour les phénomènes de rupture et coalescence de gouttes dans une émulsion. Ces méthodes sont également très attractives numériquement car elles évitent le traitement explicite de l'interface, et permettent l'utilisation d'un maillage fixe, ce qui facilite la parallélisation des calculs, très profitable dès lors que des calculs tridimensionnels deviennent envisageables. Des applications d'écoulements multiphasiques en micro-fluidique (à l'échelle du pore) peuvent facilement être traitées.



---

---

## CHAPITRE II

---

# *Modélisation des écoulements incompressibles et des transferts thermiques par la méthode des volumes finis non structurés*

### II.1. Introduction

Mes activités de recherche s'articulent autour d'un axe central qui est la modélisation des écoulements et des transferts. Les écoulements concernés sont pour l'essentiel incompressibles et laminaires, à l'exception de mes travaux en tant que postdoctorant (2002-2004), dédiés à l'étude d'écoulements turbulents à l'aide d'un solveur compressible (cf. section VI.3).

Lors de mon travail doctoral (1997-2001, section V.1), j'ai utilisé un code commercial de mécanique des fluides (Fluent), puis, lors de mon postdoc, un code recherche, Aero3D. À partir de ces deux expériences, il m'est apparu que pour la conduite d'un projet de recherche sur le long terme, il serait très profitable de maîtriser le développement du code de calcul numérique utilisé, ou du moins d'avoir une idée très précise de ses modèles, ses méthodes et son implémentation.

C'est ainsi que depuis ma nomination en tant que Maître de Conférences en 2004, j'ai entrepris le projet de développement d'un code de mécanique des fluides numérique, avec comme objectif la construction d'un code permettant la modélisation des écoulements et des transferts associés, thermiques et massiques. Le code développé devait avoir comme caractéristiques une grande flexibilité géométrique, permettant une grande variété des problèmes traités, et une modularité du développement, garantissant la facilité des évolutions futures et l'intégration aisée et rapide de nouveaux modèles. Cela permet la prise en compte de différentes situations et différents phénomènes physiques : changement de phase, écoulement diphasique, transfert conjugué, effets thermocapillaires, etc. Aujourd'hui, une bonne partie de ces objectifs a été atteinte, avec le développement d'un code tridimensionnel, instationnaire, parallèle et à maillage non structuré hybride.

L'activité de développement de ce code, incluant tous les travaux d'investigation sur les diffé-

rents schémas et méthodes numériques qui le composent, peut être considérée comme une activité en soutien aux thématiques et projets de recherche auxquels je participe. Ces projets qui font souvent appel à ce code, sont décrits dans les chapitres suivants. Dans le présent chapitre, sont détaillés les modèles, les méthodes numériques et la démarche suivis pour le développement de ce code baptisé **TAMARIS**.

Actuellement, les travaux des thèses de R. Essakhy et de L. Bammou (Programme HC Volubilis) que je co-encadre, reposent entièrement sur le code Tamaris dans ses deux versions, mono-processeur et parallèle. Il s'agit de deux études numériques sur les écoulements dans des films liquides, avec prise en compte des effets thermocapillaires (cf. section VI.1). A partir de l'année universitaire 2011/2012, je co-dirige une nouvelle thèse, autour de la modélisation des écoulements de fluides complexes avec solidification. Les futurs travaux de cette thèse feront appel à ce code. Tamaris a fait également l'objet de plusieurs stages de Master recherche : ceux de P.-A. Cazalet (2006), A. Aras (2007), S. Deme (2008) et A. Achhoud (2009). Depuis plusieurs années, le code Tamaris est utilisé par les étudiants du département Génie Thermique et Énergie de l'IUT de Pau, lors d'un travail pratique du module de mécanique des fluides.

Dans les sections suivantes, nous allons détailler les modèles physiques et méthodes numérique utilisés par ce code.

Le code Tamaris est impliqué dans les publications suivantes : [A12, A9, A8, A4, A11, A12, C11, C10, C9, C8, CN16, CN15, CN13, CN11, CN10, CN8, CN6] (voir liste I.4.3)

## II.2. Modèle physique

Le code Tamaris résout les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour un fluide incompressible. Ces équations s'écrivent sous leur forme intégrale comme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \, dV + \int_S \rho \vec{u} \cdot \vec{n} \, dS = 0 \quad (\text{II.1})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \vec{u} \, dV + \int_S \rho \vec{u} \vec{u} \cdot \vec{n} \, dS = & - \int_V \vec{\nabla} p \, dV + \int_S \vec{\tau} \cdot \vec{n} \, dS \\ & + \int_V (\rho - \rho_0) \vec{g} \, dV \end{aligned} \quad (\text{II.2})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho C_p T \, dV + \int_S \rho C_p T \vec{u} \cdot \vec{n} \, dS = \int_S \lambda \vec{\nabla} T \cdot \vec{n} \, dS + \int_V \vec{\tau} : \vec{D} \, dV \quad (\text{II.3})$$

où  $\vec{u}$  est le vecteur vitesse,  $p$  la pression (moins la pression hydrostatique) et  $T$  la température. L'intégration est faite sur un volume de contrôle  $V$  entouré d'une surface  $S$  de normale unitaire externe  $\vec{n}$ .  $\vec{\tau}$  est le tenseur des contraintes visqueuses décrit dans la section II.2.1. Dans ces équations, seul l'effet de la température sur la masse volumique  $\rho$  a été retenu. Celle-ci est donc supposée indépendante de la pression. Lorsque la variation de  $\rho$  avec la température est suffisamment faible, l'approximation de Boussinesq peut être utilisée, c'est-à-dire, la masse volumique est supposée constante et égale à  $\rho_0$ , sa valeur à la température de référence  $T_{ref}$ , partout sauf dans le terme des forces de flottabilité où elle peut être linéarisée de la manière suivante :  $\rho - \rho_0 = -\rho_0 \beta (T - T_{ref})$ , avec  $\beta$  le coefficient d'expansion volumétrique.

### II.2.1. Prise en compte du comportement rhéologique du fluide

Pour tenir compte de la rhéologie des fluides étudiés, nous avons besoin d'établir la relation qui existe entre le tenseur des contraintes  $\bar{\tau}$  et celui des taux de déformations  $\bar{D}$  :

$$\bar{D} = \frac{1}{2} \left( \bar{\nabla} \mathbf{u} + (\bar{\nabla} \mathbf{u})^t \right) \quad (\text{II.4})$$

Pour les fluides newtoniens, la relation entre les deux tenseurs est purement linéaire et le coefficient de proportionnalité est la viscosité dynamique  $\eta$  :

$$\bar{\tau} = 2 \eta \bar{D} = \eta \left( \bar{\nabla} \mathbf{u} + (\bar{\nabla} \mathbf{u})^t \right) \quad (\text{II.5})$$

Pour modéliser l'écoulement des fluides non newtoniens, et dans le cadre du cas particulier des fluides dit « newtoniens généralisés », le modèle linéaire  $\bar{\tau} = 2 \eta \bar{D}$ , établi pour les fluides purement visqueux newtoniens, est étendu en remplaçant la viscosité constante par une fonction qui dépend du taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$  :

$$\bar{\tau} = 2\eta(\dot{\gamma}) \bar{D} \quad (\text{II.6})$$

où :

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2 \operatorname{tr} \left( \bar{D}^2 \right)} \quad (\text{II.7})$$

Dans le cadre des études que j'ai menées sur le comportement des fluides non newtoniens purement visqueux (non élastiques) (sections III.4 et IV.3.2), j'ai utilisé le modèle en loi de puissance d'Ostwald-de Waele qui peut représenter les deux cas de fluide rhéofluidifiant (pseudoplastique) et de fluide rhéoépaississant (dilatant). Cette loi constitutive non linéaire s'écrit :

$$\eta(\dot{\gamma}) = k(\dot{\gamma})^{n-1} \quad (\text{II.8})$$

avec les paramètres empiriques  $k$  et  $n$ , qui représentent respectivement l'indice de consistance et l'indice de comportement. Les cas de  $n < 1$ ,  $n = 1$  et  $n > 1$  correspondent respectivement aux fluides rhéofluidifiants, newtoniens et rhéoépaississant.

Un autre facteur qui, dans certaines situations, peut avoir un impact important sur la rhéologie du fluide, est la thermodépendance de la viscosité. Cet effet peut être introduit dans la loi de puissance comme proposé par Bird et al. [3], à travers une variation exponentielle de l'indice de consistance avec la température sous la forme suivante :

$$k = k_0 e^{-b(T-T_{\text{ref}})} \quad (\text{II.9})$$

où  $b$  est une constante empirique positive et  $k_0$  la valeur de  $k$  à la température de référence  $T_{\text{ref}}$ . La variation de l'index de comportement  $n$  avec la température est le plus souvent très faible et peut être négligée. Dans le cas d'un fluide newtonien cette relation devient :

$$\eta(T) = \eta_0 e^{-b(T-T_{\text{ref}})} \quad \text{avec} \quad \eta_0 = \eta(T_{\text{ref}}). \quad (\text{II.10})$$

### II.2.2. Conditions aux limites

Différentes conditions aux limites clôturent le système d'équations (II.1, II.2 et II.3) selon les situations étudiées (en plus des conditions initiales pour les calculs instationnaires). Lorsque des

parois rigides sont présentes, mobiles ou non, la condition aux limites pour l'équation (II.2) est une condition de type Dirichlet pour la vitesse :  $\vec{U} = \vec{U}_{\text{paroi}}$ . Pour une entrée de fluide, un profil de vitesse est imposé, alors qu'à une sortie, un gradient normal nul est assumé. Les conditions aux limites en température (Eq. II.3) peuvent être de trois types pour les parois rigides :

- condition de type Dirichlet, avec une température imposée :

$$T = T_{\text{paroi}}; \quad (\text{II.11})$$

- condition de type Neumann, avec une densité de flux thermique imposée :

$$\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_{\text{paroi}} = \dot{q}; \quad (\text{II.12})$$

- condition de type Robin (ou de convection), caractérisée par un coefficient d'échange thermique  $h$  et une température du milieu externe  $T_{\infty}$  :

$$\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_{\text{paroi}} = h(T_{\infty} - T). \quad (\text{II.13})$$

### Surface Libre à effet thermocapillaire

La surface libre d'un liquide fait partie des conditions aux limites implémentées. Dans certaines conditions, cette interface peut être considérée comme plane, ce qui permet de négliger les effets de courbure tout en tenant compte des effets thermocapillaires. Cette simplification peut être considérée comme opportune lorsque le nombre de crispation  $Cr \ll 1$  et le nombre de Galilée  $Ga \gg 1$  avec :

$$Cr = \frac{\eta \alpha}{\sigma e} \quad \text{et} \quad Ga = \frac{g \rho^2 e^3}{\eta^2}$$

avec  $\alpha$  la diffusivité thermique,  $\sigma$  la tension de surface et  $e$  l'épaisseur de la couche du liquide.

La condition dynamique à une surface libre de normale  $\vec{n}$  s'écrit suivant une tangente  $\vec{t}$  :

$$(\vec{\tau} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{t} + \vec{\nabla}_s \sigma \cdot \vec{t} = 0 \quad (\text{II.14})$$

où  $\vec{\nabla}_s$  est le gradient surfacique :  $\vec{\nabla}_s = \vec{\nabla} - (\vec{\nabla} \cdot \vec{n})\vec{n}$ . La tension superficielle  $\sigma$  est considérée ici comme fonction de la température uniquement sous la forme :

$$\sigma(T) = \sigma(T_0) + \gamma(T - T_0) \quad \text{avec} \quad \gamma = \left. \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right|_{T_0}. \quad (\text{II.15})$$

Du point de vue thermique, cette surface libre peut être concernée par un flux thermique (par exemple en cas d'évaporation) et par un échange convectif avec le gaz du dessus. La condition aux limites est donc une combinaison des conditions de Neumann et de Robin :

$$\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_{s.l.} = h(T_{\infty} - T) + \dot{q}_{\text{evaporation}}. \quad (\text{II.16})$$

## II.3. Schémas numériques

Le code Tamaris utilise la méthode des volumes finis tridimensionnels (3D) non structurés à maillages hybrides. Les cellules de calcul peuvent être de différentes formes (tétraèdres, hexaèdres, prismes et pyramides), ce qui procure une grande flexibilité pour la géométrie étudiée

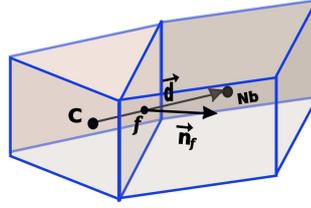


Figure II.1.: Une cellule de calcul C et une de ses cellules voisines  $N_b$ .

tout en permettant de raffiner facilement et de manière régulière au voisinage des parois. Les variables ( $\vec{U}$ ,  $p$  et  $T$ ) sont toutes stockées au centre des cellules de manière « non décalée ».

Pour décrire la méthode numérique utilisée, nous pouvons écrire les Eqs. (II.2 et II.3) sous leur forme générique de convection-diffusion d'une variable  $\phi$  :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi \, dV + \int_S \rho \phi \vec{U} \cdot \vec{n} \, dS = \int_S \Gamma \vec{\nabla} \phi \cdot \vec{n} \, dS + \int_V S_\phi \, dV. \quad (\text{II.17})$$

Les schémas spatiaux utilisés pour approcher les flux convectifs et diffusifs sont tous les deux du second ordre de précision. Le terme diffusif est approximé en effectuant une somme sur toutes les faces  $f$  d'une cellule de calcul (Fig. II.1) :

$$\int_S \Gamma \vec{\nabla} \phi \cdot \vec{n} \, dS = \sum_f \Gamma_f A_f (\overline{\nabla \phi})_f \cdot \vec{n}_f \quad (\text{II.18})$$

où  $A_f$  est l'aire de la face  $f$ . Pour traiter la non orthogonalité souvent inhérente aux maillages non structurés, le gradient normal  $(\overline{\nabla \phi})_f \cdot \vec{n}_f$  est décomposé en une contribution implicite qui utilise les valeurs de  $\phi$  aux centres des cellules (la première partie du terme de droite de l'Eq. (II.19)) et une contribution explicite traitée par une approche de correction différée afin de préserver la précision du second ordre du schéma centré. Une décomposition par sur-relaxation de coefficient  $\frac{1}{\vec{d} \cdot \vec{n}_f}$  est utilisée, comme proposée dans [4], pour améliorer les propriétés de convergence de la discrétisation de ce terme diffusif. Ainsi :

$$(\overline{\nabla \phi})_f \cdot \vec{n}_f = \frac{\phi_{N_b} - \phi_c}{\|\vec{d}\|} \frac{1}{\vec{d} \cdot \vec{n}_f} + \overline{\overline{\nabla \phi}} \cdot \left( \vec{n}_f - \frac{\vec{d}}{\vec{d} \cdot \vec{n}_f} \right) \quad (\text{II.19})$$

où  $\vec{d}$  est le vecteur qui joint les centres de deux cellules voisines (voir Fig. II.1). Le gradient moyen  $\overline{\overline{\nabla \phi}}$  est calculé par interpolation entre deux cellules voisines.

Le gradient des variables au centre des cellules est, quant à lui, calculé par le théorème de Gauss :

$$\overline{\overline{\nabla \phi}} = \frac{1}{V} \int_S \phi \vec{n} \, dS = \frac{1}{V} \sum_f \phi_f A_f \vec{n}_f, \quad (\text{II.20})$$

avec  $\phi_f$  la valeur moyenne de la variable interpolée à la face  $f$  par :

$$\phi_f = \xi \phi_c + (1 - \xi) \phi_{N_b} \quad \text{avec} \quad \xi = \frac{\|\overrightarrow{fN_b}\|}{\|\vec{d}\|} \quad (\text{II.21})$$

Le gradient peut également être calculé par la méthode des moindres carrés. Cette dernière permet d'élargir la molécule de calcul au-delà des cellules voisines immédiates (celles partageant une face avec la cellule où le gradient est calculé). Ainsi, toutes les cellules partageant un nœud

avec la cellule de calcul sont prises en compte, avec un coefficient de pondération égale à  $1/\|\vec{d}\|^2$ . Sur des maillages non réguliers et/ou étirés, la méthode des moindres carrés génère un champ de gradient plus précis et surtout plus lissé que la méthode de Gauss. Une étude comparative a en effet été réalisée lors du stage de Master recherche de A. Aras (2007).

Le terme convectif de l'Eq. II.17 est approximé par une somme sur les faces  $f$  qui constituent la surface  $S$  :

$$\int_S \rho \phi \vec{U} \cdot \vec{n} \, dS = \sum_f (\rho \phi A)_f \vec{U}_f \cdot \vec{n}_f. \quad (\text{II.22})$$

Le calcul de la valeur à la face  $\phi_f$  requiert une interpolation adéquate qui garantit à la fois un schéma précis et borné. Pour ce faire, nous avons implémenté le schéma non linéaire, haute résolution (HR) CUBISTA proposé par Alves *et al.* [5] sous sa formulation  $\gamma$  donnée par Ng *et al.* [6]. Ainsi,  $\phi_f$  est exprimée en fonction de la valeur amont (UP) de  $\phi$  et de sa valeur par différentiation centrée (CD) :

$$\phi_f^{\text{HR}} = \phi^{\text{UP}} + \gamma(\phi_f^{\text{CD}} - \phi^{\text{UP}}). \quad (\text{II.23})$$

le coefficient  $\gamma$  est déterminé à chaque face en tenant compte localement du profil de la solution, en utilisant l'approche NVD (*normalized variable diagram*) et en respectant le critère CBC (*convection boundedness criterion*) [7]. Le premier terme du membre de droite de l'Eq. (II.23) est pris en compte implicitement, tandis que le second terme est pris en compte explicitement avec l'approche de correction différée. Cette pratique renforce le conditionnement de la matrice du système linéaire obtenu.

Le couplage vitesse-pression est assuré par l'algorithme SIMPLE [8], tandis que le flux massique aux faces des cellules est calculé par l'interpolation de Rhie-Chow [9], afin d'éviter l'effet de damier dans le champ de pression.

L'avancement en temps pour les calculs instationnaires est assuré par le schéma implicite de Gear [10] à trois pas de temps et du second ordre de précision :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi \, dV = \frac{3(\rho \phi)_c^n - 4(\rho \phi)_c^{n-1} + (\rho \phi)_c^{n-2}}{2 \Delta t} V \quad (\text{II.24})$$

l'indice  $n$  désigne le pas de temps actuel et  $\Delta t = t^n - t^{n-1}$  le pas de temps. Tous les autres termes de l'Eq. (II.17) sont pris à l'instant  $t^n$ .

Après l'application de toutes les procédures de discrétisations spatiales et temporelles décrites ci-dessus à l'équation générique (II.17), on aboutit à la forme discrétisée algébrique suivante :

$$a_c \phi_c + \sum_{N_b} a_{N_b} \phi_{N_b} = b_c. \quad (\text{II.25})$$

L'ensemble de ces équations forme des systèmes linéaires (un système linéaire par degré de liberté) à matrices éparses qui sont résolus par les algorithmes itératifs précisés à la section II.5.

## II.4. Modélisation du changement de phase solide-liquide

Pour modéliser la fusion ou la solidification d'un fluide en écoulement anisotherme, nous adoptons l'approche dite « enthalpie-porosité » [11]. C'est une approche qui utilise un maillage unique pour les deux phases liquide et solide. Une variable appelée la fraction liquide  $f$  permet

de distinguer les deux phases. Deux termes sources s'ajoutent au système d'équations de conservation (Eqs. II.1-II.3). Le premier s'ajoute au terme de droite de l'équation de conservation de la quantité de mouvement (Eq. II.2) et s'écrit :

$$\int_V A \vec{U} dV \quad \text{où} \quad A = \frac{-C(1-f)^2}{f^3 + b} \quad (\text{II.26})$$

avec  $C = 1,6 \times 10^6$  et  $b = 10^{-3}$ . C'est un terme de pénalisation qui impose une vitesse nulle dans les cellules de calcul où le matériau est à l'état solide, c.à.d., lorsque  $f = 0$ . Le coefficient de pénalisation  $A$  est écrit en fonction de la fraction liquide  $f$  suivant la relation de Carman-Koseney pour un milieu poreux. Ce coefficient assure une transition progressive entre les milieux solide et liquide. Dans le cas d'un matériau pur, le front de changement de phase est extrêmement fin, et la transition se déroule sur une seule cellule de calcul dans le sens de la progression du front.

Le second terme source s'ajoute au terme de droite de l'équation de conservation de l'énergie (Eq. II.3) et s'écrit :

$$\int_V \rho L \frac{\partial f}{\partial t} dV \quad (\text{II.27})$$

où  $L$  est la chaleur latente de changement de phase. Ce terme tient donc compte de cette énergie lorsque la fraction liquide  $f$  évolue dans le volume de contrôle.

Au sein de chaque itération de l'algorithme SIMPLE, après la résolution de l'équation de la quantité de mouvement suivie de l'équation de Poisson pour la correction de la pression [8, 12], l'équation de l'énergie est résolue et la fraction liquide est mise à jour. Ces deux dernières étapes sont répétées jusqu'à ce que la variation de  $f$  devienne suffisamment petite. Si la convergence n'est pas encore atteinte pour  $\vec{U}$ ,  $p$  et  $T$ , une nouvelle itération SIMPLE démarre, sinon le calcul passe au pas de temps suivant. Un diagramme de cet algorithme est donné sur la Fig. II.2.

La résolution de l'équation de l'énergie est incluse dans les itérations de l'algorithme SIMPLE, afin de tenir compte du grand couplage qui existe entre le champ de la température et le champ de la vitesse à travers les termes de flottabilité et de pénalisation de l'équation de la quantité de mouvement. De plus, la correction de la fraction liquide est itérée avec la résolution de l'équation de l'énergie, pour maintenir le couplage entre le champ de la température et le champ de la fraction liquide.

La fraction liquide  $f$  est mise à jour à l'aide de l'algorithme « *new source* » proposé par Voller [13]. Selon cet algorithme, la nouvelle valeur de  $f$  à l'itération  $k + 1$  du processus de mise à jour dans la cellule de calcul  $c$  est donnée par :

$$f_c^{k+1} = f_c^k + \frac{\Delta t a_c^k}{\rho L V} (T_c - T_f), \quad (\text{II.28})$$

avec  $T_f$  la température de fusion du matériau, et  $a_c^k$  est le coefficient de  $T_c$  dans l'équation discrétisée (Eq. II.25) relative à la température. Cette mise à jour est suivie d'une correction des dépassements/défauts :

$$f_c^{k+1} = \begin{cases} 1 & \text{si } f_c^{k+1} > 1 \\ 0 & \text{si } f_c^{k+1} < 0. \end{cases} \quad (\text{II.29})$$

Toujours selon l'algorithme « *new source* » [13], lorsqu'il s'agit de corps pur, l'équation de l'énergie est pénalisée sur les cellules appartenant au front de changement de phase ( $0 < f_c < 1$ ) pour imposer la température de fusion  $T_f$  dans ces cellules. Cette pénalisation est réalisée en ajoutant un terme source égale à  $10^9 \times T_f$  à l'équation de l'énergie dans ces cellules uniquement. Cette pénalisation accélère considérablement la convergence pour  $f$ . Ainsi, le nombre d'itérations nécessaires pour que  $|f_c^{k+1} - f_c^k| < \text{TOL}$  peut être ramené à 1 ou 2, selon la taille des pas de temps et d'espace. La valeur de TOL est généralement fixée à  $10^{-4}$ .

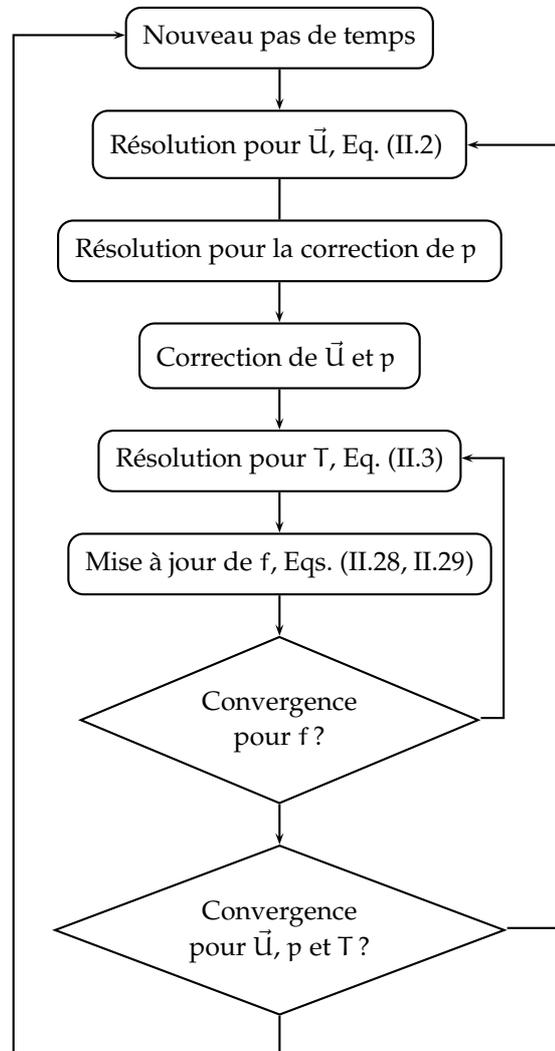


Figure II.2.: Intégration de la procédure de correction de la fraction liquide dans l'algorithme SIMPLE.

## II.5. Implémentation parallèle

L'implémentation du code Tamaris est faite en langage C++ avec une approche orientée objets. Dans sa version séquentielle, le code utilise des solveurs de Krylov (BiCGStab, GMRES), avec préconditionnement ILU à travers l'implémentation de la librairie IML++ [14].

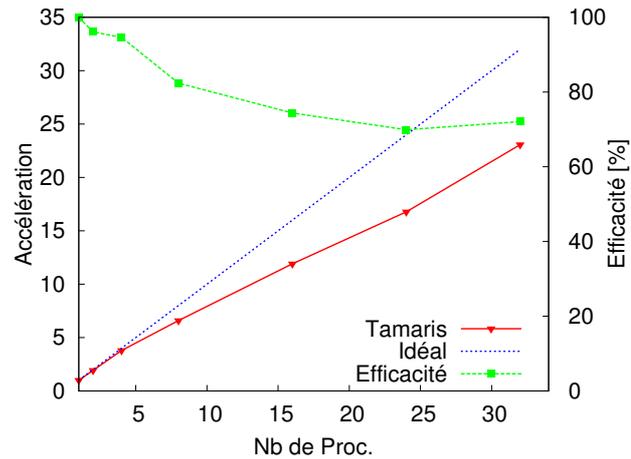
La parallélisation du code est basée sur le concept de décomposition de maillage sans chevauchement. La génération de maillage est réalisée généralement par le mailleur libre Gmsh [15] et les décompositions sont effectuées par les outils Metis [16] ou Chaco [17]. Le code Tamaris utilise la librairie parallèle Petsc [18], qui offre une multitude de solveurs optimisés pour le calcul parallèle utilisant l'interface d'échange de données MPI. Chaque partition du maillage est confiée à un seul processeur qui assemble une partie de la matrice distribuée du système linéaire avant qu'il ne soit résolu par des méthodes itératives de type Krylov, comme la méthode GMRES. La librairie Petsc fournit aussi une interface vers d'autres librairies, comme Hypre et son solveur multigrilles algébrique BoomerAMG, et elle fait l'objet d'optimisations et de développements continus. Afin de bénéficier des performances de Petsc, toutes les procédures parallélisées du code ont été implémentées à l'aide des outils fournis par cette librairie (les vecteurs distribués de stockage des variables et les appels de mise à jour des valeurs "ghost" par exemple). Toutes les tâches du code s'exécutent donc en parallèle. De plus, pour ne pas ralentir les calculs, la sauvegarde périodique des résultats intermédiaires est réalisée de façon fractionnée : chaque processeur écrit dans un fichier propre la partie des résultats dont il a la charge. Les résultats ne sont combinés que pendant la phase de post-traitement. Le code a été déployé sur le cluster Linux de l'UPPA et sur le supercalculateur Jade du CINES, où j'ai obtenu un crédit de temps de calcul pour réaliser les études détaillées dans la section VI.1. Il est prévu également de le déployer sur le futur cluster du Mésocentre Aquitain.

À ce jour, l'étude de l'accélération par la parallélisation n'a pas été poussée suffisamment loin. Elle permettra certainement d'éclairer sur les possibilités d'optimisation du code. Néanmoins, les premières études d'accélération parallèle effectuées se sont révélées très prometteuses. Nous montrons ici une étude qui a porté sur un écoulement par thermocapillarité comme celui présenté à la section A.1.7. Il s'agit d'un écoulement impliquant une grande non linéarité entre vitesse et température. Le maillage utilisé est de taille modérée ( $1,6 \times 10^5$  cellules), afin de faciliter le calcul de référence à un processeur. La Fig. II.3 donne l'accélération obtenue pour ce cas jusqu'à 32 processeurs. L'accélération reste proche de la valeur idéale jusqu'à 8 processeurs avant une détérioration relative des performances. Néanmoins, l'efficacité (l'accélération divisée par le nombre de processeurs) se stabilise autour de 75 %. Pour un maillage de taille modérée l'accélération atteint rapidement ses limites. Cette étude va se poursuivre et s'affiner dans le futur. À ce jour, la parallélisation du code a permis de réaliser des calculs nécessitant des maillages dépassant les 2 millions de cellules.

Le code Tamaris a été validé avec succès pour différentes situations d'écoulement pour lesquelles il existe des solutions de référence. Des exemples de ces études de validation sont présentés dans l'annexe A.

## II.6. Perspectives

Le développement du code Tamaris se poursuit. Les nouveaux développements interviennent le plus souvent pour répondre aux besoins suscités par les thématiques abordées dans l'équipe « Transports Multiphasiques » (TM) du laboratoire SIAME. Ainsi, la prochaine grande orientation de ces développements concernera la méthode des interfaces diffuses. En effet, dans le cadre de



**Figure II.3.** Accélération et efficacité de la parallélisation du code Tamaris pour un maillage de  $1,6 \times 10^5$  cellules.

la future thèse que je co-dirigerai à la rentrée 2011, cette méthode sera étudiée et développée dans son application aux écoulements avec changement de phase liquide-solide.

En outre, durant le futur Congé pour Recherche ou Conversion thématique (CRCT) de 6 mois que j'ai obtenu pour l'année universitaire 2011/2012, je compte développer la méthode des interfaces diffuses dans son application à la modélisation des écoulements diphasiques fluide-fluide. Ces développements permettront de réaliser des études au coeur des préoccupations de l'équipe TM, comme la modélisation des écoulements diphasiques huile et eau dans des pores, avec des applications dans le domaine pétrolier notamment, ou bien l'analyse des phénomènes de rupture et de coalescence de gouttes lors de procédés d'émulsification laminaire (voir chapitre IV).

---

---

## CHAPITRE III

---

### *Mélange chaotique thermique*

Le mélange par advection chaotique appliqué à des objectifs d'intensification des transferts thermiques est un procédé riche en phénomènes physiques intéressants. Je l'ai abordé dans mes recherches, avec la préoccupation de contribuer à en transférer l'usage vers les applications industrielles du macro-mélange. C'est une activité de recherche que je mène en collaboration avec mon collègue Y. Le Guer et elle a été initialement soutenue par l'IFP Pau. Elle a également impliqué les stages recherche de Master de P.-A. Cazalet (2006), A. Aras (2007), D. Samba (2008) et A. Achhoud (2009).

A ce jour cette thématique a donné lieu aux publications suivantes : [A15, A13, A9, A8, A4, A11, C11, C10, C9, C8, CN14, CN10, CN6] (voir liste I.4.3).

#### III.1. Introduction

##### III.1.1. Le mélange

Le mélange de fluides est une opération très commune, que ce soit dans la vie courante et l'usage domestique ou bien dans le domaine industriel où cette opération est présente dans une majorité de procédés. Parmi les industries qui ont recours à des opérations de mélange, on peut citer les industries agroalimentaires, chimiques, pétrolières, pharmaceutiques, cosmétiques, biotechnologiques, de transformation des polymères, etc. Le mélange est aussi un phénomène physique rencontré couramment dans la nature, comme par exemple la dispersion de polluants et autres particules dans l'atmosphère, le mélange des courants marins et le transport du plancton dans les océans ou encore le mélange de magmas dans les couches souterraines.

Le mélange peut concerner des scalaires (concentration ou température), ou plusieurs fluides ou produits entre eux (poudres, particules ou polymères fondus). Dans chacune des situations, une stratégie de mélange spécifique doit être mise au point, selon les mécanismes physiques mis en jeu dans chaque procédé industriel. Cette diversité de situation est reflétée par le grand nombre de mélangeurs différents disponibles sur le marché. Une bonne compréhension des mécanismes physiques rencontrés est donc la clé pour concevoir un procédé de mélange efficace. Dans un procédé de mélange, le point de départ est un état dit ségrégué (deux fluides introduits dans un réservoir par exemple), et l'état final est un état dit « homogène ». Le degré de cette

homogénéité finale est lié à l'efficacité du procédé de mélange, ou bien à un degré jugé suffisant pour l'application considérée. Un état de mélange peut être considéré comme homogène à une certaine échelle spatiale, tout en étant non homogène lorsqu'il est observé à une échelle inférieure (une émulsion par exemple).

Le mélange comporte en réalité deux phases. La première phase est une phase d'agitation, où les différentes zones du fluide sont réorientées, étirées et repliées, ce qui augmente le niveau du gradient du scalaire dans le fluide, par la création de striations de plus en plus fines. La seconde phase est la phase de mélange proprement dite, où l'action de diffusion (moléculaire ou thermique) tend à lisser ces gradients. Ainsi, le but du mélange est souvent d'éliminer les gradients de concentration ou de température par l'intensification des transferts de quantité de mouvement, de masse ou de chaleur, soit par des écoulements turbulents, soit par l'advection chaotique laminaire.

Le mécanisme d'intensification des transferts par la turbulence, repose sur la présence de tourbillons (ou vortex) multiples qui sont créés dans l'écoulement et qui se combinent ou disparaissent continuellement. Les grandes fluctuations générées dans le champ des vitesses causent les étirements et les repliements des particules de fluide nécessaires au mélange. Néanmoins, atteindre dans l'écoulement un niveau de turbulence suffisant n'est pas toujours aisé, notamment dans le cas de fluides très visqueux pour lesquels le recours à des écoulements turbulents serait très énergivore. De plus, les propriétés ou la texture de certains fluides délicats pourraient être dégradées par un écoulement trop cisailant, comme certains fluides biologiques ou fluides polymériques aux longues chaînes moléculaires. Dans de telles situations, le recours au mélange par advection chaotique est une meilleure alternative.

### III.1.2. Le mélange par advection chaotique

En 1984, H. Aref a publié un article [19] dans lequel il formule une nouvelle notion, celle du mélange par advection chaotique. Il y décrit un mécanisme permettant la génération de trajectoires lagrangiennes extrêmement complexes au sein d'un fluide, à partir d'un écoulement euclidien relativement simple [20–22]. Les écoulements considérés sont laminaires, voire non inertiels (écoulements de Stokes). Au sein de ces écoulements, deux particules initialement voisines voient leurs positions s'écarter et la distance entre elles croître de manière exponentielle. Cette propriété<sup>1</sup> fait partie des critères caractérisant un mélange efficace et peut donc être exploitée afin de mélanger des fluides très visqueux par advection chaotique. Néanmoins, le mécanisme d'advection chaotique ne peut pas être obtenu au sein d'un écoulement bidimensionnel (2D) stationnaire car, au sein de celui-ci, la forme des lignes de courant est fixe dans le temps et le fluide reste emprisonné dans les différentes zones délimitées par ces lignes de courants fermées. Par conséquent, l'étirement des particules fluides est faible et le mélange se fait principalement par diffusion perpendiculairement aux interfaces entre les différentes zones. Or, ce processus est très lent. L'advection chaotique repose donc sur des écoulements instationnaires et/ou tridimensionnels (3D) pour lesquels des motifs différents de lignes de courant se superposent dans le temps (ou à différentes positions pour le cas 3D). En se croisant ainsi, ces lignes de courant favorisent la circulation du fluide entre les différentes zones de l'écoulement et, par conséquent, le mélange. En suivant successivement différentes lignes de courants, les particules fluides subissent des phases d'étirement et de repliement qui génèrent des striations dans le champ du scalaire mélangé, augmentant son gradient et par conséquent l'action de la diffusion.

Dans un mélangeur, l'efficacité du mécanisme d'advection chaotique obtenu par modulation temporelle ou spatiale dépend de plusieurs paramètres, parmi eux :

1. La mesure de cette propriété peut être formalisée et mesurée par l'exposant de Lyapunov.

- **La nature de l'écoulement** : ouvert ou fermé. Les écoulements fermés sont rencontrés dans les mélangeurs dits « batch », comme les cuves agitées. Un écoulement ouvert se caractérise par le déplacement continu du fluide d'une entrée vers une sortie (écoulement en conduite par exemple). Dans ce dernier cas, l'advection chaotique se montre très efficace pour réduire la distribution des temps de séjours des particules de fluide dans le mélangeur [23–25]. Cette propriété s'avère très intéressante lorsqu'il s'agit de mélange associé au transfert thermique ou à la réaction chimique [26].
- **La diffusion** ou la valeur de la diffusivité moléculaire ou thermique du fluide, joue un rôle important dans le mélange, en lissant les gradients des scalaires (concentration ou température) créés par l'agitation.
- **Le mode passif ou actif de génération de l'écoulement advectif**. Lorsque l'écoulement est généré par le mouvement d'éléments mobiles (généralement des parois), on parle de mode actif. En mode passif (parois immobiles), l'advection chaotique est obtenue par un arrangement adéquat dans l'espace des frontières physiques du domaine d'écoulement, comme, par exemple, l'alternance de tourbillons de Dean dans des coudes successifs le long d'une canalisation [27], ou l'insertion d'éléments provoquant des réorientations de l'écoulement dans une conduite [28, 29]. Le mode actif offre un meilleur contrôle de l'écoulement à travers le choix des périodes, des déphasages, des amplitudes et des directions des mouvements relatifs des parois. Néanmoins, le mode passif permet une mise en œuvre plus simple, surtout pour les faibles dimensions, ce qui explique son succès dans le domaine de la microfluidique.
- **La rhéologie du fluide** influe sur les formes de l'écoulement, notamment dans les zones cisailées, et par conséquent, elle a un impact sur l'efficacité du mélange [30]. Une grande partie des fluides impliqués dans les procédés industriels sont à rhéologie complexe et peuvent également subir des variations substantielles de leur viscosité, avec la température, lors de procédés incluant des réchauffements ou des refroidissements.

Les nombres de Reynolds caractéristiques des écoulements utilisés pour le mélange par advection chaotique sont souvent très bas. De ce fait, ce concept a eu un grand succès en microfluidique compte tenu des très faibles dimensions caractéristiques de ces applications [31–37]. Ainsi, un nombre important de procédés et dispositifs de mélange a été développé pour ce domaine, avec des applications nombreuses en chimie, biologie et en médecine. Pourtant, pour les procédés incluant des volumes de fluide plus importants (macrofluidique), le recours au mélange chaotique dans les industries traditionnelles n'est pas très développé, malgré des potentialités certaines [38–40]. En effet, le mélange chaotique permettrait de réduire les coûts énergétiques et de répondre à des besoins spécifiques, comme pour le cas de réactions chimiques très exothermiques par l'élimination des points chauds.

Mon activité de recherche dans ce domaine se focalise sur le macro-mélange par advection chaotique et particulièrement dans ses applications liées à l'amélioration des transferts thermiques.

### III.1.3. Le mélange chaotique thermique

Depuis les années 1990, c'est-à-dire quelques années après l'introduction de la notion d'advection chaotique, plusieurs études se sont intéressées à l'utilisation des écoulements d'advection chaotique pour l'amélioration des transferts thermiques. Deux classes principales d'écoulements ont été considérées : ceux impliquant des éléments rotatifs comme des cylindres [38, 41–50] ou des éléments en translation [51, 52] (mode actif) et ceux impliquant une succession de conduites courbées [39, 40, 53–60] (mode passif).

Pour la première classe d'écoulements, la totalité des études sont numériques sauf celle concer-

nant le mélange de magmas [49], et malgré l'efficacité prouvée numériquement de ces procédés de mélange et les possibilités qu'ils peuvent offrir dans le domaine industriel, aucune étude expérimentale n'a été réalisée pour confirmer cette efficacité. Cela est probablement dû à la complexité technique que pourrait engendrer la mise en œuvre du chauffage (ou du refroidissement) sur des parois mobiles.

La seconde classe d'écoulement correspond à des procédés de mélange en continu avec des écoulements 3D ne nécessitant pas de paroi mobile. De ce fait, leur équipement de dispositif chauffant (ou refroidissant) est plus aisé, ce qui facilite leur étude expérimentale [39, 53–55, 58]. Néanmoins, à notre connaissance, aucune utilisation industrielle de ces procédés continus à l'échelle macroscopique n'existe aujourd'hui. Il est important de préciser que ces écoulements sont efficaces uniquement pour des nombres de Reynolds modérés ( $40 < Re < 200$ ), pour lesquels les tourbillons secondaires de Dean, qui assurent le transport transversal, sont présents dans les coudes. De ce fait, les écoulements de Dean ne sont pas utiles pour le mélange des fluides très visqueux (écoulements proches du régime de Stokes). Dans ces deux classes d'écoulement, la chaleur est communiquée au fluide à travers les parois, ce qui est fréquent dans les applications industrielles.

## III.2. Mélange chaotique thermique en géométrie fermée

Le mélange chaotique thermique à l'échelle macroscopique présente donc d'intéressantes perspectives de développement et d'innovation pour en favoriser l'usage industriel dans les domaines du génie des procédés et du génie chimique. C'est aussi un domaine qui reste peu étudié. Dans ce qui suit, j'expose les études que j'ai menées dans le domaine du mélange chaotique thermique, conjointement avec mon collègue Yves Le Guer du SIAME, en montrant les points forts et les apports de ce travail.

### III.2.1. Mélangeur modèle : mélangeur à deux barreaux

Le mélangeur choisi pour réaliser ces études sur le mélange chaotique thermique est un mélangeur doté d'une géométrie simple. Il s'agit de deux barreaux cylindriques à section circulaire et du même diamètre maintenus verticalement dans une cuve circulaire également (Fig. III.1). Les barreaux et la cuve peuvent être chauffés ou refroidis en surface et peuvent tourner autour de leurs axes de révolution respectifs. Les rotations peuvent être continues ou alternées et dans les deux sens. Ce dispositif serait facile à fabriquer et à nettoyer (surface lisse) et offre un volume utile important. Il pourrait être utilisé dans un procédé « batch » ou continu. Dans ce dernier cas, cette géométrie permet un écoulement axial avec une faible perte de charge comparée aux mélangeurs statiques<sup>2</sup>. Dans le cadre des études que nous avons menées, seule la section du mélangeur est considérée et l'attention est donc portée sur le mélange transversal, en négligeant pour le moment les effets du déplacement axial du fluide supposé se dérouler à une vitesse suffisamment faible comparée à la vitesse de rotation des parois.

Cette géométrie est dérivée de la géométrie classique du cylindre excentré générant l'écoulement connu sous le nom de « *Journal Bearing Flow* » [38, 41, 42, 44, 63, 64]. Elle présente aussi des similitudes avec le modèle idéalisé introduit par H. Aref sous la dénomination « *blinking vortex* » [19, 65]. D'autres auteurs se sont intéressés à l'écoulement généré dans cette géométrie [66–68] et notamment pour des applications de mélange isotherme [69].

2. Nous avons utilisé une géométrie relativement similaire dans le cadre de la fabrication d'émulsions très concentrées huile dans eau, (sans mélange chaotique) et pour les deux cas « batch » [61] et continu [62] (voir le chapitre IV).

La géométrie de l'écoulement étudié est donc bidimensionnelle (Fig. III.1). Elle est caractérisée par deux paramètres adimensionnels : le rapport des rayons des barreaux et de la cuve ( $R_1$  ou  $R_2$ )/ $R_3$  fixé à  $1/5$  et l'excentricité adimensionnelle  $e = \varepsilon/R_3$  généralement fixée à  $e = 0.5$  mais dont l'influence a été étudiée.

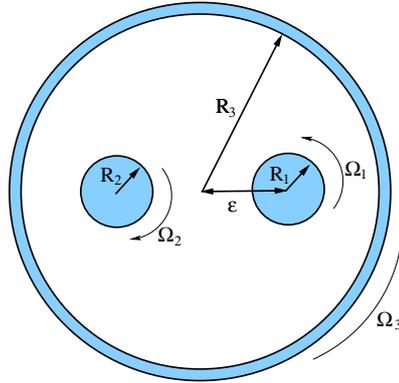


Figure III.1.: Géométrie du mélangeur à deux barreaux tournants.

### III.2.2. Conditions d'écoulement

L'advection chaotique dans ce domaine fermé bidimensionnel ne peut être obtenue que par la modulation temporelle de la vitesse de rotation des barreaux et/ou de la cuve. Deux types de modulation (que nous appelons aussi protocoles d'agitation) ont été considérés : la modulation continue (notée MC) où la vitesse des parois mobiles suit une variation en sinus carré entre deux valeurs sans passer par zéro et la modulation non continue ou alternée (notée ALT), pour laquelle les barreaux et la cuve s'arrêtent alternativement. Les valeurs de la vitesse angulaire maximale  $\Omega^{max}$  des barreaux et de la cuve sont différentes, de façon à obtenir la même vitesse tangentielle sur ces deux parois. Les deux formes de modulation sont représentées sur la Fig. III.2 et décrites par les équations suivantes :

Modulation continue (MC) :

$$\Omega_i = \Omega_i^{max} \left( 1 - \frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \right) \quad (III.1)$$

Modulation alternée (ALT) :

$$\Omega_i = \Omega_i^{max} \left( 1 - 2 \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \right) \quad \text{si } \Omega_i < 0 \Rightarrow \Omega_i = 0 \quad (III.2)$$

où  $i$  indique la  $i^{\text{ème}}$  paroi, et  $\tau$  la période de modulation.

En variant les sens de rotation des barreaux et de la cuve, trois configurations d'écoulement sont possibles (les deux barreaux tournent en phase). Elles sont représentées sur le Tab. III.1 où le signe (+) indique un sens de rotation antihoraire et le signe (-) le sens horaire.

Initialement, le fluide est au repos à une température uniforme  $T_i$ . A partir de l'instant  $t = 0$ , les conditions dynamiques décrites par les Eqs. (III.1 ou III.2) sont appliquées. D'un point de vue thermique, soit une température uniforme et constante est appliquée aux parois (condition de type Dirichlet), soit un flux thermique constant (condition de type Neumann, cf. section III.3.5).

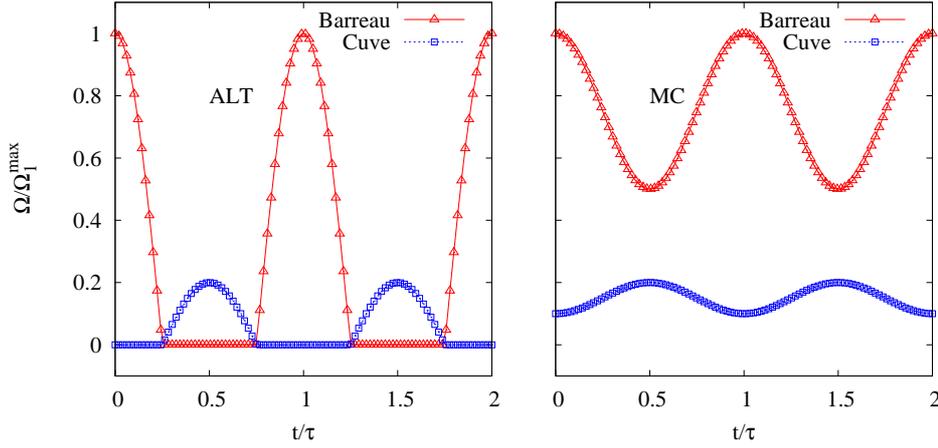


Figure III.2.: Modulation temporelle de la vitesse angulaire des barreaux et de la cuve pour les cas alterné (ALT) et continu (MC).

Configuration	Barreau 1	Barreau 2	Cuve
A	(+)	(-)	(+)
B	(+)	(+)	(+)
C	(-)	(-)	(+)

Table III.1.: Les trois configurations d'écoulement possibles selon les sens de rotation des parois mobiles.

### Paramètres de l'écoulement

Le mélange par advection chaotique est efficace aux faibles valeurs du nombre de Reynolds. Pour nos études en macro-mélange, nous avons choisi un fluide modèle similaire à une huile très visqueuse qui se caractérise aussi par une faible diffusivité thermique. L'écoulement dans le mélangeur serait donc caractérisé par : un bas nombre de Reynolds, l'instationnarité des conditions aux limites dynamiques, un haut nombre de Prandtl, et la thermodépendance éventuelle de la viscosité du fluide. Pour faire apparaître l'importance relative de chacune de ces caractéristiques, nous récrivons les équations décrivant l'écoulement et le transfert thermique sous forme adimensionnelle. Pour ce faire, nous adoptons une longueur caractéristique  $L = 2(R_3 - R_1)$ , un temps et une vitesse caractéristiques notés respectivement  $\tau$  et  $V$  et qui correspondent à la période de modulation et à la vitesse tangentielle maximale  $V = |\Omega_3^{\max}|R_3 = |\Omega_1^{\max}|R_1$ . L'écart de température de référence  $\Delta T_{\text{ref}}$  est pris comme le plus grand écart présent initialement dans le mélangeur dans le cas d'une température imposée à la paroi. Dans le cas d'un flux thermique imposé  $\dot{q}$ , l'écart de température de référence est  $\Delta T_{\text{ref}} = \frac{\dot{q} L}{\lambda}$ . La température adimensionnelle s'écrit donc :

$$T^* = \frac{T - T_{\text{ref}}}{\Delta T_{\text{ref}}}. \quad (\text{III.3})$$

avec  $T_{\text{ref}}$  la température minimale (équivalente à la température initiale  $T_i$  pour un procédé de réchauffement et à la température de paroi  $T_w$  pour un procédé de refroidissement). De ce fait,  $0 \leq T^* \leq 1$  quel que soit le procédé. La pression de référence est  $\eta_0 V/L$  avec  $\eta_0 = k_0 (\dot{\gamma})^{n-1}$  la viscosité dynamique à  $T_{\text{ref}}$ . Les équations de continuité, de conservation de la quantité de mou-

Nombre de Reynolds	$Re_{PL} = 1.66$
Nombre de Prandtl	$Pr_{PL} = 10^4$
Nombre de Péclet	$Pe = 1,6 \times 10^4$
Nombre de Strouhal	$2.5 \times 10^{-2} \leq Sl \leq 1.7 \times 10^{-1}$
Nombre de Pearson	$0 \leq B \leq 5$
Diffusivité thermique	$\alpha = 1.5 \times 10^{-7} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$

Table III.2.: Nombres adimensionnels de l'écoulement et propriétés du fluide.

vement et de l'énergie s'écrivent sous forme adimensionnelle :

$$\hat{\nabla} \cdot \hat{\mathbf{v}} = 0 \quad (\text{III.4})$$

$$Re \, Sl \, \partial_{\hat{t}} \hat{\mathbf{v}} + Re \, (\hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\nabla}) \hat{\mathbf{v}} = -\hat{\nabla} \hat{p} + \hat{\nabla} \cdot \left( \frac{\eta}{\eta_0} (\hat{\nabla} \hat{\mathbf{v}} + (\hat{\nabla} \hat{\mathbf{v}})^t) \right) \quad (\text{III.5})$$

$$Pe \, Sl \, \partial_{\hat{t}} T^* + Pe \, \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\nabla} T^* = \hat{\nabla}^2 T^* + Br \, 2 \frac{\eta}{\eta_0} \hat{\mathbf{D}} : \hat{\mathbf{D}} \quad (\text{III.6})$$

où apparaissent :

$$Re = \frac{\rho V L}{\eta_0}, \quad Sl = \frac{L}{\tau V}, \quad Pe = Pr \, Re = \frac{c_p \rho V L}{\lambda}, \quad Br = \frac{\eta_0 V^2}{\lambda \Delta T_{ref}}$$

respectivement les nombres de Reynolds, Strouhal, Péclet et Brinkman, avec Pr le nombre de Prandtl.

Dans le cas d'un fluide non newtonien, en considérant  $V/L$  comme une valeur de référence du taux de cisaillement, nous pouvons écrire un nombre de Reynolds généralisé à la loi de puissance comme :

$$Re_{PL} = \frac{\rho V^{2-n} L^n}{k_0} \quad (\text{III.7})$$

ainsi qu'un nombre de Prandtl généralisé :

$$Pr_{PL} = \frac{c_p k_0}{\lambda} \left( \frac{V}{L} \right)^{n-1} \quad (\text{III.8})$$

Les valeurs de ces nombres adimensionnels relatives aux écoulements étudiés ici sont données dans le Tab. III.2.

La valeur du  $Re_{PL}$  est fixée à 1,66, quelle que soit la rhéologie du fluide. Cette valeur indique un écoulement hautement laminaire. La valeur relativement élevée du nombre de Prandtl  $Pr_{PL} = 10^4$  indique que la couche limite thermique va être beaucoup plus fine que la couche limite dynamique. De plus,  $Pe = 16600$  qui apparaît dans l'équation de l'énergie (Eq. III.6) indique que le temps caractéristique de la diffusion thermique est 16600 fois plus grand que celui de l'advection à l'échelle du mélangeur. Il est clair, dans ces conditions, que la diffusion thermique aura un rôle sur une échelle très limitée dans l'espace, d'où le besoin d'une advection efficace capable de créer des striations fines de température dans le fluide, afin qu'elles puissent être lissées par conduction.

Le nombre de Strouhal qui apparaît dans les Eqs. (III.5) et (III.6) a une valeur maximale de  $10^{-1}$ . Il en résulte que les effets inertiels ne sont pas absents de l'écoulement, qui est donc loin d'un régime de Stokes. Ceci est d'autant plus vrai pour un  $Re > 1$ , puisque les deux nombres sont multipliés ensemble devant le terme instationnaire de l'Eq. (III.5). Ceci justifie la résolution des équations complètes de Navier-Stokes pour modéliser cet écoulement.

En introduisant la température adimensionnelle dans l'Eq. (II.9), nous pouvons écrire l'indice de consistance comme :

$$k = k_0 e^{-b \Delta T_{\text{ref}} T^*} = k_0 e^{-B T^*} \quad (\text{III.9})$$

où

$$B = b \Delta T_{\text{ref}} = -\frac{d}{dT^*} \left( \ln \frac{k}{k_0} \right) \quad (\text{III.10})$$

est connu comme le nombre de Pearson [70]. Il caractérise le degré de thermodépendance de la viscosité et apparaît dans les Eqs. (III.5) et (III.6), puisque  $\eta/\eta_0 = e^{-B T^*}$ .

Enfin, le nombre de Brinkman  $Br$  permet de juger de l'importance de la dissipation visqueuse de l'écoulement. Sa valeur dans notre cas est  $Br \simeq 10^{-3}$  pour  $\Delta T_{\text{ref}} = 1$ . Cette valeur indique que l'apport de la dissipation visqueuse est négligeable dans l'équation de l'énergie (Eq. III.6).

### III.2.3. Indicateurs de qualité de mélange

Il existe une multitude d'indicateurs mesurant la qualité du mélange [71–74], dont plusieurs sont dépendants de l'écoulement étudié. Parmi les indicateurs que nous avons adoptés pour nos analyses, il y a la température moyenne adimensionnelle :

$$T_m^* = \frac{1}{V_f} \int_{V_f} T^* dV \quad (\text{III.11})$$

où  $V_f$  est le volume du fluide, et l'écart-type (ou la déviation standard)  $\sigma$  de la température adimensionnelle  $T^*$  :

$$\sigma = \left[ \frac{1}{V_f} \int_{V_f} (T^* - T_m^*)^2 dV \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III.12})$$

Ces deux quantités sont des quantités instationnaires.

L'écart-type indique le degré d'homogénéisation de la température, tandis que  $T_m^*$  peut être interprétée comme le ratio de la quantité d'énergie apportée ou soustraite du fluide à l'instant  $t$  du mélange, par rapport à une énergie totale nécessaire à une variation de température de  $\Delta T_{\text{ref}}$ , puisque :

$$\begin{aligned} E(t) &= \int_{V_f} \rho c_p (T(t) - T_{\text{ref}}) dV = \rho c_p \left( \int_{V_f} T(t) dV - T_{\text{ref}} V_f \right) \\ &= \rho c_p V_f (T_m(t) - T_{\text{ref}}) = \rho c_p V_f T_m^*(t) \Delta T_{\text{ref}} \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

d'où :

$$T_m^*(t) = \frac{E(t)}{\rho c_p V_f \Delta T_{\text{ref}}} \quad (\text{III.14})$$

Un état bien mélangé serait donc caractérisé par un écart-type qui tend vers 0 et une température moyenne  $T_m^*$  qui tend vers 1. Afin de comparer plusieurs situations de mélange, nous avons introduit un nouvel indicateur qui combine ces deux informations :

$$A_{T\sigma} = \frac{1}{t_{\text{final}}} \int_0^{t_{\text{final}}} \frac{T_m^*}{\sigma} dt \quad (\text{III.15})$$

Un mélange plus efficace aura donc une valeur de  $A_{T\sigma}$  plus élevée pour la même durée  $t_{\text{final}}$ .

L'approche utilisée dans le cadre de cette étude est l'approche numérique. Elle présente l'avantage de donner un accès facile aux statistiques très détaillées du champ de la température et de permettre une étude paramétrique aisée. Le code utilisé est le code Tamaris (chapitre II) et le maillage utilisé est montré sur la Fig. III.3. Sa taille a été choisie après une minutieuse étude d'indépendance des résultats à la taille du maillage.

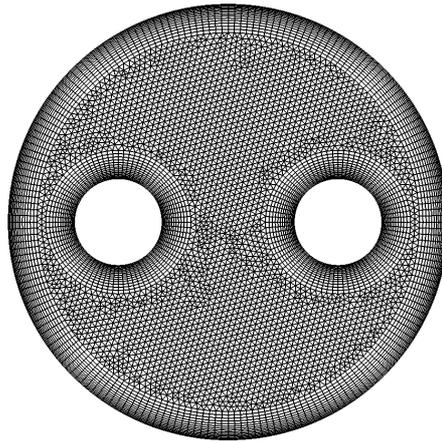


Figure III.3.: Maillage du domaine de calcul à l'intérieur du mélangeur (10680 cellules).

### III.3. Quelques résultats pour l'écoulement de référence

Nous présentons ici quelques résultats parmi les plus marquants concernant un écoulement que nous qualifions de « référence » [48]. Il s'agit de l'écoulement d'un fluide newtonien, non thermodépendant, avec une température imposée à la paroi et lors d'un procédé de réchauffement (dans ces conditions, il n'y a pas de différence physique entre réchauffement et refroidissement).

#### III.3.1. Effet du protocole d'agitation

Les protocoles d'agitation MC et ALT sont comparés à un protocole de mélange sans aucune modulation, noté SM (c'est-à-dire que barreaux et cuve tournent à des vitesses constantes), pour la configuration d'écoulement C du Tab. III.1. L'évolution des indicateurs  $T_m^*$  et  $\sigma$  (Eqs. III.11 et III.12) est donnée sur la Fig. III.4. Il y apparaît clairement qu'une meilleure homogénéisation est obtenue avec le protocole de rotation alternée ALT, alors que les résultats du protocole MC ne s'écartent que de très peu de ceux du protocole SM. L'évolution de  $\sigma$  devient rapidement exponentielle pour les trois cas avec des taux de décroissance différents. L'évolution de  $T_m^*$  est asymptotique vers la valeur 1.

Ces résultats statistiques sont reflétés par l'examen du champ de la température après un temps de mélange  $t = 4 \tau$  (Fig. III.5). Des zones encore froides de non mélange (qui peuvent s'apparenter à des tores de KAM) apparaissent clairement pour les protocoles SM et MC, alors qu'elles ont été détruites par le protocole ALT.

Nous décrivons, dans la section suivante, les mécanismes de mélange impliqués dans ces protocoles et qui expliquent les différences observées.

#### III.3.2. Topologies instationnaires de l'écoulement et mécanismes du mélange

Une description complète des différents motifs d'écoulement qui peuvent avoir lieu dans le mélangeur peut être trouvée dans notre publication [A9]. Nous nous contentons ici de dresser les

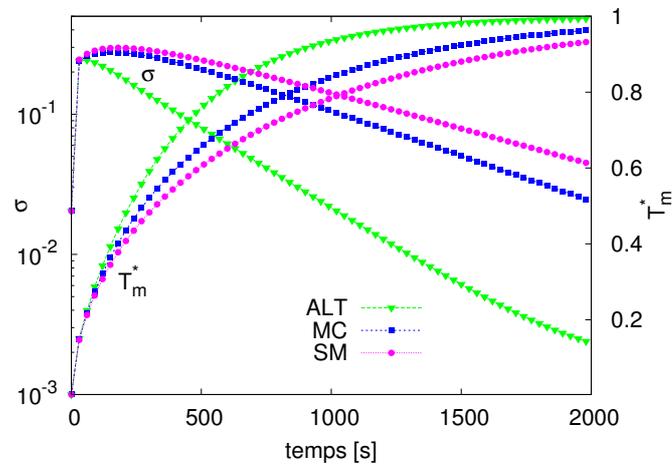


Figure III.4.: Evolution de l'écart-type et de la moyenne de la température pour une configuration d'écoulement C et trois protocoles d'agitation SM, MC et ALT (voir Fig. III.2), avec  $\tau = 30$  s.

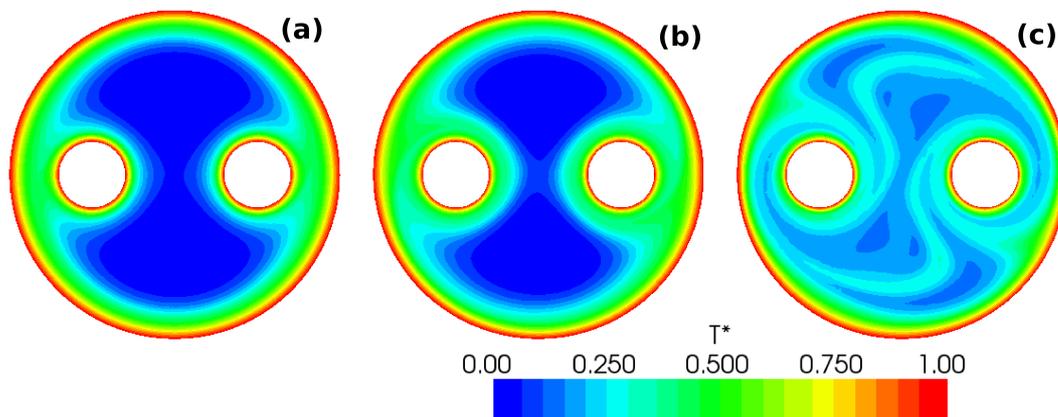
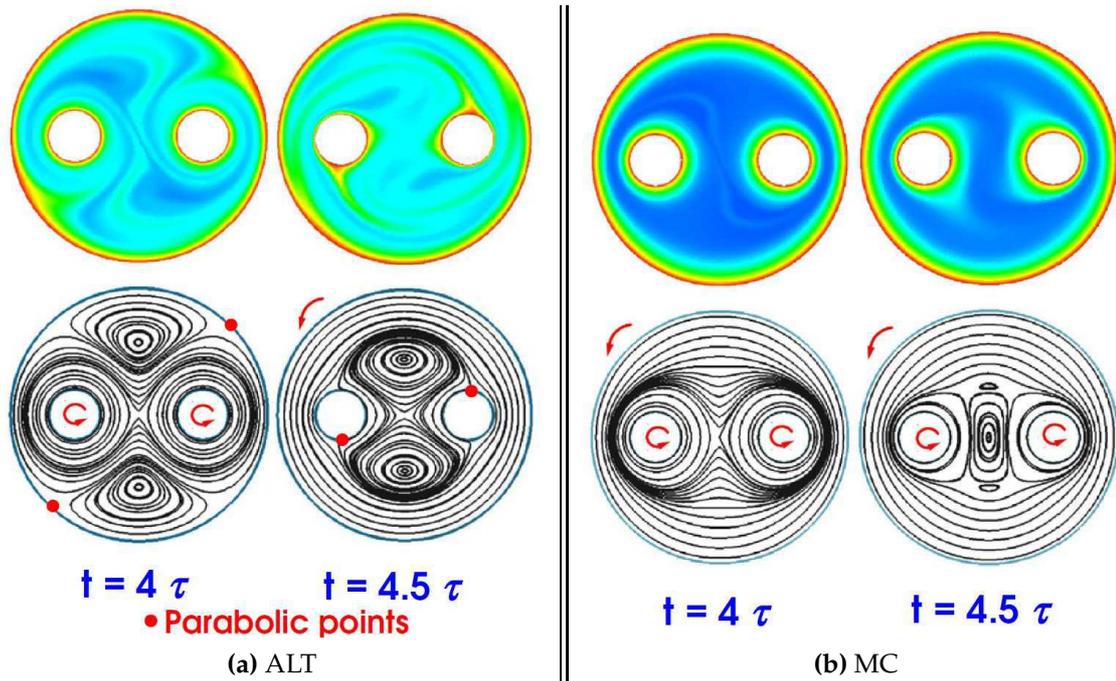


Figure III.5.: Champ de la température adimensionnelle à  $t = 4\tau$  pour une configuration d'écoulement C et trois protocoles d'agitation : (a) SM (a), (b) MC et (c) ALT ( $\tau = 30$  s).

principales caractéristiques de l'écoulement. Sur la Fig. III.6, on peut voir les lignes de courant et le champ de température correspondant à deux instants clés de la même période pour les deux protocoles MC et ALT et la configuration d'écoulement B.



**Figure III.6.**: Champ des températures et ligne de courant à deux instants différents d'une même période pour les protocoles d'agitation ALT (a) et MC (b). Configuration d'écoulement B et  $\tau = 30$  s.

Au premier instant ( $t = 4\tau$ ), pour le protocole ALT (Fig III.6(a)), les barreaux sont en rotation alors que la cuve est à l'arrêt. Au même instant, pour le protocole MC (Fig III.6(b)), les barreaux tournent à leur maximum de vitesse, alors que la cuve est à son minimum, sans être à l'arrêt. A l'instant suivant ( $t = 4,5\tau$ ), la situation s'inverse entre barreaux et cuve.

Pour le protocole MC, on observe que des lignes de courant parallèles aux parois sont toujours présentes quel que soit l'instant, puisque ces parois ne sont jamais à l'arrêt. Pour le protocole ALT, les parois à l'arrêt ne sont pas entourées de lignes de courant et il s'y forme des points paraboliques (marqués par des points sur la Fig. III.6(a)), à partir desquels le fluide se dirige, en suivant une ligne séparatrice, vers l'intérieur du mélangeur<sup>3</sup>. Il en résulte, sur le champ des températures, l'apparition de filaments (courants) de fluide chaud issus de ces points paraboliques et orientés vers le fluide plus froid au centre du mélangeur.

À l'inverse, pour le protocole MC, la rotation continue de la paroi ne permet pas la formation de ces points paraboliques, de ce fait, la présence des lignes de courant parallèles à la paroi joue le rôle « d'isolant », empêchant le fluide chauffé au niveau des parois d'être transporté vers l'intérieur du mélangeur. Ceci explique les meilleures performances du protocole de rotation alternée (ALT).

Cet effet « isolant » des parois en rotation a été observé également par Gouillart et al. [75–77], dans le cas du mélange d'une concentration scalaire : une tâche d'encre, par exemple, présente initialement au centre d'un mélangeur cylindrique. Ils ont remarqué que la mise en rotation de l'enceinte périphérique isolait le fluide au centre et améliorait l'homogénéisation du scalaire. Puisque

3. On observe aussi des points de stagnation, pour lesquels le sens du fluide est inverse (vers la paroi), mais leur rôle dans le mélange chaotique thermique n'est pas important.

dans notre cas de mélange thermique, la source du scalaire (la température) est située au niveau des parois, l'effet isolant de la rotation de celles-ci est à éviter.

Le mécanisme du mélange avec le protocole ALT peut être décomposé en quatre phases :

**Phase 1** : pendant la seconde moitié du temps de rotation des barreaux, des filaments de fluide chaud sont extraits de la surface de la cuve à l'arrêt (Fig. III.6(a), gauche).

**Phase 2** : la cuve se met en mouvement et commence par plier les filaments chauds précédemment créés par la rotation des barreaux.

**Phase 3** : la rotation de la cuve atteint son maximum de vitesse, des points paraboliques sont créés sur la surface des barreaux à l'arrêt, d'où des filaments chauds sont extraits (Fig. III.6(a), droite).

**Phase 4** : les barreaux se mettent en mouvement et plient les filaments de fluides chauds créés par la rotation de la cuve. Démarre de nouveau la phase 1.

Cette succession de création de filaments de fluide chaud et leur pliage crée des striations du scalaire (température) dans le fluide. Ces striations sont progressivement lissées par la diffusion, de sorte qu'apparaissent dans le fluide des motifs autosimilaires (ils seront décrits à la section III.3.4).

Le mécanisme de mélange pour le protocole MC est beaucoup plus simple (Fig. III.6(b)), puisque le fluide chaud reste confiné entre les parois et lignes de courant qui leur sont parallèles. Le seul changement de topologie notable est la transformation du point hyperbolique central ( $t = 4 \tau$ ) en un point elliptique ( $t = 4.5 \tau$ ), mais cela n'a pas beaucoup d'impact sur le transport thermique.

### III.3.3. Effets de la configuration de l'écoulement et de la taille de la période

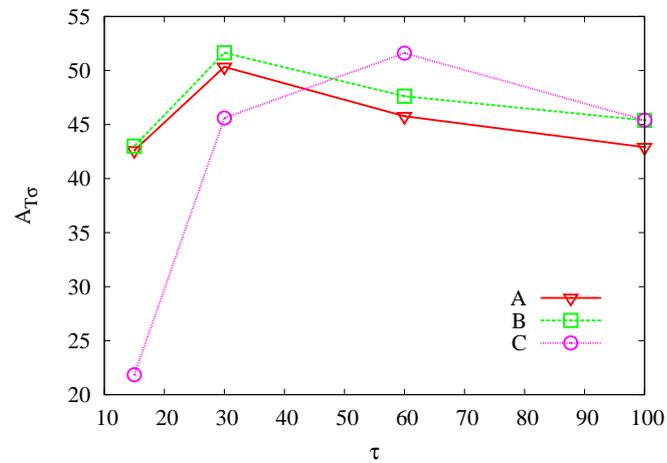
Ces deux effets sont examinés ensemble sur la Fig. III.7, à l'aide du critère global  $A_{T\sigma}$  (Eq. III.15). En utilisant le protocole d'agitation ALT, les trois configurations d'écoulement du Tab. III.1 ont été comparées pour quatre valeurs de la période de modulation. On peut résumer les résultats obtenus de la façon suivante :

- Pour les périodes courte ( $\tau = 15$  s) et longue ( $\tau = 100$  s), aucune configuration n'est à son optimum.
- Quelle que soit la période, la configuration A donne le moins bon résultat.
- Les meilleurs résultats sont donnés par les configurations B pour  $\tau = 30$  s et C pour  $\tau = 60$  s.

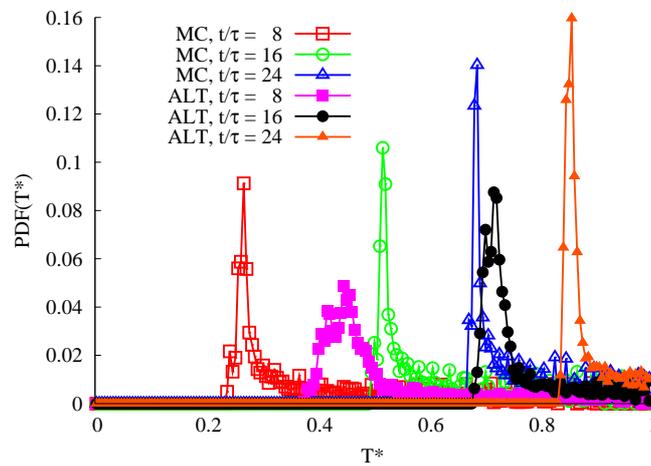
La taille de la période ne devrait être ni trop courte, afin d'étirer suffisamment les filaments du fluide, ni trop longue, afin de favoriser une alternance fréquente des motifs de l'écoulement.

### III.3.4. PDF de la température et motifs autosimilaires

Les fonctions de distribution de la probabilité (PDF) du scalaire température donnent des informations précieuses sur le processus du mélange et sur l'évolution du champ scalaire. Ces PDF sont tracées sur la Fig. III.8 pour les protocoles ALT et MC au même instant pour différentes périodes. On observe que les PDF ont des pics qui se déplacent avec le temps vers des valeurs de  $T^*$  plus élevées, tout en augmentant leur hauteur. Les pics du protocole MC sont plus hauts que ceux du protocole ALT, mais ils sont situés à des valeurs de plus faible  $T^*$ . Cela traduit l'existence des zones de non mélange où se trouve un fluide froid, comme celles observées sur la Fig. III.5(b).



**Figure III.7.**: L'indicateur composite de mélange  $A_{T\sigma}$  en fonction de la taille de la période, pour les différentes configurations d'écoulement du Tab. III.1 et pour le protocole ALT. La durée totale de l'analyse est  $t_{\text{tot}} = 1600$  s.

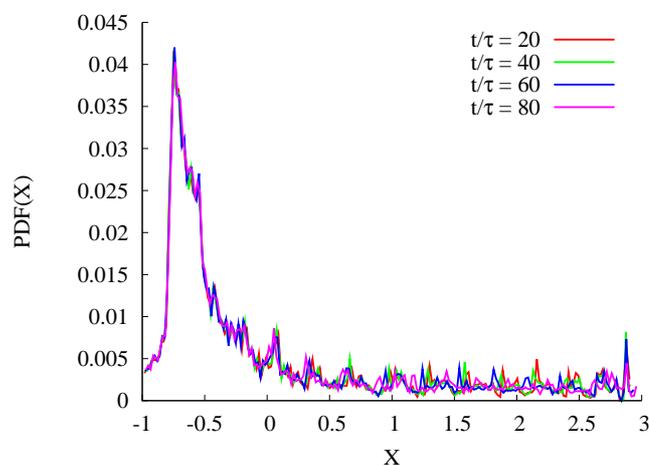


**Figure III.8.**: PDF de  $T^*$  à différents instants périodiques pour les protocoles d'agitation MC et ALT et la configuration d'écoulement C ( $\tau = 30$  s).

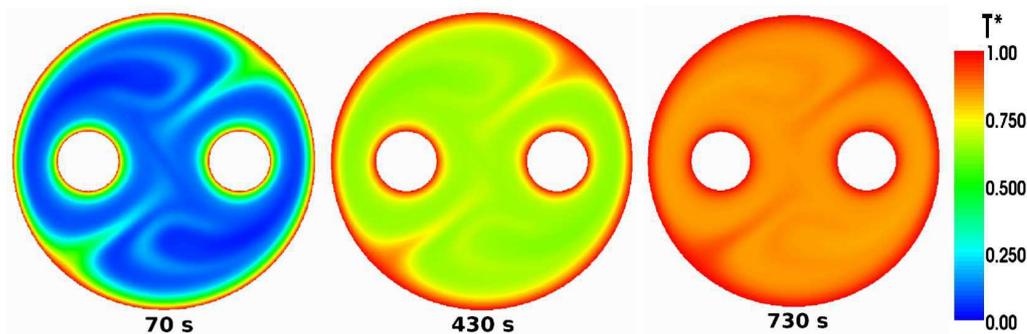
En appliquant un changement d'échelle à  $T^*$  de la manière suivante :

$$X = \frac{T^* - T_m^*}{\sigma} \quad (\text{III.16})$$

et en traçant les PDF de cette nouvelle quantité  $X$  pour le protocole ALT, toujours au même instant de différentes périodes, on obtient les courbes de la Fig. III.9. Sur cette figure, toutes les courbes sont quasiment superposées, alors qu'il s'agit d'instant très espacés du processus de mélange. Ceci révèle la présence de motifs récurrents auto-similaires, appelés aussi modes propres « étranges » (*strange eigenmodes*) [78,79]. Les motifs auto-similaires résultent de la succession des opérations d'étirement et de pliage de parcelles de fluide chaud, créant des striations dans le champ du scalaire température, qui sont par la suite lissées par diffusion et disparaissent, tandis que de nouvelles sont créées. Si le champ de la température garde la même morphologie (au même instant de différentes périodes), le niveau global de température, pour sa part, augmente, comme le montre la Fig. III.10. Il suffit alors d'adapter l'échelle de température à chaque instant pour retrouver exactement les mêmes figures (cf. Fig. 15 de notre publication [A9]).



**Figure III.9.:** PDF de la quantité  $X$  de l'Eq. III.16 à différents instants périodiques pour le protocole d'agitation ALT et la configuration d'écoulement C ( $\tau = 30$  s).



**Figure III.10.:** Motifs récurrents du champ de la température  $T^*$  à trois instants périodiques (configuration d'écoulement B,  $\tau = 30$  s).

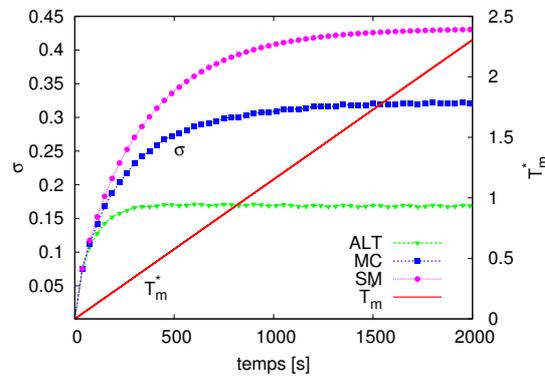
### III.3.5. Flux thermique imposé comme condition aux limites

Lorsque la condition aux limites thermique aux parois du mélangeur est de type Neumann, l'évolution et la distribution de la température deviennent différentes de celles observées avec une température imposée, même si les motifs du scalaire température restent semblables [A13, A15]. Comme on peut s'y attendre, l'évolution de la température moyenne n'est plus asymptotique et ne dépend plus de l'écoulement puisqu'elle a une évolution linéaire dont la pente est dictée par la valeur du flux de chaleur imposé  $\dot{q}$  :

$$\frac{dT_m}{dt} = \dot{q} \left( \frac{S}{\rho C_p V_f} \right) \quad (\text{III.17})$$

avec  $V_f$  le volume du fluide et  $S$  l'air de la surface externe du mélangeur.

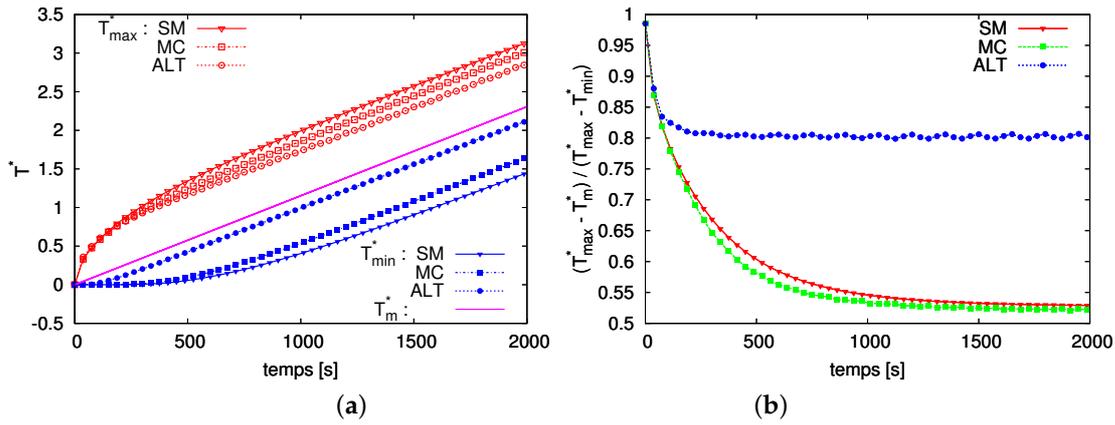
Une particularité de ce mode de chauffage est visible sur la Fig. III.11 qui compare l'évolution de l'écart-type  $\sigma$  pour les trois protocoles ALT, MC et SM. On observe que  $\sigma$  atteint un plateau pour ces trois protocoles et que la valeur de ce plateau est plus basse et plus rapidement atteinte lorsque le protocole est plus efficace (ALT). Ainsi, le degré d'homogénéité de la température atteint une valeur fixe qui ne dépend plus que de l'efficacité de l'écoulement. En outre,  $\sigma$  ne tendra jamais vers 0, puisque le scalaire est « continuellement injecté » dans le fluide à travers les parois.



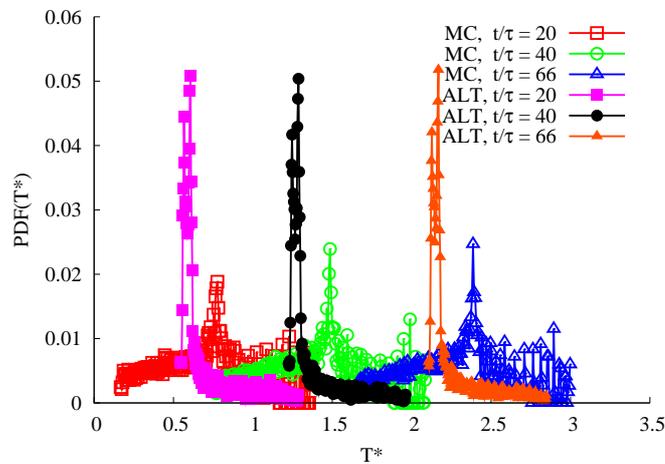
**Figure III.11.:** Evolution de  $\sigma$  et  $T_m^*$  pour les protocoles SM, MC et ALT avec une condition aux limites thermique en flux imposé et une configuration d'écoulement C. À noter que l'échelle de  $\sigma$  n'est pas logarithmique ( $\tau = 30$  s).

L'efficacité de l'agitation a aussi un effet sur les extremums de la température. Comme le montre la Fig. III.12(a), le protocole ALT donne les valeurs  $T_{m_{\min}}^*$  et  $T_{m_{\max}}^*$  les plus rapprochées de  $T_m^*$ , mais également le rapport  $(T_{m_{\max}}^* - T_m^*) / (T_{m_{\max}}^* - T_{m_{\min}}^*)$  le plus important (environ 0,8 contre 0,525 pour MC et SM, Fig. III.12(b)), ce qui démontre sa capacité à éliminer les températures basses du fluide. Comme  $\sigma$ , les écarts entre les extremums de la température atteignent des valeurs constantes plus ou moins rapidement. Cette répartition des températures qui devient stable est traduite par les PDF exposées sur la Fig. III.13. Celle-ci montre des pics qui se déplacent vers les hautes températures en gardant la même forme et la même hauteur, contrairement à ce qui a été observé pour le cas d'une température imposée à la paroi (Fig. III.8). Le niveau global de la température augmente avec le temps, mais sa répartition reste la même.

Pour résumer, on peut donc dire que la quantité de chaleur fournie au fluide dépend de l'écoulement pour une condition de température imposée à la paroi, alors qu'elle est fixe pour un flux imposé. Dans ce dernier cas, une homogénéisation parfaite ne peut pas être atteinte, contrairement au cas d'une température imposée.



**Figure III.12.** : Pour une configuration d'écoulement C et les trois protocoles (SM, MC et ALT) : (a) évolutions de  $T_{max}^*$ ,  $T_m^*$  et  $T_{min}^*$  (b) évolutions de  $(T_{max}^* - T_m^*) / (T_{max}^* - T_{min}^*)$ .



**Figure III.13.** : PDFs de  $T^*$  à différents instants périodiques pour les protocoles d'agitation MC et ALT, la configuration d'écoulement C et un flux imposé comme condition aux limites ( $\tau = 30$  s).

### III.4. Mélange thermique de fluides non newtoniens

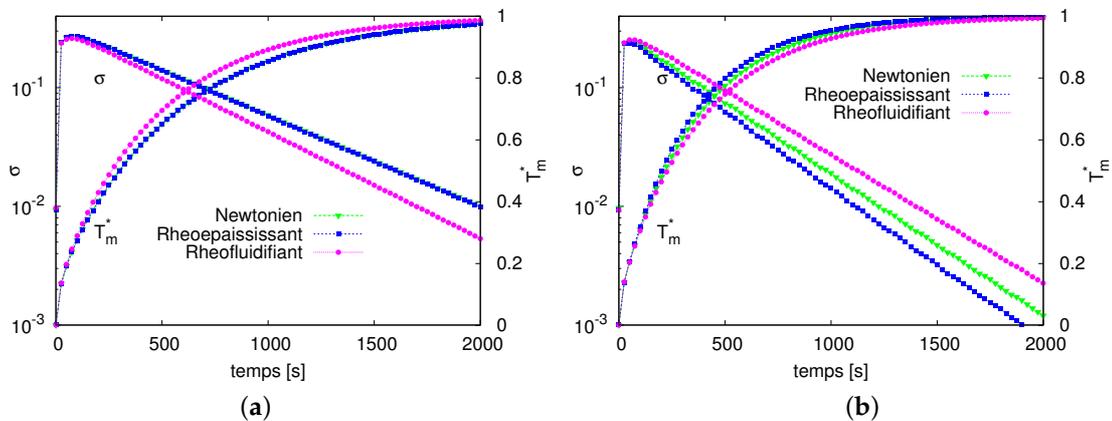
A notre connaissance, il n'existe dans la littérature qu'une seule étude dont les auteurs se sont penchés sur le couplage entre le mélange de fluides non newtoniens par advection chaotique et les transferts thermiques [80]. Pourtant, une grande partie des fluides impliqués dans les procédés industriels, comme ceux de l'agroalimentaire ou des produits chimiques, sont des fluides non newtoniens. Or, des fluides tels que les polymères fondus et les mélanges de polymères bénéficieraient du malaxage doux mais efficace de l'advection chaotique. De plus, lorsque le mélange thermique est impliqué, l'efficacité du mélange chaotique éviterait la persistance de zones non mélangées froides ou bien l'apparition de points excessivement chauds (particulièrement près des parois), qui peuvent provoquer l'apparition de molécules mal formées et donner un produit avec des propriétés non homogènes. La rhéologie des fluides détermine leur manière de s'écouler et a un impact sur l'efficacité du mélange dans lequel ils sont impliqués. Pour toutes ces raisons, nous avons mené une étude sur le mélange chaotique thermique de fluides non newtoniens [81]. Nous nous sommes néanmoins limité, pour le moment, à des fluides rhéofluidifiants et rhéo-

paississants, sans prendre en compte des comportements tels que la viscoélasticité, les seuils en contrainte ou les effets dépendant du temps. Le mélangeur utilisé est toujours le mélangeur à deux barreaux de la Fig. III.1.

Nous avons choisi de décrire le comportement rhéologique des fluides étudiés par le modèle Ostwald-de Waele en loi de puissance (Eq. II.8). Deux valeurs de l'indice de comportement  $n$  ont été considérées,  $n = 0,5$  et  $n = 1,5$ , correspondant respectivement à des comportements rhéofluidifiant et rhéoépaississant. Les valeurs de l'indice de consistance ont été adaptées pour garder la même valeur du nombre de Reynolds généralisé (Eq. III.7) à  $Re_{PL} = 1.66$ , égale à celle étudiée pour le fluide newtonien ( $n = 1$ ), afin de pouvoir comparer les différents résultats entre eux. Les valeurs sont donc  $k_0 = 0.939 \text{ Pa s}^{0.5}$  pour  $n = 0,5$  et  $k_0 = 2.393 \text{ Pa s}^{1.5}$  pour  $n = 1,5$ . Ces valeurs de  $k_0$  et  $n$  donnent une valeur de la viscosité  $\eta = 1.5 \text{ Pa s}$  à la valeur de référence du taux de cisaillement  $\dot{\gamma} = V/L$  pour les deux fluides (section III.2.2). La condition aux limites thermique est en température imposée et la thermodépendance est négligée.

### III.4.1. Évolution des indicateurs statistiques de la température

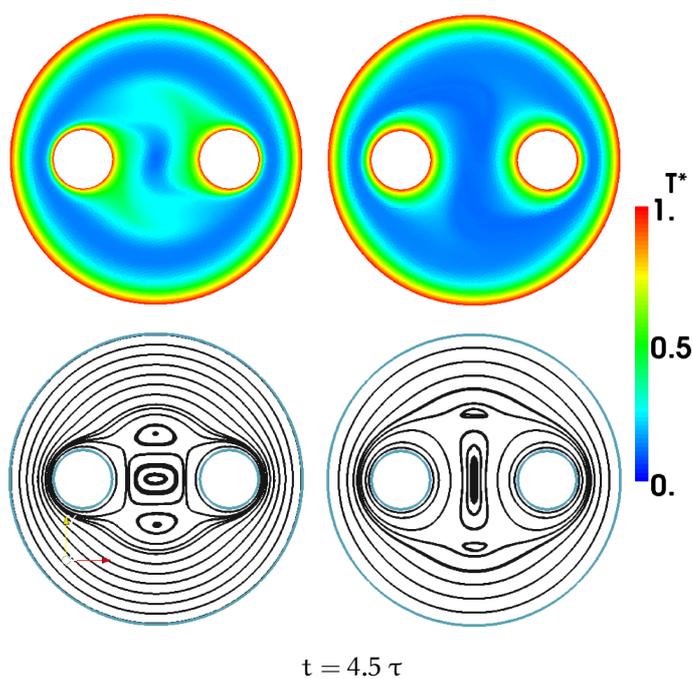
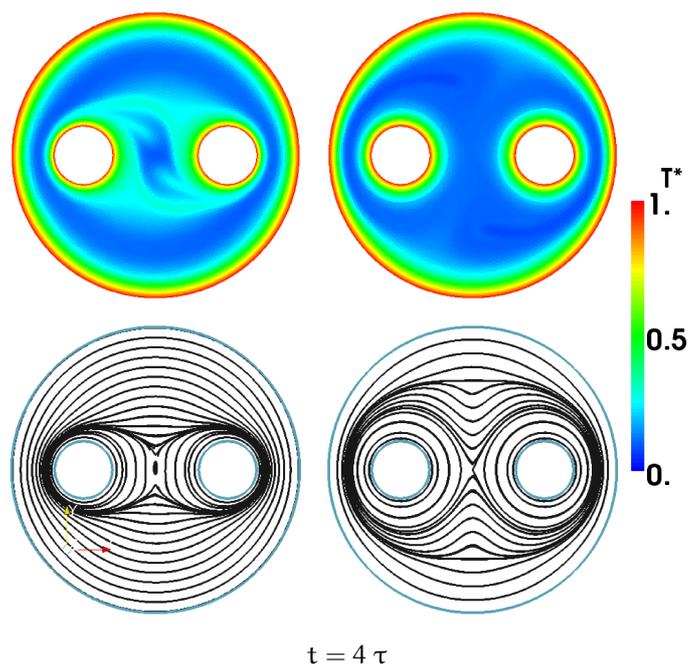
La Fig. III.14 donne l'évolution de l'écart-type et celle de la température moyenne obtenues pour les deux comportements rhéologiques  $n = 0,5$  et  $n = 1,5$  comparés au comportement newtonien  $n = 1$ , pour les deux modes d'agitation MC et ALT. Les taux de décroissance de  $\sigma$  obtenus avec le protocole ALT sont plus forts, quel que soit le fluide. Ce taux est exponentiel pour tous les cas. En ce qui concerne le protocole ALT (Fig. III.14 (b)), nous remarquons que la meilleure efficacité est obtenue pour le fluide rhéoépaississant, suivi par le fluide newtonien. À l'inverse, pour le protocole MC (Fig. III.14 (a)), c'est le fluide rhéofluidifiant qui montre la meilleure efficacité de mélange. Cette inversion de tendance s'explique par l'examen des motifs de l'écoulement de la section suivante.



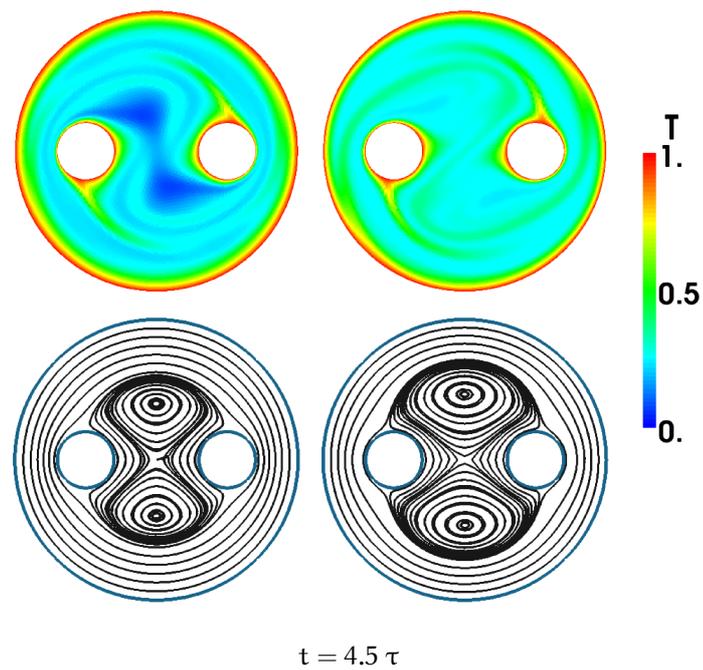
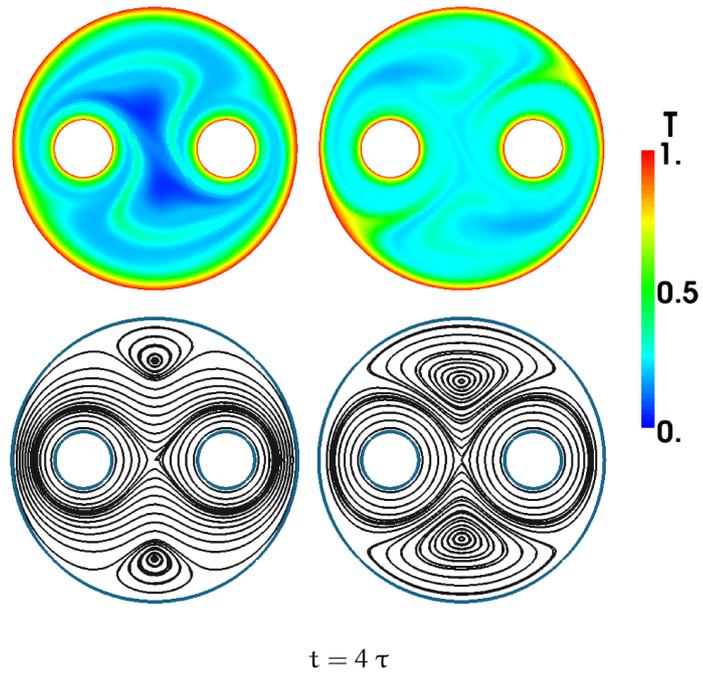
**Figure III.14.** Évolutions de  $\sigma$  et  $T_m^*$  pour les trois comportements rhéologiques, obtenues pour les protocoles (a) MC et (b) ALT (configuration d'écoulement B).

### III.4.2. Motifs de l'écoulement de fluides non newtoniens

Les Figs. III.16 et III.15 donnent les topologies des écoulements des fluides rhéofluidifiant et rhéoépaississant, à deux instants différents, respectivement pour les protocoles d'agitation MC et ALT. Les topologies concernant le fluide newtonien peuvent être consultées sur la Fig. III.6.



**Figure III.15.** : Protocole d'agitation MC : champ des températures et lignes de courant à deux instants ( $t = 4 \tau$ , en haut, et  $t = 4.5 \tau$ , en bas) pour le fluide rhéofluidifiant (à gauche) et le fluide rhéoépaississant (à droite). Configuration d'écoulement B et  $\tau = 30s$ .



**Figure III.16.:** Protocole d'agitation ALT : champ des températures et lignes de courant à deux instants ( $t = 4\tau$ , en haut, et  $t = 4.5\tau$ , en bas) pour le fluide rhéofluidifiant (à gauche) et le fluide rhéoépaississant (à droite). Configuration d'écoulement B et  $\tau = 30s$ .

Les instants  $t = 4 \tau$  et  $t = 4,5 \tau$  correspondent respectivement à la rotation des barreaux puis de la cuve. Pour le protocole ALT, le mélange se produit selon le mécanisme décrit dans la section III.3.2 pour les trois fluides. A la rotation des barreaux ( $t = 4 \tau$ ), nous observons la formation de lignes séparatrices, à partir des points paraboliques sur la cuve. Ces lignes sont beaucoup plus étendues pour le fluide rhéoépaississant que pour le fluide newtonien (Fig. III.16), tandis que pour le fluide rhéofluidifiant, elles sont très peu développées. Pour ce dernier fluide, les lignes de courant sont très compressées autour des barreaux, et la zone de fluide entraînée par leur rotation est mince. Par conséquent, les filaments de fluide chaud extraits de la paroi à partir des deux points paraboliques sont courts et n'atteignent pas le centre du mélangeur, où on peut constater la persistance d'îlots de fluide froid. Pour le fluide rhéoépaississant, la zone où le fluide est entraîné est large, et les filaments (ou courants) de fluide chaud sont transportés sur une plus longue distance.

Lors de l'agitation du fluide rhéofluidifiant par le protocole MC, les lignes de courants très resserrées autour des barreaux se rejoignent au centre, et un transport de fluide chaud va s'opérer suivant ces lignes. Durant la rotation de la cuve, on observe l'apparition d'une recirculation centrale qui va brasser le fluide chaud précédemment déplacé. Le processus se déroule différemment pour les autres fluides, pour lesquels les lignes de courants s'écartent des parois en rotation. Ceci explique les meilleures performances obtenues pour le fluide rhéofluidifiant en mode MC. Toutefois, le protocole ALT est de loin le plus performant, et son efficacité augmente avec l'augmentation de la viscosité car cela améliore l'entraînement du fluide.

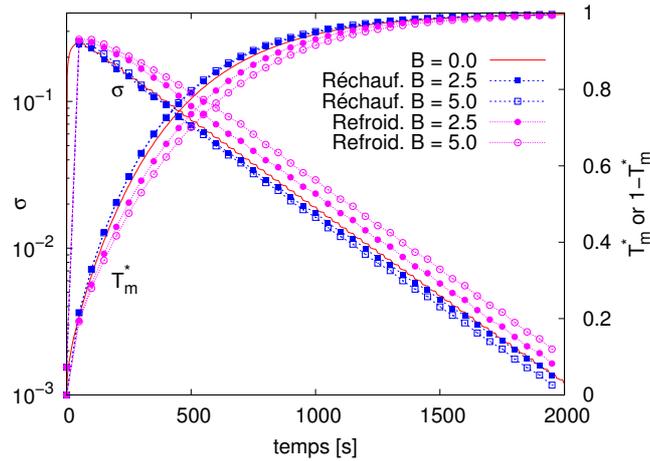
### III.5. Mélange de fluides à viscosité thermodépendante

Nous avons montré, dans la section précédente, l'importance du rôle de la viscosité au voisinage des parois en mouvement. On peut donc supposer l'un impact non négligeable que pourrait avoir une baisse ou une augmentation de la viscosité causées par un réchauffement ou un refroidissement au niveau des parois. Pour cela, nous avons mené une étude sur l'impact de la thermodépendance de la viscosité lors d'un mélange par advection chaotique [A13].

La thermodépendance a été introduite dans l'expression de la viscosité, toujours décrite par une loi en puissance, comme indiqué sur l'Eq. III.9, c'est-à-dire  $\eta = \eta_0 e^{-BT^*}$ . Deux valeurs du nombre de Pearson ont été comparées au cas non thermodépendant ( $B = 0$ ), une valeur modérée ( $B = 2,5$ ) et une valeur plutôt élevée tout en restant réaliste ( $B = 5$ , pouvant être rencontrée pour des polymères fondus par exemple). Quand la thermodépendance est en jeu, il est important de différencier les processus de réchauffement et de refroidissement. Nous avons étudié des mélanges avec le protocole ALT, la configuration d'écoulement B et une condition aux limites en température imposée. Pour préserver la symétrie (au sens physique) entre les processus de réchauffement et de refroidissement, la température de la paroi est fixée à  $T_w^* = 1$  et la température initiale  $T_i^* = 0$  pour le premier cas et à  $T_w^* = 0$  et  $T_i^* = 1$  pour le second, sachant que la température de référence  $T_{ref}^*$  est toujours la température froide.

Cette étude met en jeu un nombre important de paramètres : trois rhéologies ( $n = 0,5 ; 1$  et  $1,5$ ), trois niveaux de thermodépendance ( $B = 0 ; 2,5$  et  $5$ ), deux processus (refroidissement et réchauffement), avec des effets qui parfois se superposent, parfois se neutralisent. Nous ne présentons donc qu'une partie limitée de la grande quantité de résultats disponibles, en résumant à la fin de cette section les principales tendances observées.

Sur la Fig. III.17, sont données les évolutions de  $\sigma$  et  $T_m^*$  pour des réchauffements et des refroidissements d'un fluide newtonien pour les trois valeurs de B. Afin de faciliter les comparaisons, c'est la quantité  $1 - T_m^*$  qui est représentée pour les refroidissements au lieu de  $T_m^*$ . Pour  $B = 0$ ,



**Figure III.17.** Effet de la thermodépendance ( $B$ ) sur l'évolution de  $\sigma$  et  $T_m^*$  pour des processus de réchauffement et de refroidissement d'un fluide newtonien avec un protocole ALT. Pour le refroidissement, la quantité  $1 - T_m^*$  est représentée au lieu de  $T_m^*$ .

les deux opérations sont « symétriques » et donnent les mêmes résultats. Pour le réchauffement, les performances du mélange s'améliorent légèrement avec l'augmentation de  $B$ , alors qu'elles diminuent pour un refroidissement. Ces résultats sont *a priori* en opposition avec les résultats de la section précédente, selon lesquels l'abaissement de la viscosité au voisinage des parois mobiles devrait détériorer l'efficacité du mélange. Pour expliquer ce comportement, nous montrons sur la Fig. III.18 les lignes de courants à deux instants différents pour  $B = 5$  en réchauffement et en refroidissement (le cas  $B = 0$  est celui de la Fig. III.6(a)).

Comme on peut s'y attendre, lors de la rotation des barreaux chauffés ( $t = 4\tau$ ), les lignes de courant sont très resserrées autour d'eux. Il y a donc une sorte de « glissement » entre ces parois et le fluide. Mais un autre effet intervient : les lignes de courants ne sont pas parfaitement parallèles à la cuve arrêtée et le fluide a une viscosité faible à son voisinage. Ce fluide est donc malgré tout déplacé vers le centre, comme le montre le champ des températures sur cette même figure.

Pour un refroidissement, l'augmentation de la viscosité au niveau des parois élargie la zone de fluide entraîné par les parois mobiles. Cependant, en même temps, elle rend difficile le déplacement du fluide froid situé au niveau des parois à l'arrêt, car entre ces deux zones de fluide froid visqueux, il y a une large zone de fluide chaud à faible viscosité, ce qui réduit le transport de quantité de mouvement entre les deux parois. Ce second effet prime sur le premier, ce qui aboutit à la détérioration de l'efficacité observée sur la Fig. III.17.

Des tendances globalement similaires ont été observées pour les deux fluides rhéofluidifiant et rhéoépaississant, avec certaines différences qui ne seront pas détaillées ici<sup>4</sup> (cf. [CN14]). Un résultat important concerne la disparition du mode propre « étrange ». En effet, le champ des vitesses est en continuel changement d'une période à l'autre, suite à l'évolution de la viscosité avec la température. De ce fait, il n'y a plus de motifs auto-similaires dans le champ des températures. Aussi, les mécanismes mêmes du mélange changent au cours du temps.

Il apparaît donc que le mélange thermique des fluides thermodépendants (à rhéologie newtonienne ou pas) fait intervenir des mécanismes plus complexes que ceux qui interviennent pour des fluides pas ou peu thermodépendants, ce qui rend plus difficile la prédiction des tendances

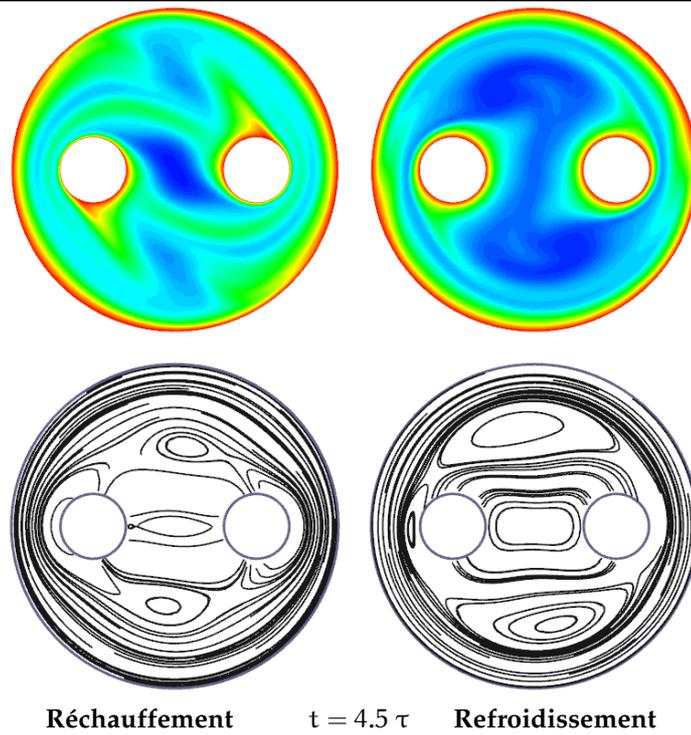
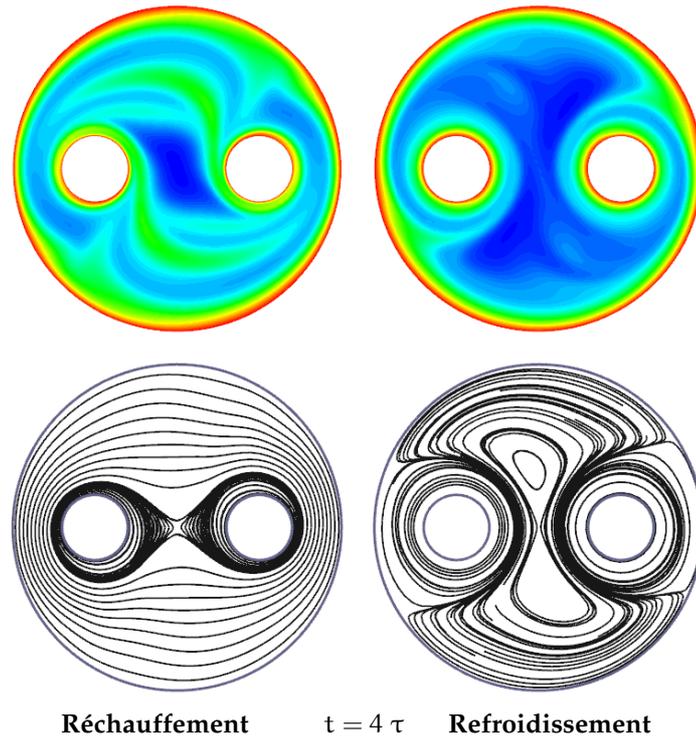
4. Un article est en cours de rédaction pour présenter tous ces résultats.

du mélange sans le recours à la simulation.

### III.6. Conclusion et perspectives

L'ensemble des études présentées ci-dessus, qui concerne le macro-mélange thermique par advection chaotique, a montré qu'une des particularités importantes de ce mélange est le fait que la source du scalaire température se situe aux parois et qu'un bon protocole agitation doit être capable de transporter le fluide de la paroi vers les autres régions du mélange. Ce fut le cas du protocole à rotation alternée des barreaux et de la cuve. L'augmentation de la viscosité au voisinage d'une paroi en mouvement dans un fluide rhéoépaississant, ou sa diminution dans un fluide rhéofluidifiant, améliore ou détériore respectivement l'efficacité. Les effets des variations de viscosité dues à la thermodépendance sont beaucoup plus complexes. Ces études peuvent être étendues, par exemple, vers l'analyse de l'impact des effets inertiels (pour différents nombres de Reynolds ou de Péclet), afin de déterminer jusqu'à quelle valeur du nombre de Reynolds ce type de mélangeur reste suffisamment efficace. Les fluides à seuil (ex. fluide de Bingham) sont souvent rencontrés dans les procédés industriels. Il serait donc intéressant d'étudier leur comportement au cours d'un mélange par advection chaotique.

L'extension de l'étude vers l'écoulement 3D permettrait également de juger de l'effet de la vitesse axiale sur l'efficacité du mélange. Il est aussi important de réaliser, dans le futur, un pilote expérimental, pour confronter les résultats de la simulation aux données expérimentales. Ce sera là un pas important pour encourager d'éventuels industriels à envisager l'advection chaotique pour le macro-mélange thermique comme une solution efficace et économique.



**Figure III.18.:** Champ des températures et lignes de courant à deux instants ( $t = 4\tau$ , en haut, et  $t = 4.5\tau$ , en bas) pour un réchauffement (gauche) et un refroidissement (droite) d'un fluide newtonien thermodépendant ( $B = 5$ ), en utilisant le protocole d'agitation ALT et la configuration d'écoulement B.



---

---

# CHAPITRE IV

---

## *Emulsification laminaire*

### IV.1. Introduction

Les études sur la thématique d'émulsification laminaire ont démarré au laboratoire LaTEP, en premier lieu, comme une extension à celle sur le mélange laminaire. En effet, les études sur le mélangeur chaotique à barreau excentré (« *journal bearing flow* »), menées par mon collègue Y. Le Guer, ont montré, entre autres, la capacité de cet écoulement cisaillant à casser des gouttes dans le cas d'une phase continue très visqueuse. Une collaboration a été initiée dès lors avec l'Institut Français du Pétrole (IFP) pour étudier l'adéquation de ce type de mélangeur en tant qu'émulsionneur, spécialement pour des émulsions à haute concentration en phase dispersée. L'application finale qui intéresse l'IFP étant dans le domaine pétrolier, il s'agissait de démontrer les potentialités que présente cet émulsionneur pour la réalisation d'émulsions très concentrées (ETC), à partir de bruts lourds avec de l'eau. L'objectif est celui de la viscoréduction, afin de faciliter le transport des bruts par conduites. La forme simple du mélangeur permet aussi d'envisager son utilisation dans le puits pour la production d'émulsions in-situ. Les premières études, auxquelles je me suis associé, ont donc portées sur ces applications pétrolières. Par la suite, des modifications ont été apportées au mélangeur et l'étude a été élargie vers la compréhension des mécanismes de réalisation des ETC d'huile dans eau (H/E), notamment au travers de la thèse de S. Caubet que j'ai co-dirigée. Cette thèse a permis également l'extension vers le fonctionnement en continu de ce procédé. Par la suite, d'autres orientations ont été données à ce travail, à savoir l'étude des propriétés thermiques de ces émulsions et l'utilisation de ce procédé pour la réalisation de matériaux particuliers, comme des mousses poreuses en collaboration avec l'ISM<sup>1</sup> de l'Université de Bordeaux, ou encore des matériaux isolants actifs en collaboration avec l'I3A<sup>2</sup> de l'Université de Saragosse.

Les travaux essentiellement expérimentaux de ce chapitre ont donné lieu aux publications suivantes : [A12, A11, A7, A6, A2, A1, C12, C1, CN11, CN8, CN3, CN2, CN1] (voir liste I.4.3).

---

1. Institut des Sciences Moléculaires.

2. Instituto de Investigación de Ingeniería en Aragón.

## IV.2. Études préliminaires : émulsionneur à un barreau et application pétrolière

Devant la raréfaction des ressources mondiales en huiles conventionnelles, un intérêt grandissant se porte actuellement sur l'exploitation des huiles lourdes et extra-lourdes. Les méthodes d'extraction de ces dernières étant relativement onéreuses et encore moins respectueuses de l'environnement que les méthodes d'extraction des bruts conventionnels, d'autres moyens de leur exploitation (production et transport) sont recherchés. Il est donc intéressant de pouvoir réaliser, avec des procédés peu énergivores, des émulsions avec ces huiles ayant comme phase continue l'eau, pour réduire leur viscosité. L'émulsification laminaire apparaît donc comme une alternative très intéressante par rapport aux méthodes faisant appel à l'injection d'un brut plus léger pour la dilution ou bien à l'injection de vapeur d'eau pour la réduction de viscosité par la chaleur.

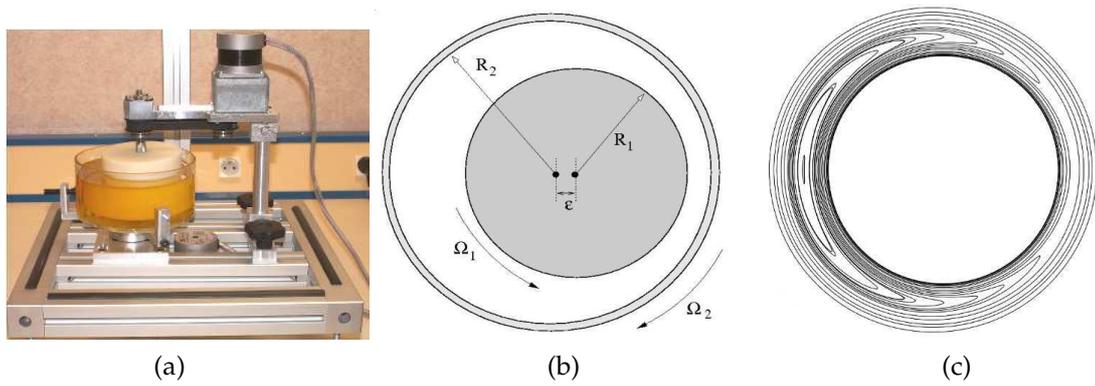
Une émulsion très concentrée (ETC) d'huile lourde dans eau est un système métastable dont les gouttelettes d'huile ont besoin d'être stabilisées par un agent de surface, généralement un surfactant, pour éviter la séparation de phases pendant le transport. Néanmoins, l'opération de « cassage » de l'émulsion doit être envisagée par la suite pour la récupération de l'huile. Dans les applications pétrolières, un compromis doit être trouvé entre une taille de gouttes suffisamment petite pour éviter leur coalescence, mais suffisamment grande pour faciliter la séparation des phases. Il est donc nécessaire de disposer d'un procédé permettant de contrôler le processus d'émulsification, afin d'imposer une taille de gouttes choisie. Il est pour cela nécessaire aussi d'appréhender les effets physico-chimiques qui entrent en jeu dans l'émulsification concernée.

Ces études préliminaires sont résumées dans cette section. Plus de détails sur les procédures expérimentales sont donnés dans la section IV.3. Ces études ont impliqué, entre autres, des étudiants en Master recherche que j'ai co-encadrés (S. Fournanty et M. Cissokho). Les résultats de ces travaux ont été publiés pour l'essentiel dans [A3, C6]. Un brevet issu de ces travaux a également été déposé en association avec l'IFP [B1].

### IV.2.1. Matériel et propriétés

L'émulsionneur utilisé est celui présenté sur la Fig. IV.1(a). Il est composé d'un barreau cylindrique maintenu dans une cuve cylindrique en verre transparent. Les deux éléments peuvent tourner indépendamment l'un de l'autre grâce à deux moteurs pas à pas. Les rayons du barreau et de la cuve sont  $R_1 = 75$  mm et  $R_2 = 50$  mm et l'excentricité du barreau  $\varepsilon = 12,5$  mm (Fig. IV.1(b)). La forme de l'écoulement bidimensionnel (2D) à très bas nombre de Reynolds, qui a lieu dans ce mélangeur lorsque les deux cylindres sont en contra-rotation, est celle donnée sur la Fig. IV.1(c), où une zone de lignes de courant fermées (zone de non mélange) est présente. Cependant, l'écoulement n'est pas réellement bidimensionnel à cause de l'épaisseur relativement faible de la couche fluide et de la présence de la paroi du fond et de la surface libre ; des courants verticaux participent en effet au brassage du fluide.

Un fluide modèle et deux pétroles bruts ont été testés. Le fluide modèle est l'huile de ricin, choisi pour sa viscosité relativement élevée et pour sa densité très proche de celle de l'eau, afin d'écartier les problèmes de flottaison au cours des expérimentations. Les pétroles étudiés sont les bruts du Zuata (Vénézuéla) et d'Athabasca (Canada). Les propriétés de ces fluides sont données dans le Tab. IV.1. On peut noter les grands rapports de viscosité avec celle de l'eau. Le tensioactif



**Figure IV.1.:** (a) Photographie du mélangeur à un barreau, (b) géométrie de la section du mélangeur, (c) lignes de courants issues d'une simulation numérique de l'écoulement (Tamaris).

utilisé est le Triton X-405, il a un  $HLB^3 = 17,9$ , ce qui le rend indiqué pour la formation des ETC huile dans eau. Le tensioactif est initialement dissous dans la phase aqueuse, avant d'être incorporé à l'huile dans le mélangeur « d'un seul coup », pendant la rotation des cylindres.

Fluide	Masse volumique [ $\text{kg m}^{-3}$ ]	Viscosité dynamique $\mu$ [Pa s]	$\mu/\mu_{\text{eau}}$
Huile de ricin	974	2,5	2809
Brut de Zuata	957	5,6	6292
Brut d'Athabasca	1011	41	46067
Eau	997	$8,9 \times 10^{-4}$	1

**Table IV.1.:** Propriétés des fluides étudiés à 25 °C. Les viscosités sont données pour les bruts non newtoniens à une valeur faible du taux de cisaillement de  $10 \text{ s}^{-1}$ .

### IV.2.2. Quelques résultats

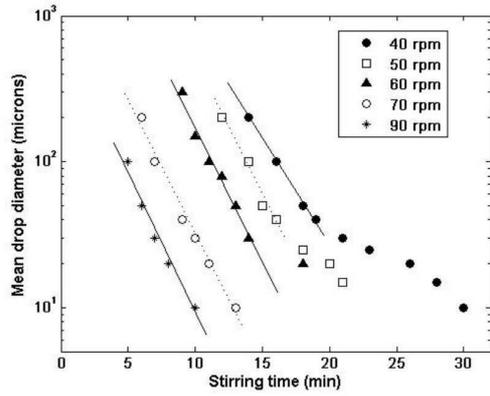
L'influence de plusieurs facteurs a été étudiée, comme la concentration, les vitesses de rotation et les paramètres géométriques [82]. Nous donnons ici une partie de ces résultats.

L'émulsion est réalisée avec un faible pourcentage volumique d'eau (typiquement 9%), afin de bénéficier du cisaillement généré dans la phase huile, puisqu'il favorise le cassage des gouttes. Lorsque l'émulsification est terminée, la dilution est à ce moment là possible par simple ajout d'eau.

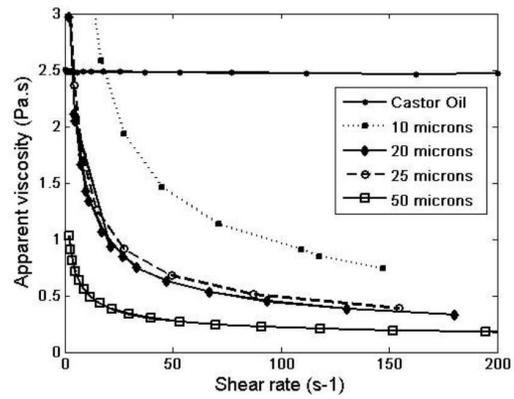
La Fig. IV.2 montre l'évolution du diamètre moyen  $d_m$  des gouttes en fonction du temps de mélange pour différentes vitesses de rotation. Il s'agit d'émulsion avec de l'huile de ricin et 9% de solution aqueuse (eau + tensioactif). On remarque que pour les faibles vitesses (40 à 60 rpm), la diminution du diamètre moyen avec le temps de mélange est d'abord exponentielle avant de ralentir à partir d'une certaine valeur de  $d_m$  autour de  $20 \mu\text{m}$ . Pour des vitesses plus élevées (70 à 90 rpm), la diminution est toujours exponentielle avec quasiment le même coefficient d'évolution. Il est donc aisé, dans ces conditions, de choisir le temps d'émulsification nécessaire pour obtenir le diamètre moyen désiré.

Les paramètres géométriques ont également un effet important sur la granulométrie de l'émulsion, puisque la réduction de l'interstice  $\delta$  entre le barreau et le fond de la cuve abaisse le diamètre

3. Balance Hydrophile Lipophile.



**Figure IV.2.:** Évolution au cours de l'émulsification du diamètre moyen des gouttes pour différentes vitesses de rotation (91% d'huile de ricin).



**Figure IV.3.:** Viscosité en fonction du taux de cisaillement pour des émulsions d'huile de ricin (*castor oil*) ayant différents diamètres moyens et diluées à 30 % d'eau.

moyen grâce à l'augmentation de la zone de cisaillement. Cet impact du cisaillement est aussi visible en observant l'effet du pourcentage d'eau initial sur le diamètre moyen. Ces deux derniers effets, de  $\delta$  et du pourcentage d'eau, sont confirmés par le Tab. IV.2.

Échantillon	$\Omega$ [rpm]	Eau [%]	$\delta$ [mm]	$d_m$ [ $\mu\text{m}$ ]
1	60	9	1	25
2	90	9	1	3
3	90	9	3	15
4	90	12	1	40

**Table IV.2.:** Diamètre moyen des émulsions obtenues pour différentes vitesses de rotation  $\Omega$ , différents pourcentages d'eau et différents interstices  $\delta$ , après 6 minutes d'émulsification.

La variation de la granulométrie de l'émulsion a un impact direct sur son comportement rhéologique. En effet, c'est la taille des gouttes qui détermine la viscosité apparente de l'émulsion. Sur la Fig. IV.3, on montre cette viscosité apparente en fonction du taux de cisaillement pour différents diamètres moyens après dilution de l'émulsion à 30% d'eau. Comme le montre cette figure, l'huile de ricin a un comportement rhéologique newtonien, tandis que les émulsions sont rhéofluidifiantes. Ce comportement est dû à l'élongation des gouttelettes sous l'action du gradient de vitesse. La Fig. IV.3 montre que la viscosité augmente avec la diminution de la taille des gouttes. En effet, plus les gouttes ont un faible diamètre, moins elles se déforment à cause d'une tension interfaciale plus forte. Cette viscosité reste néanmoins bien inférieure à celle de l'huile initiale pour des gradients de vitesse suffisamment élevés ( $> 25 \text{ s}^{-1}$ ).

La viscoréduction a été également confirmée pour les bruts lourds. La Fig. IV.4 montre une émulsion du brut du Zuata avec un diamètre moyen  $d_m = 15 \mu\text{m}$  diluée à différents degrés : 18, 25 et 30% d'eau. La baisse de viscosité apparente est importante. Un exemple de photographie par microscopie optique d'une émulsion de brut du Zuata est donnée sur la Fig. IV.5.

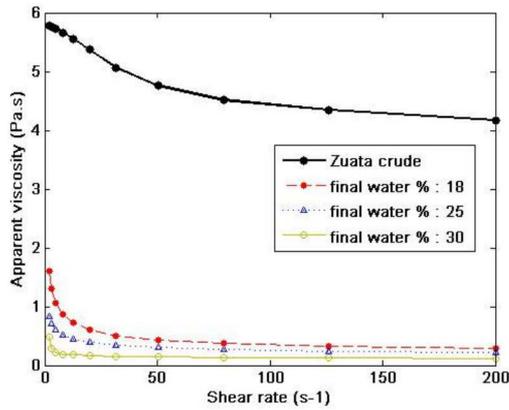


Figure IV.4.: La viscosité en fonction du taux de cisaillement pour différentes dilutions d'une même émulsion du brut du Zuata ayant un  $d_m = 15 \mu m$ .

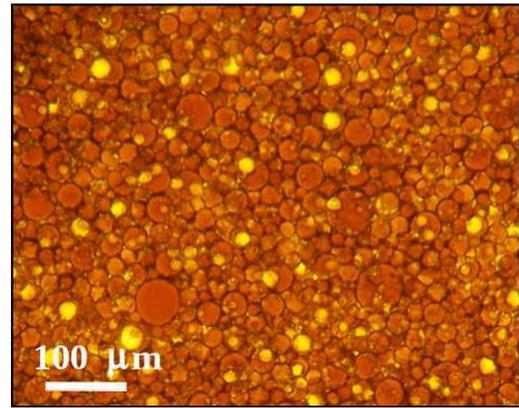


Figure IV.5.: photographie par microscopie optique d'une émulsion de brut du Zuata.

### IV.3. Émulsionneur batch à deux barreaux

Cette section résume les travaux menés dans le cadre de la thèse de S. Caubet. Cette thèse a bénéficié du financement de la communauté d'Agglomération Pau Pyrénées (CDAPP). Elle a été dirigée par Y. le Guer du LaTEP et co-dirigée par B. Grassl de l'IPREM<sup>4</sup> de l'UPPA et moi-même. La collaboration avec l'IPREM sur cette thématique a permis de bénéficier du savoir-faire et de l'équipement de cet institut en physico-chimie. Le mélangeur utilisé et décrit plus bas a été réalisé notamment dans le cadre du Master recherche d'E. Desdan que j'ai co-encadré.

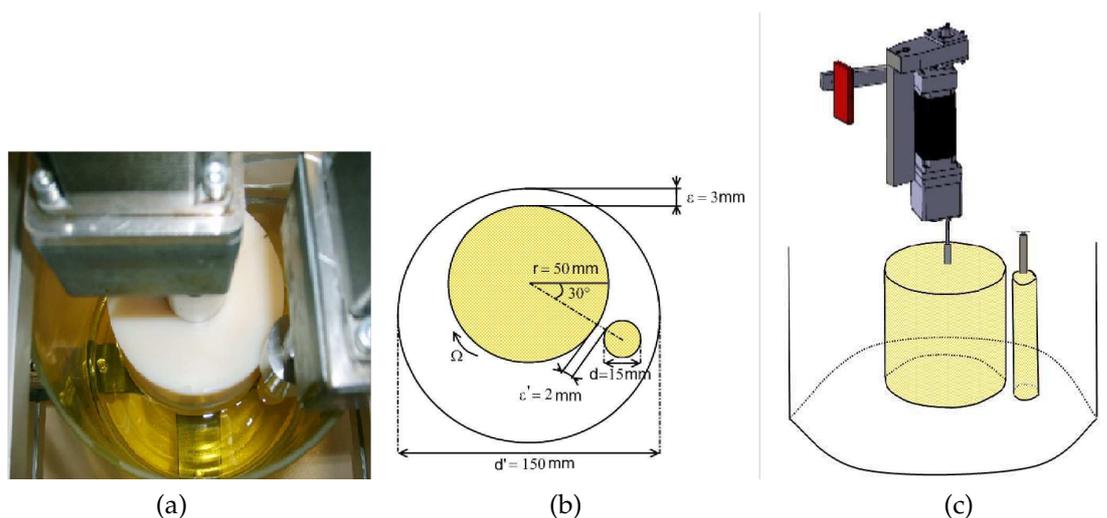
Une partie des résultats de cette étude a été publiée dans : [A5, C14, CN17, CN7] (voir liste I.4.3) et le reste des résultats est en cours de rédaction. D'autres articles issus de la thèse de S. Caubet sont prévus.

#### IV.3.1. Matériel et méthode de mesure

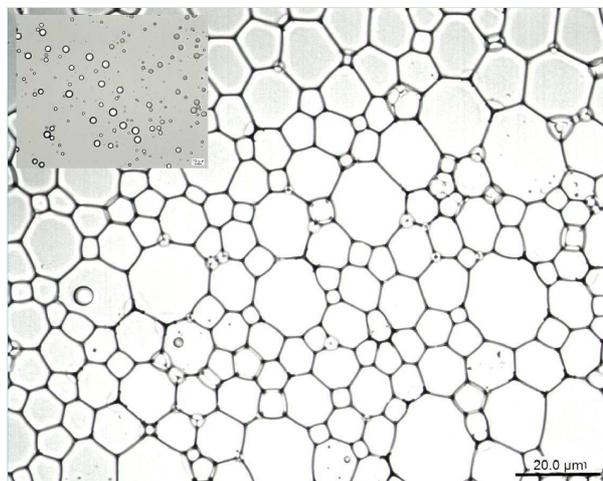
A travers les précédentes études, l'importance du rôle de la zone de cisaillement dans le processus d'émulsification a été démontrée. En vue du développement d'un émulsionneur capable d'être étendu à un fonctionnement en continu, il a été décidé de se passer de la rotation de la cuve externe. Néanmoins, pour garder un niveau de cisaillement important dans le fluide, un nouveau barreau de taille réduite a été ajouté au sein du mélangeur, à proximité du grand barreau, de manière à ce que l'entrefer entre les deux soit suffisamment faible pour générer une zone de cisaillement supplémentaire. Des tests ont montré que la rotation de ce barreau n'avait pas d'influence notable sur l'émulsification. Par conséquent, il a été gardé immobile.

La Fig. IV.6 montre ce nouveau mélangeur, sa géométrie et les dimensions de sa section horizontale. La rotation du gros barreau est assurée par un moteur pas à pas. Il est également équipé d'un dispositif de mesure de force qui permet de remonter au couple afin d'en déduire la puissance fournie au fluide par le cylindre au cours de sa rotation. C'est ce nouveau mélangeur qui a servi pour la première partie des travaux de la thèse de S. Caubet.

4. Institut des Sciences Analytiques et de Physico-chimie pour l'Environnement et les Matériaux.



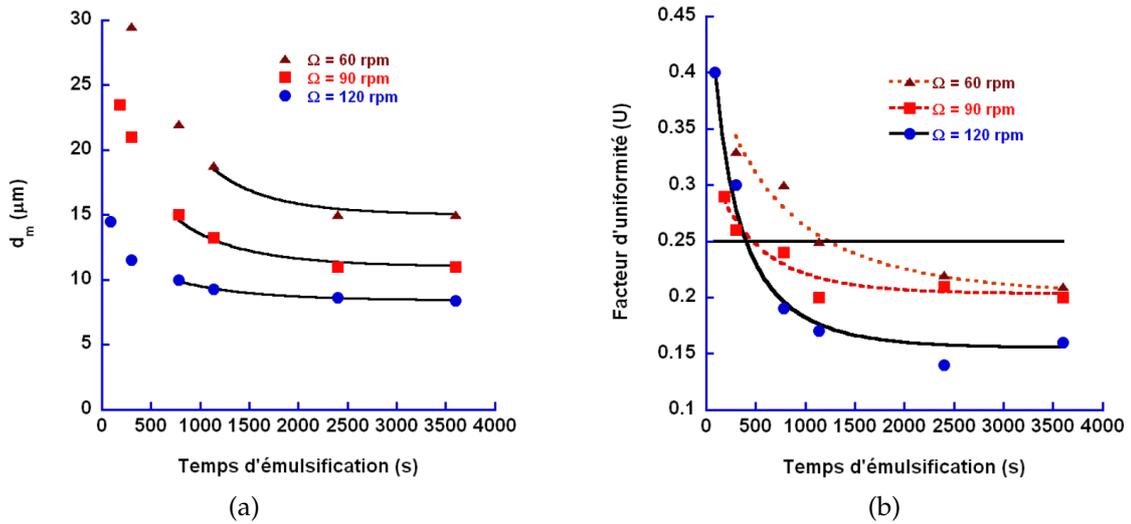
**Figure IV.6.:** (a) Photographie du mélangeur à deux barreaux (vue du haut), (b) la géométrie et les dimensions de sa section, (c) vue 3D du mélangeur équipé du capteur de force.



**Figure IV.7.:** Photographie par microscopie optique (grossissement x20) d'une émulsion très concentrée d'huile de ricin avant et après dilution (en haut à gauche).

La perspective de ce travail s'étant élargie vers la faisabilité des émulsions très concentrées (ETC) pour des applications dans et en dehors du domaine pétrolier, par exemple dans l'agroalimentaire, les cosmétiques et le génie chimique, etc., le travail de cette thèse s'est focalisé sur l'émulsification de l'huile modèle (l'huile de ricin). De ce fait, le tensioactif utilisé reste comme précédemment le Triton X-405. Il est mis en solution dans une eau déionisée, filtrée au préalable par un filtre milliporeux de calibre  $0,22 \mu\text{m}$ .

La mesure de la taille des gouttes et de leur polydispersité est difficile à effectuer sur une ETC dont les gouttes sont déformées lorsque leur concentration dépasse le seuil d'empilement maximum des sphères rigides (voir la Fig. IV.7). Dans ces conditions, les gouttes ont un aspect polyédrique avec un mince film d'eau entre elles. Pour cette raison, les ETC sont également appelées « mousse bi-liquides ». Ainsi, pour beaucoup de méthodes de mesure, une phase préalable de dilution est nécessaire pour observer distinctement les gouttes (Fig. IV.7). La mesure des tailles de gouttes a été réalisée ici par microscopie optique : une photo est prise à travers un microscope avec un agrandissement x10 ou x20. La mesure du diamètre individuel de chaque goutte est réa-



**Figure IV.8.** Evolution durant l'émulsification de la granulométrie d'une émulsion à 91% d'huile de ricin pour différentes vitesses de rotation : (a) diamètre moyen, (b) facteur d'uniformité.

lisée à l'aide d'un logiciel d'analyse d'image. Les échantillons traités contiennent au minimum 800 gouttes. A partir des résultats de ces mesures, le diamètre moyen  $d_m$ , le diamètre de Sauter  $d_{32}$  et le facteur de polydispersité  $U$  sont calculés par :

$$d_m = \frac{\sum n_i d_i}{\sum n_i} \quad (\text{IV.1})$$

$$d_{32} = \frac{\sum n_i d_i^3}{\sum n_i d_i^2} \quad (\text{IV.2})$$

$$U = \frac{1}{d^*} \frac{\sum n_i d_i^3 |d^* - d_i|}{\sum n_i d_i^3} \quad (\text{IV.3})$$

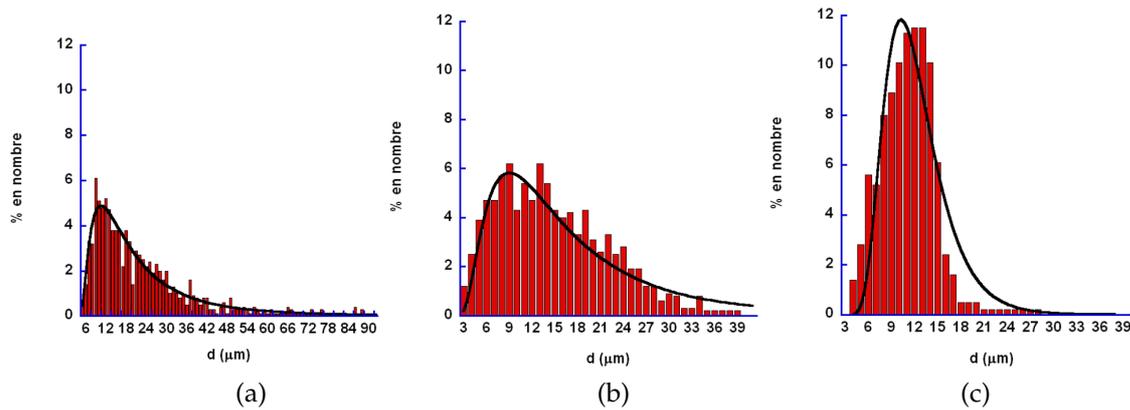
avec  $n_i$  le nombre de gouttes de diamètre  $d_i$  et  $d^*$  le diamètre médian. La valeur du facteur d'uniformité  $U$  permet de juger de la polydispersité d'une émulsion qui, pour une valeur de  $U < 0,25$ , peut être considérée comme monodisperse.

Les propriétés rhéologiques des ETC ont été mesurées à l'aide d'un rhéomètre Malvern contrôlé en contrainte, avec une géométrie Couette. L'étude oscillatoire a été menée à contrainte fixe avec un balayage fréquentiel variant de 0,01 à 30 Hz.

### IV.3.2. Quelques résultats

#### Effets de la vitesse de rotation et du temps de mélange

Sur la Fig. IV.8(a) sont données les évolutions dans le temps du diamètre moyen  $d_m$  des ETC obtenues avec différentes vitesses de rotation du barreau. L'émulsion est constituée de 91% d'huile (en masse). On remarque clairement que l'augmentation de la vitesse diminue le rayon moyen  $d_m$  de l'ETC pendant l'émulsification, mais aussi sa valeur finale. On observe aussi, pour chacune des vitesses, une baisse rapide de  $d_m$  suivie d'une stabilisation progressive vers le diamètre moyen final dont les valeurs sont respectivement 8,6; 11 et 15  $\mu\text{m}$ . La Fig. IV.8(b) donne le facteur d'uniformité  $U$ , qui présente lui aussi une baisse rapide suivie d'une stabilisation : les ETC deviennent assez rapidement monodisperses  $U < 0,25$ .



**Figure IV.9.** Distribution des tailles de gouttes d'une émulsion à 91% d'huile de ricin obtenue avec une vitesse  $\Omega = 90$  rpm aux instants : (a) 300 s, (b) 780 s, (c) 2400 s. Les modèles (courbes noires) sont des lois de distribution log-normale.

La Fig. IV.9 donne la distribution en nombre de la taille des gouttes aux instants 300, 780 et 2400 s de l'émulsification avec une vitesse de 90 rpm. On observe sur le premier diagramme une distribution relativement étalée avec un facteur d'uniformité  $U \simeq 0,26$  (Fig. IV.8(b)), qui indique une ETC légèrement polydisperse. Plus tard, la distribution se resserre progressivement,  $d_m$  diminue et l'ETC devient monodisperse ( $U \simeq 0,20$  à 2400 s).

### Impact de la taille des gouttes sur la rhéologie

La distribution des tailles de gouttes d'une ETC détermine le comportement rhéologique d'une émulsion. Ainsi, pendant l'émulsification, le comportement des ETC ne cesse d'évoluer. Les ETC sont connues pour être des fluides viscoélastiques rhéofluidifiants, ce qui est montré par la Fig. IV.10(a). L'étude du comportement visqueux montre une augmentation de la viscosité apparente au cours de l'émulsification (figure non présentée ici). Cette progression est en lien avec celle de  $d_m$  : rapide dans un premier temps et plus lente par la suite. La Fig. IV.10(a) confirme cette relation. Elle donne la viscosité apparente en fonction du taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$  pour des ETC obtenues avec  $\Omega = 60, 90$  et  $120$  rpm et ayant des  $d_m$  de fin d'émulsification de 8,6 ; 11 et 15  $\mu\text{m}$ . On remarque sur cette figure un changement de pente (de l'indice de comportement) autour de  $\dot{\gamma} = 1 \text{ s}^{-1}$ . Cela est dû à une réorganisation des gouttes dans l'écoulement à partir de cette valeur de cisaillement. On remarque également l'absence de plateau newtonien vers les faibles valeurs de  $\dot{\gamma}$ . L'étude dynamique de ces émulsions (Fig. IV.10(b)) montre une évolution similaire des modules élastique  $G'$  et visqueux  $G''$  : leurs valeurs augmentent avec la diminution de  $d_m$ . Cette tendance s'inverse néanmoins pour  $G''$  aux faibles valeurs de  $\dot{\gamma}$ .

### Motifs de l'écoulement

En simplifiant le comportement rhéologique de l'ETC, en la considérant comme un fluide rhéofluidifiant régi par une loi de puissance (Eq. II.8), nous avons modélisé l'écoulement sur une section 2D du mélangeur pour une vitesse de rotation  $\Omega = 90$  rpm. Les indices de comportement et de consistance du fluide sont ceux mesurés sur la Fig. IV.10(a), c'est-à-dire :  $n = 0,355$  et  $k = 51,66$ , ce qui donne un nombre de Reynolds généralisé de l'écoulement  $Re_{PL} = 1,88$  (Eq. III.7), indiquant un régime d'écoulement laminaire hautement visqueux. Le calcul est réalisé à l'aide du code Tamaris (cf. Chap. II), sur un maillage de 33 000 cellules.

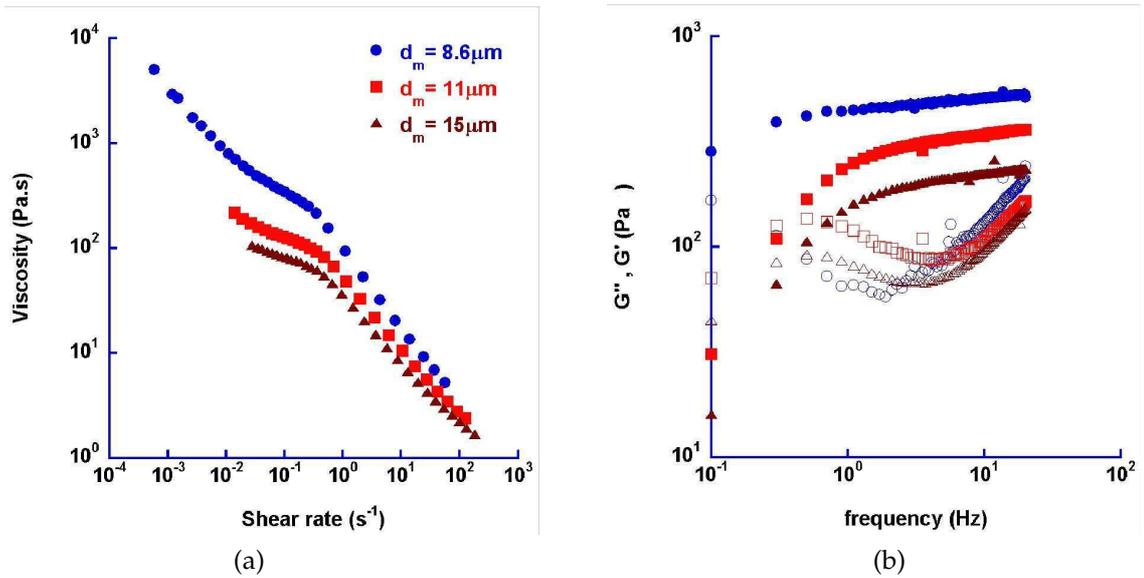


Figure IV.10.: Comportements rhéologiques d'ETC à 91 % d'huile de ricin pour différents diamètres moyens, (a) viscosité en fonction du taux de cisaillement, (b) module élastique  $G'$  (symboles pleins) et module visqueux  $G''$  (symboles creux) en fonction de la fréquence pour une contrainte de 5 Pa.

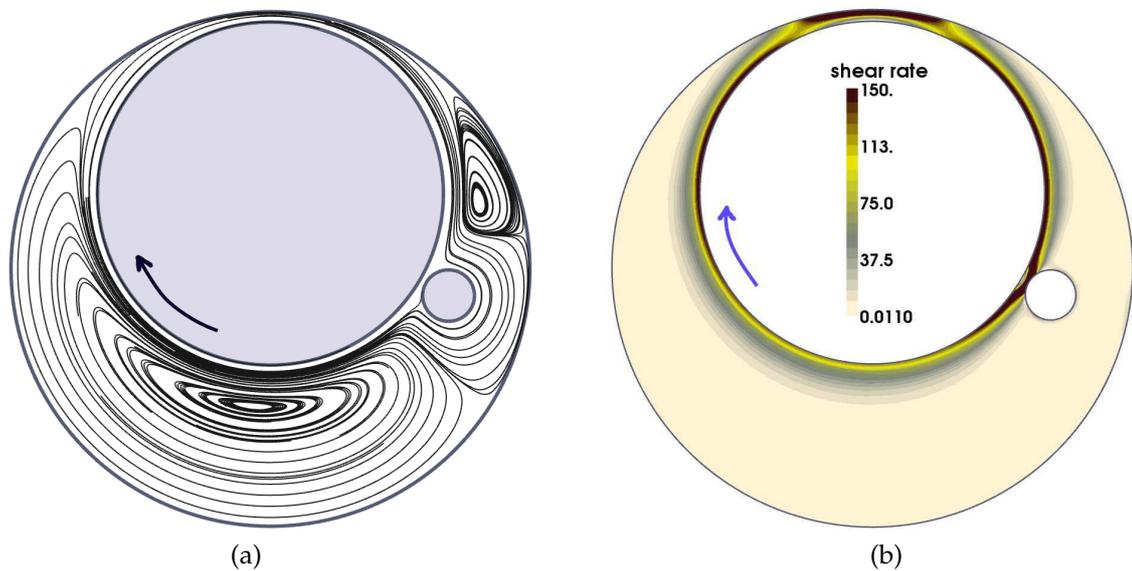
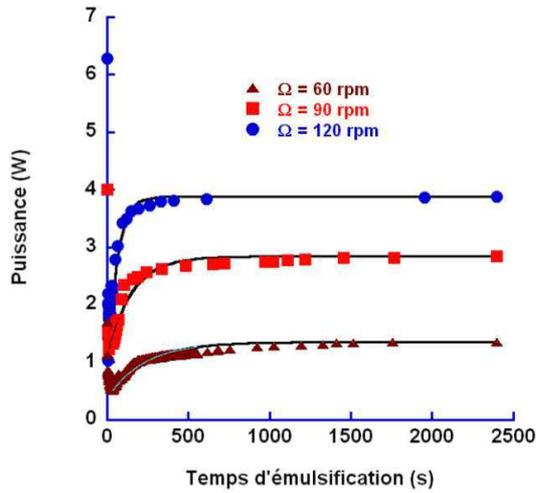
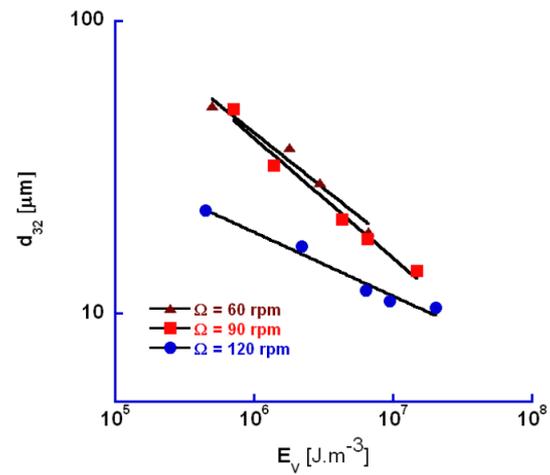


Figure IV.11.: Simulation numérique de l'écoulement d'une émulsion dont la viscosité est modélisée par  $\eta(\dot{\gamma}) = 51,66 (\dot{\gamma})^{0,355-1}$ . (a) Lignes de courant, (b) taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$  (la valeur haute de l'échelle est limitée à  $150 s^{-1}$  pour la clarté).



**Figure IV.12.:** Évolution de la puissance fournie au fluide au cours de l'émulsification pour différentes vitesses d'agitation.



**Figure IV.13.:** Évolution du diamètre de Sauter en fonction de la densité d'énergie fournie au fluide au cours de l'émulsification pour différentes vitesses d'agitation.

La Fig. IV.11(a) montre les lignes de courant de cet écoulement stationnaire, où apparaissent deux recirculations de chaque côté du petit barreau. Le centre de la grande recirculation est proche du barreau tournant car les vitesses (non montrées ici) ne sont importantes qu'à une faible distance de ce barreau, à cause du caractère très rhéofluidifiant du fluide. La Fig. IV.11(b) montre la distribution du taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$  dans le fluide. Les zones à très haut gradient de vitesse sont très localisées au niveau des entrefers, avec un maximum au niveau de l'entrefer entre les deux barreaux ( $\dot{\gamma} = 414 \text{ s}^{-1}$ ).

### Étude énergétique

Grâce à la mesure du couple au niveau de l'axe du barreau, il a été possible de tracer l'évolution de la puissance fournie au fluide  $P(t)$  pour les trois vitesses étudiées (Fig. IV.12). On y remarque une augmentation rapide de cette puissance qui se stabilise assez tôt en un plateau, avant même la stabilisation du diamètre moyen  $d_m$ . On note que la valeur de la puissance à ce plateau augmente avec la vitesse de rotation.

La densité volumique d'énergie  $E_V$  cédée au fluide peut être calculée en intégrant cette puissance sur la durée de l'émulsification et en la divisant par le volume de l'émulsion produite :

$$E_V = \frac{1}{V} \int_0^{t_{\text{final}}} P(t) dt \quad (\text{IV.4})$$

Sur la Fig. IV.13,  $E_V$  est tracée en fonction du diamètre de Sauter  $d_{32}$  (Eq. IV.2), ce qui révèle une relation de type :

$$d_{32} = c \cdot E_V^{-b} \quad (\text{IV.5})$$

avec  $(c; b)$  un couple de paramètres positifs ayant comme valeurs  $(9773; 0,4)$ ,  $(14527; 0,4)$  et  $(392; 0,23)$ , respectivement pour les trois vitesses d'agitation  $\Omega = 60, 90$  et  $120$  rpm. Même si les trois vitesses de rotation ne couvrent pas les mêmes plages de  $d_{32}$ , on remarque qu'une valeur donnée de  $d_{32}$  est obtenue avec une densité d'énergie volumique  $E_V$  plus faible pour une vitesse de  $\Omega = 120$  rpm qu'avec des vitesses de  $60$  et  $90$  rpm qui, elles, donnent des valeurs de  $E_V$  proches pour

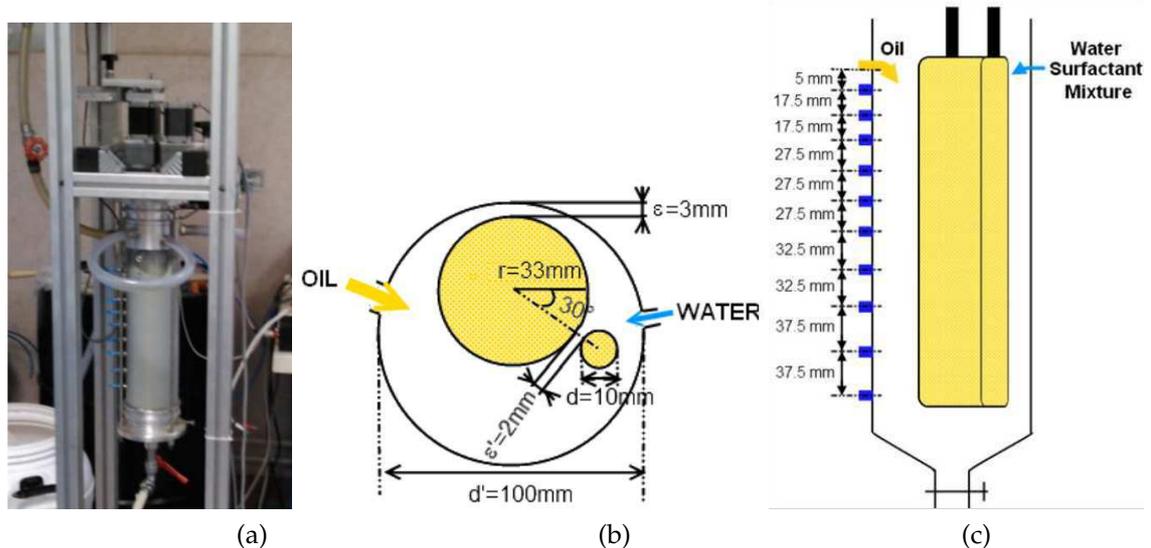


Figure IV.14.: Description du mélangeur continu : (a) photographie, (b) schéma d'une coupe transversale et ses dimensions, (c) schéma d'une coupe axiale avec les positions des sondes de prélèvement.

le même diamètre  $d_{32}$ . La comparaison des valeurs de  $E_V$  obtenues avec notre émulsionneur avec celles obtenues avec d'autres procédés, tels que le rotor-stator ou l'homogénéisateur haute pression, fait de lui l'un des systèmes les moins énergivores, tout en permettant la réalisation d'émulsions très concentrées, ce qui n'est pas le cas de beaucoup d'autres systèmes [61].

## IV.4. Intensification du procédé : l'émulsionneur continu

### IV.4.1. Description

La seconde partie de la thèse de S. Caubet concerne l'intensification du procédé d'émulsification. Un nouveau mélangeur, conçu pendant les stages de Master de N. Goulesque et de E. Desdan, a été finalisé et instrumenté. Dans ce nouveau mélangeur, la cuve a été remplacée par un tube vertical en PVC transparent et la disposition des barreaux a été conservée, mais avec un rapport d'homothétie global de 1/1,5 entre les deux sections. Comme pour le mélangeur précédent, seul le gros barreau est animé en rotation. La Fig. IV.14 montre ce nouveau mélangeur continu.

L'huile et la solution aqueuse sont introduites continuellement par le haut (par gravité pour l'huile avec un dispositif à double réservoirs et un trop-plein et à l'aide d'une pompe péristaltique pour la solution aqueuse), tandis que l'émulsion finalisée s'écoule par une vanne située en bas du mélangeur. Cette vanne est ouverte lorsque le mélangeur est plein. Le volume utile est de 1,15 litres et le temps moyen de séjour du fluide a été estimé à 18,5 minutes car le débit est relativement faible (0,9 g/s).

Des vannes de prélèvement ont été disposées tout au long de la conduite (Fig. IV.14(c)) pour permettre de caractériser l'émulsion durant tout le processus d'émulsification. Des temps de séjour moyens ont été déterminés au niveau de chacune de ces vannes, ce qui a permis de comparer les performances du mélangeur continu à celles du batch au cours du temps.

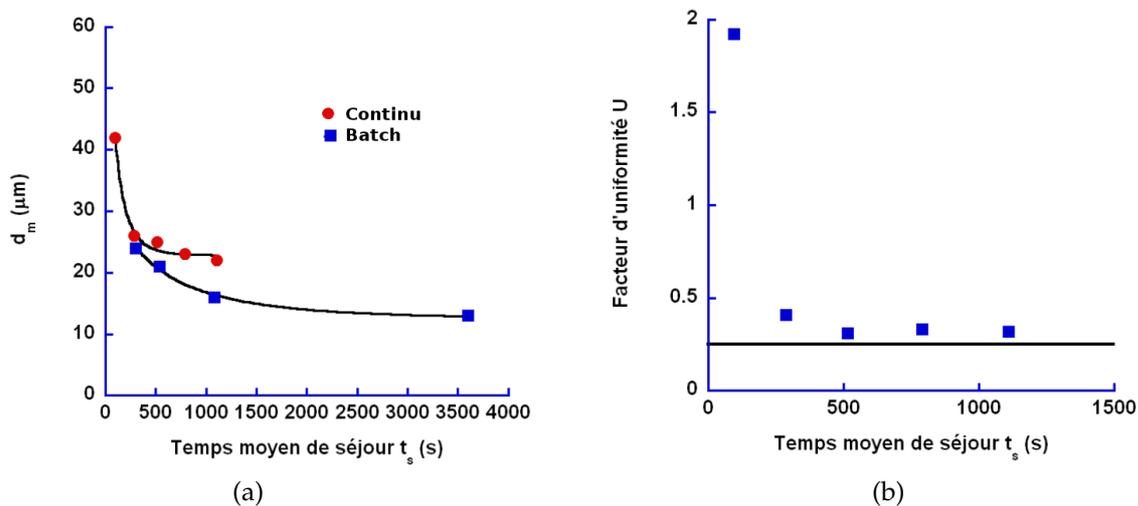


Figure IV.15.: Évolution de la granulométrie lors de la préparation d'une ETC dans le mélangeur continu avec  $\Omega = 90$  rpm (a) diamètre moyen comparé à celui du mélangeur batch, (b) facteur d'uniformité.

#### IV.4.2. Quelques résultats

Sur la Fig. IV.15(a), l'évolution de  $d_m$  pour une vitesse de  $\Omega = 90$  rpm est comparée pour les deux mélangeurs. On remarque sur cette figure que les cinétiques ne sont pas les mêmes. Le mélangeur continu atteint plus rapidement sa valeur finale de  $d_m$  et celle-ci est supérieure à celle atteinte dans le mélangeur batch. Cette rapidité à atteindre l'état final pour le mélangeur continu peut être expliquée par le fait que l'injection de la solution aqueuse dans ce mélangeur se fait au sein d'une émulsion déjà en formation, contrairement au cas du batch où elle se fait dans l'huile. L'évolution du facteur d'uniformité est visible sur la Fig. IV.15(b). Son évolution est également rapide, mais sa valeur finale ne descend pas en dessous du seuil de 0,25. Elle se stabilise à 0,30. L'émulsion produite peut être qualifiée de quasi-monodisperse. Elle est moins homogène que celle produite par le mélangeur batch.

D'autres analyses rhéologiques et énergétiques ont révélé les mêmes tendances trouvées pour le mélangeur batch. À titre de comparaison, la densité volumique d'énergie  $E_V$  (Eq. IV.5) sur une durée de 18,5 min nécessaire pour réaliser une émulsion de la même concentration est environ de  $6 \times 10^6 \text{ J/m}^3$  pour le batch, et seulement  $3 \times 10^6 \text{ J/m}^3$  pour le continu. Néanmoins, comme on l'a vu sur la Fig. IV.15(a), le diamètre moyen  $d_m$  de l'émulsion produite en batch est plus faible et, de ce fait, cette émulsion est plus visqueuse, ce qui augmente l'énergie nécessaire à sa réalisation.

Malgré les différences qu'il y a entre les deux émulsionneurs batch et continu (absence du fond, différences des diamètres), le transfert du procédé discontinu (batch) vers le procédé continu peut être considéré comme un succès. En effet, le procédé continu est capable de produire des ETC avec des distributions de taille de gouttes et une monodispersité comparables à celles du batch. Les performances énergétiques n'ont pas été altérées non plus, tout en permettant la réalisation de volumes plus importants d'ETC et en évitant les opérations de remplissage et de nettoyage.

Certes d'autres études supplémentaires pourraient encore être réalisées afin d'améliorer le procédé (impact du débit et de la longueur du tube), mais son transfert vers l'industrie peut être envisagé dès maintenant.

## IV.5. Propriétés thermiques des émulsions très concentrées

Les émulsions très concentrées (ETC) peuvent être rencontrées dans de nombreux procédés industriels, comme nous l'avons indiqué précédemment. Certains de ces procédés peuvent impliquer des variations de températures ou des opérations de cristallisation ou de fusion. Il est donc intéressant d'étudier le comportement thermique de ces ETC, afin de caractériser leurs propriétés thermophysiques et comprendre les phénomènes qui les gouvernent, ces derniers s'avérant différents de ceux relatifs aux fluides classiques.

Sur ce travail, nous avons collaboré avec nos collègues du SIAME, T. Kouskou et Y. Zéraouli, et de l'université de Fès, A. Jamil. Les résultats de ce travail ont révélé des comportements originaux que je résume ici. Ils ont été publiés dans [A10, C15, C13, C7]. D'autres résultats seront publiés dans un prochain article.

### IV.5.1. Méthodologie

Les ETC d'huile de ricin dans eau, réalisées par le mélangeur batch à deux barreaux décrit à la section IV.3, ont été analysées par calorimétrie différentielle (DSC). Le calorimètre utilisé est un Pyris Diamond DSC7 de PerkinElmer calibré avec soin. Son fonctionnement repose sur deux cellules identiques. La première est une cellule de référence, alors que la seconde contient l'échantillon analysé. L'appareil mesure la différence entre les deux flux d'énergies nécessaires pour faire varier la température des deux cellules avec le même taux pendant des opérations de refroidissement ou de réchauffement.

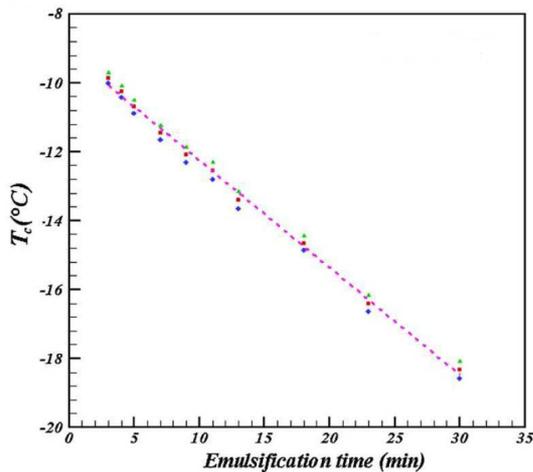
Nous avons montré, dans la section IV.3.2, que la granulométrie d'une ETC varie au cours de l'émulsification. Nous souhaitons donc établir les relations qui existent entre cette granulométrie et les propriétés thermophysiques.

Durant une émulsification à l'aide du mélangeur à deux barreaux et à une vitesse de  $\Omega = 90$  rpm, des prélèvements ont été réalisés à différents instants. Ainsi, des échantillons de 10 mg de ces prélèvements ont été analysés à la DSC, entre des températures de  $-20$  à  $30^\circ\text{C}$ , dans les deux sens. Il a été vérifié, au préalable, que l'huile de ricin ne cristallise pas dans cette gamme de température, puisqu'elle a exhibé un comportement amorphe [A10]. On s'attend donc à ce que seule la phase aqueuse cristallise (eau + le surfactant Triton X-405).

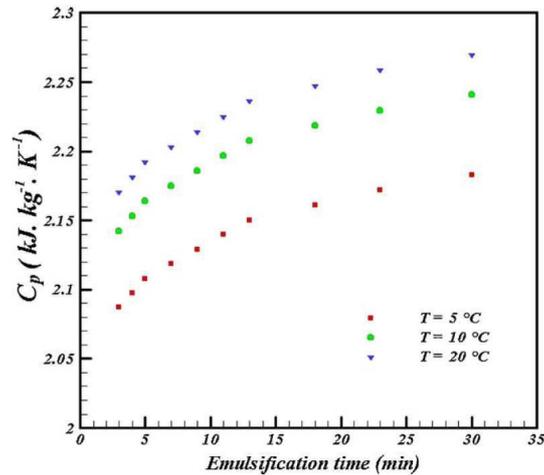
### IV.5.2. Quelques résultats marquants

Au cours d'une émulsification, la taille moyenne des gouttes diminue et leur rapport surface sur volume augmente. Ainsi, la surface des zones interfaciales augmente. Ces zones interfaciales comprennent les films entre deux gouttes voisines, les bords de Plateau et les noeuds entre plusieurs gouttes d'huile. Princen [83] a démontré que, pour une concentration en huile donnée, la proportion d'aire occupée par les films dans les zones interfaciales est fixe (approximativement 27% pour notre cas). Puisque l'épaisseur des films se réduit au cours de l'émulsification, le volume de solution aqueuse contenu dans ces films se réduit en faveur du volume contenu dans les bords de Plateau et les noeuds.

Nos analyses par calorimétrie ont montré que le retard à la cristallisation, ou la différence entre la température d'équilibre de fusion et la température de cristallisation, augmente avec le temps d'émulsification (c'est-à-dire avec la réduction du diamètre moyen). La température de fusion, pour sa part, est indépendante de la granulométrie (équilibre thermodynamique). La Fig. IV.16



**Figure IV.16.:** Température de cristallisation de la phase aqueuse dans des échantillons prélevés à différents instants du processus d'émulsification (trois échantillons par instant).



**Figure IV.17.:** Évolution de la chaleur spécifique de l'ETC au cours de l'émulsification. Mesures effectuées à trois températures différentes.

montre la relation entre la température de cristallisation  $T_c$  et le temps d'émulsification pour différents échantillons pris au même instant, ce qui prouve la reproductibilité de ces résultats. On observe alors une relation étonnamment linéaire entre  $T_c$  et le temps d'émulsification. A notre connaissance, c'est la première fois qu'un tel effet est observé. Nous l'expliquons par l'augmentation du confinement de la phase aqueuse contenue dans un réseau de films et de nodules de plus en plus fins (comme nous l'avons expliqué plus haut).

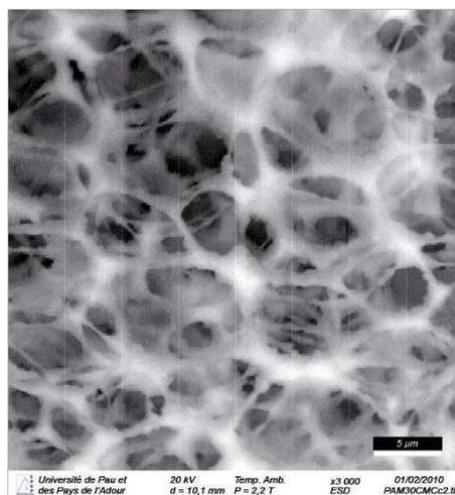
Pour proposer une description des phénomènes impliqués, nous écartons tout d'abord le mécanisme de nucléation hétérogène, selon lequel le premier germe cristallin apparaît sur un corps étranger (une paroi par exemple), qui serait pour une émulsion, l'interface huile-eau. En effet, l'aire de la zone interfaciale augmente au cours de l'émulsification, sans que la probabilité de cristallisation augmente, bien au contraire. Nous postulons donc que le mécanisme de nucléation est bien la nucléation homogène. Il a toujours été observé expérimentalement que le degré de surfusion augmente avec la réduction du volume de l'échantillon. Or, le volume de la solution aqueuse, dans notre cas, est constant, et son réseau d'interface est continu (la cristallisation s'y propage rapidement), ce qui nous pousse à penser que c'est le confinement qui influe sur le retard à la cristallisation pour une ETC.

La chaleur spécifique  $C_p$  est une donnée importante pour le dimensionnement de tous les procédés faisant intervenir des opérations de réchauffement et refroidissement. Malgré cette importance, très peu de travaux se sont penchés sur la mesure de  $C_p$  pour des ETC huile dans eau. Nous avons effectué, par DSC, des mesures de  $C_p$ , à trois températures différentes, de nos échantillons prélevés à différents instants de l'émulsification. Les résultats sont montrés sur la Fig. IV.17. La chaleur spécifique dépend bien de la température, mais elle dépend aussi de la morphologie de l'émulsion, même si cette dernière contient les mêmes proportions massiques d'huile, d'eau et de surfactant. Les mesures ayant été effectuées à l'équilibre thermique, nous supposons que la chaleur spécifique dépend de l'aire d'interface et de son énergie interfaciale, qui augmente avec la diminution du diamètre moyen. Nous pensons qu'il y a trois contributions au  $C_p$  : celle de l'huile, de la solution aqueuse et celle de l'interface qui, elle, varie avec la granulométrie. A notre connaissance, c'est la première fois que ce type de comportement est révélé.

## IV.6. Perspectives

Les travaux qui ont été menés dans cette thématique ont ouvert de larges champs d'application et d'extension. Ainsi une collaboration a-t-elle été initiée avec H. Deleuze de l'Institut des Sciences Moléculaires (ISM) de l'Université de Bordeaux, pour la réalisation d'ETC à base d'un sous-produit industriel d'origine végétale de type aqueux<sup>5</sup>. Notre procédé d'émulsification nous permet d'atteindre des concentrations qui n'étaient pas atteignables par les procédés classiques. Le but est la fabrication de mousses solides ultraporeuses par la réticulation de la phase aqueuse dans des moules, suivie de l'évacuation de l'huile, qui joue ici le rôle de gabarit liquide. Les monolithes en mousse réalisés serviront comme supports catalytiques, pour la catalyse en flux continu de réaction chimique. Des tests concluants ont été effectués, et la recherche de financement est en cours, à travers notamment le dépôt d'un dossier ANR.

Une autre application en cours d'étude actuellement, et qui a déjà été validée pendant la thèse de S. Caubet, est la réalisation de mousses ultraporeuses à base de polymère, appelées polyHYPE. Le polymère hydrosoluble sélectionné et introduit dans la phase aqueuse est le polyacrylamide. En fabriquant des émulsions très concentrées, lors de la réticulation de la phase continue, les films très fins entre les gouttes se percent et la phase dispersée peut être évacuée. Une photographie d'un exemple de mousse obtenue est montrée sur la Fig. IV.18.



**Figure IV.18.** Image par microscopie électronique à balayage d'un matériau polymère poreux obtenu à partir d'émulsification concentrée et réticulation du polymère (polyacrylamide). Ici les gouttes d'huile ont été retirées pour obtenir une mousse poreuse.

Si la concentration de l'émulsion est moins importante, la phase dispersée reste emprisonnée dans la matrice solide. Il est donc possible de disperser un matériau à changement de phase (MCP) dans cette matrice solide. L'utilisation de l'émulsification laminaire permet de contrôler précisément la granulométrie du matériau dispersé. Sur cette application, nous avons amorcé une collaboration avec plusieurs chercheurs de l'ISA-GITSE<sup>6</sup> de l'Université de Saragosse, en Espagne, pour le développement de composites isolants thermiques actifs. Un premier projet, sur deux ans, intitulé polysol-PCM a été financé par le fond Commun de Coopération Aquitaine-Aragon en 2010. Ce projet sera décrit plus en détail dans la section V.4.

5. Nos collègues de Bordeaux étant en cours de déposition d'un brevet concernant l'utilisation de ce produit, nous ne pouvons pas le préciser ici.

6. ISA (Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón), GITSE (Grupo de Ingeniería Termal y Sistemas Energéticos).



---

---

## CHAPITRE V

---

# *Changement de phase liquide-solide et convection*

La thématique du changement de phase liquide-solide apparaît souvent dans mes activités de recherche. Elle était le thème principal de ma thèse de doctorat. Elle fait partie des préoccupations soulevées par l'étude des émulsions très concentrées, et elle est au centre des études sur le contrôle de température de parois par des matériaux à changement de phase présentées dans ce chapitre (sections V.2 et V.3). Le changement de phase solide-liquide est également présent dans mes activités de recherche futures, puisqu'à la rentrée 2011, une nouvelle thèse que je co-dirigerai, aura comme sujet l'étude numérique de la solidification au cours de l'écoulement de fluides complexes.

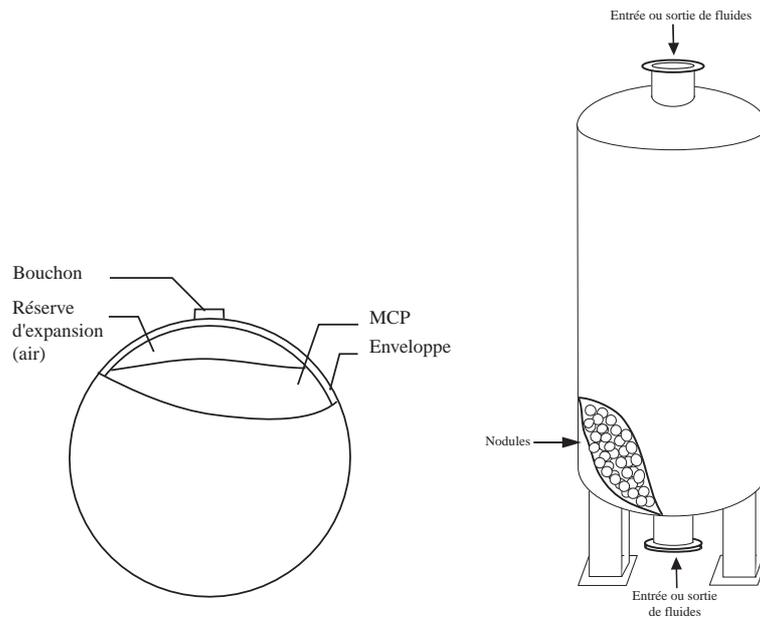
Sur cette thématique, j'ai produit à ce jour les publications suivantes : [A12, A11, A7, A6, A2, A1, C15, C12, C1, CN11, CN8, CN3, CN2, CN1] (voir liste I.4.3)

### **V.1. Étude de la convection autour d'un nodule sphérique contenant un Matériau à Changement de Phase au cours de sa cristallisation**

Mon sujet de recherche doctoral (DEA et Doctorat, 1996-2001) s'inscrit dans le contexte du stockage d'énergie en général, et celui du stockage du « froid » en particulier. Dans ce domaine, l'un des moyens les plus performants pour stocker de l'énergie est le stockage par chaleur latente.

Le procédé de stockage étudié (Fig. V.1), développé par l'entreprise CRISTOPIA, utilise une cuve de dimensions importantes, remplie d'un grand nombre de nodules sphériques de 7,7 cm de diamètre, contenant un Matériau à Changement de Phase (**MCP**). Le stockage du « froid » est réalisé en provoquant la cristallisation de ce matériau, à l'aide de la circulation (verticale ou horizontale) d'un fluide frigoporteur froid dans la cuve. L'énergie est récupérée par l'écoulement dans la cuve d'un fluide relativement chaud provoquant la fusion du MCP.

Ce mode de stockage du froid trouve des applications multiples dans plusieurs domaines, tels que la climatisation des grands bâtiments (ex. centres commerciaux, aéroports, immeubles de bureaux), le froid industriel (ex. industrie agroalimentaire, entrepôts frigorifiques) ou encore les



**Figure V.1.:** Schéma du nodule sphérique contenant du MCP et de la cuve de stockage en position verticale.

installations de secours (ex. stockage de produits chimiques ou explosifs). Le système de stockage du froid par chaleur latente permet de réduire la puissance frigorifique installée, puisque les pics de la demande en froid peuvent être satisfaits par de l'énergie stockée. Le stockage s'effectuant généralement la nuit, cela fait bénéficier de tarifs réduits d'électricité. Le stockage permet aussi aux machines frigorifiques de fonctionner dans leurs conditions optimales et d'améliorer ainsi leur rendement.

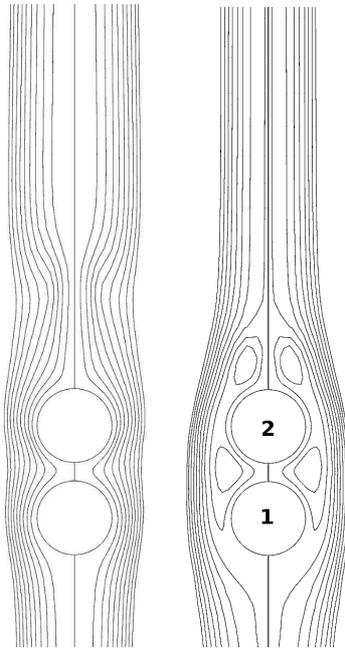
Dans ce travail, je me suis intéressé au cas d'un nodule pris seul dans un écoulement ascendant ou descendant. Une des particularités rencontrées dans ce procédé est l'apparition du phénomène de surfusion, puisque le MCP à base d'eau utilisé ne cristallise pas à sa température de fusion mais à une température plus basse. Le dégagement d'énergie latente au déclenchement de la cristallisation et l'augmentation brusque de la température de la surface du nodule créent, dans le fluide externe, des courants de convection naturelle qui s'opposent ou non à la convection forcée. On distingue alors deux modes d'écoulement, normal ou inverse, selon que les courants de convection naturelle ont le même sens que la convection forcée ou un sens inverse.

Un couplage fort existe alors entre la cinétique de cristallisation du MCP à l'intérieur du nodule et l'écoulement de convection mixte dans le fluide caloporteur externe. La démarche adoptée est numérique. L'écoulement externe a été modélisé par le code commercial de mécanique des fluides FLUENT, en utilisant des conditions aux limites thermiques au niveau de la surface du nodule calculées par un modèle que j'ai développé pour la simulation de la cristallisation. Ce modèle calcule le flux de chaleur dégagé par la surface du nodule et, pour cela, il utilise comme conditions aux limites la température de surface issue du calcul de l'écoulement externe. Ainsi à chaque pas de temps, les deux calculs, interne et externe, s'échangent leurs données.

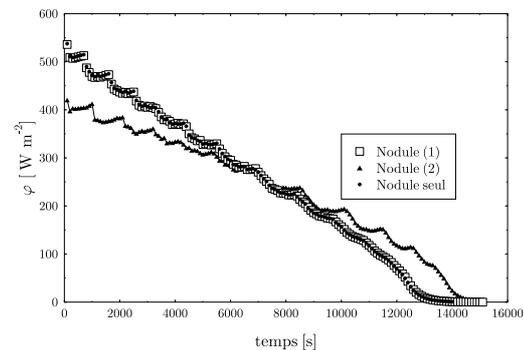
Deux modèles de cristallisation différents ont été développés. Le premier modèle est un modèle quasi-statique unidimensionnel, qui permet de suivre le déplacement du front de cristallisation (interface liquide-solide) supposé concentrique, tout en considérant une conduction thermique stationnaire dans la phase solide. Le second modèle est bidimensionnel axisymétrique et s'affranchit des hypothèses précédentes. Il s'appuie sur une formulation enthalpique de l'équation de la chaleur, avec un terme source, fonction de la température, où figure la fraction liquide [13].

Cette équation a été discrétisée par la méthode des volumes finis en coordonnées sphériques  $(r, \theta)$ . A chaque pas de temps, le système linéaire obtenu est résolu et la fraction liquide est mise à jour, de manière adéquate. Cette méthode permet un échange des informations locales avec le code FLUENT, alors que la première méthode échange des informations moyennées.

Deux nodules superposés ont été étudiés également, ce qui a permis de constater le ralentissement de la cristallisation du nodule supérieur sous l'effet de la cristallisation du nodule inférieur. En effet, même si l'écoulement en mode inverse fait apparaître des recirculations qui ne sont pas présentes en mode normal (Fig. V.2), l'impact du sens de la convection forcée sur le transfert thermique pariétal et sur la cinétique de cristallisation s'avère quasiment nul. Lorsque deux nodules entrent en cristallisation simultanément, les courants chauds issus du nodule du bas ralentissent la cristallisation du nodule du haut, comme le montre la Fig. V.3, alors qu'aucun effet n'est ressenti par le nodule du bas. En plus des résultats relatifs aux écoulements et à la convection naturelle autour du nodule, ces modélisations ont donné des précisions concernant la cinétique de cristallisation, l'évolution du front solide-liquide et le dégagement d'énergie à la surface du nodule. Enfin, elles ont montré l'impact limité de la vitesse de l'écoulement forcé et de son sens.



**Figure V.2.:** Lignes de courant autour de deux nodules superposés en cristallisation à  $t = 50$  s, dans un écoulement en mode normal (gauche) et en mode inverse (droite).



**Figure V.3.:** Evolution du flux thermique moyen dégagé par les deux nodules en cristallisation, comparé à celui d'un nodule seul.

## V.2. Fusion contrôlée par convection naturelle pour le refroidissement pariétal

Il s'agit d'une étude plus récente, menée en collaboration avec mes collègues T. Kousksou et Y. Le Guer du SIAME, et dont les résultats ont été publiés dans [A12, CN11, CN8].

### V.2.1. Introduction

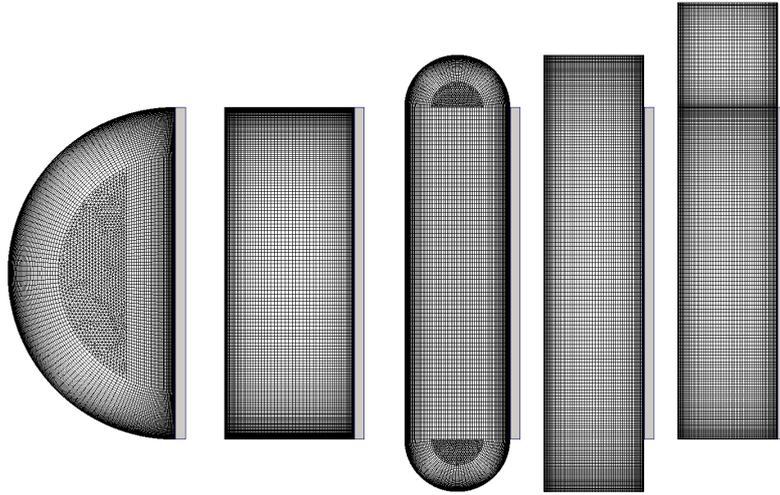
La fusion couplée à la convection naturelle dans des cavités contenant un matériau à changement de phase (MCP) a fait l'objet de beaucoup d'études expérimentales et numériques, car elle présente un intérêt dans plusieurs domaines, comme celui de l'isolation thermique, du stockage d'énergie latente, ou encore du refroidissement passif de composants électriques ou électroniques [84, 85]. Dans ce dernier domaine d'application, un intérêt croissant s'est porté sur le refroidissement des circuits électroniques, tels que les processeurs d'ordinateurs personnels portables ou ceux des cartes graphiques. Ces éléments sont de plus en plus miniaturisés et leur dégagement de chaleur se fait à des densités de plus en plus élevées, mais souvent dégagées par intermittence. Dans d'autres situations, on cherche à refroidir ou à contenir la température d'éléments électriques sur des sites isolés (ou difficiles d'accès), sans utiliser d'élément mécanique comme les ventilateurs qui nécessitent un entretien régulier à cause de l'usure des parties mobiles. L'efficacité de tels dispositifs dépend de la vitesse de fusion du MCP, afin que la chaleur latente joue son rôle rapidement mais aussi dans la durée. Ceci nécessite de bien appréhender la dynamique de fusion et son couplage étroit avec la convection naturelle au sein du MCP liquide. Outre les propriétés thermo-physiques propres au MCP, la géométrie de la cavité a un impact important sur les courants de convection et par conséquent sur la dynamique de fusion.

### V.2.2. Systèmes étudiés

Nous nous intéressons dans cette étude au cas d'une paroi verticale débitant un flux thermique élevé mais limité dans le temps. Nous cherchons à maintenir cette surface à des températures modérées pour éviter l'endommagement que pourrait subir le composant électrique auquel elle est liée. A cet effet, nous analysons ici la solution qui consiste à équiper cette paroi d'un réservoir (ou capsule) rempli de MCP. Cette cavité couvre entièrement, par une de ses faces, la surface à refroidir. Les autres faces externes sont en contact avec l'air ambiant avec lequel elles échangent de la chaleur uniquement par convection naturelle (Fig. V.4). Au début du dégagement de chaleur à la surface à refroidir, la température de celle-ci augmente et la fusion du MCP démarre. Cette fusion absorbe de l'énergie sous forme latente. Des courants de convection naturelle prennent place progressivement dans le MCP liquide. Cet écoulement assurera par la suite le dégagement de la chaleur de la surface chauffée vers le MCP et entretiendra le processus de fusion. Un point faible important de ce type de solution, auquel il faudrait remédier, est la faible conductivité thermique des MCP courants. Ceci peut entraîner, pour les grandes densités de flux, des pics de température élevés dans les premiers instants où seul le transfert par conduction est prépondérant. Parmi les solutions qui peuvent être envisagées, il y a l'inclusion dans la cavité remplie de MCP d'une mousse métallique conductrice ou l'installation d'ailettes [85]. La solution considérée ici consiste à améliorer la conductivité du MCP en introduisant des nanoparticules de graphite très conducteur. Ces matériaux connaissent un développement important et s'avèrent très prometteurs. Certaines compositions portent la conductivité thermique du MCP à une valeur autour de l'unité (SI) [86].

Après le démarrage de la convection naturelle dans le MCP liquide, le processus de fusion est piloté par cette dernière. Les vitesses et la forme de l'écoulement sont, pour leur part, dépendantes de la forme et la géométrie de la cavité. Nous avons donc envisagé d'étudier des cavités de formes diverses, notamment arrondies, en les comparant à des formes rectangulaires classiques. L'ensemble des cavités étudiées est représenté sur la Fig. V.4.

La simulation numérique de ces phénomènes permet de procéder à des études paramétriques poussées aidant à l'optimisation rapide du système étudié avant la phase de fabrication du pro-



**Figure V.4.** : Différentes géométries des cavités étudiées (a,b, c, d, et e) et les maillages correspondants (en gris : la position de la surface ( $S_p$ ) à flux thermique constant).

tototype expérimental. Nous procédons donc dans cette étude à la modélisation numérique du système par la résolution des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, en tenant compte du phénomène de changement de phase solide-liquide. La méthode numérique employée est celle décrite à la section II.4 car le code utilisé est le code Tamaris. La validation du code dans une situation d'écoulement similaire est présentée à la section A.1.5.

### V.2.3. Conditions d'écoulement et propriétés du MCP

Nous étudions ici cinq géométries avec des caractéristiques différentes mais contenant le même volume de MCP. Ces cavités différentes ont en commun la surface  $S_p$  qui mesure  $H = 5$  cm de hauteur et leurs autres dimensions sont donc adaptées en conséquence. Dans le cadre de cette étude, nous nous limitons à des configurations bidimensionnelles que nous étudions dans un plan. Les deux premières géométries à partir de la gauche (a et b) sur la Fig. V.4 sont des cavités dont un des côtés correspond exactement à la surface  $S_p$  à refroidir. La première est arrondie, la seconde est rectangulaire. Les trois autres cavités (c, d et e) dépassent verticalement cette surface. Elles ont donc des épaisseurs réduites. Pour la dernière cavité e, le dépassement est localisé uniquement au-dessus de la surface  $S_p$ . Les largeurs et hauteurs maximales des cavités sont ( $l : h$  en cm) : (a) 2,5 : 5 ; (b) 2 : 5 ; (c) 1,6 : 6,6 ; (d) et (e) 1,5 : 6,6. Le flux thermique sur la surface  $S_p$  est fixé à  $\varphi = 10^4 \text{ W.m}^{-2}$  et sur le reste des parois nous fixons un coefficient d'échange moyen  $h = 30 \text{ W.K}^{-1}.\text{m}^{-2}$  et une température d'air extérieur égale à la température initiale  $T_\infty = T_0 = 20$  °C. Les cinq maillages utilisés comprennent environ 10500 cellules (une étude de l'effet de la densité du maillage a été réalisée).

Un MCP type a été adopté pour cette étude. Il s'agit d'un mélange d'une cire de paraffine pure et de nanoparticules de graphites [86], dont les propriétés sont considérées identiques dans les deux phases solide et liquide et non dépendantes de la température, afin de simplifier l'étude. Les valeurs utilisées sont celles détaillées dans le Tab. V.1. En considérant un écart de température final ou maximal  $\Delta T = 90 - 20 = 70$  °C correspondant au stade où la paroi  $S_p$  atteint la température seuil, on peut calculer un nombre de Rayleigh représentatif de l'écoulement égale à  $Ra_H = 2,7 \times$

$10^7$ , cette valeur correspond à un écoulement laminaire. Le nombre de Stefan obtenu pour cet écart est  $Ste = 0,87$ .

Viscosité dynamique ( $\eta$ )	$5 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$
Masse volumique ( $\rho$ )	$800 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$
Conductivité thermique ( $\lambda$ )	$1 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\text{K}^{-1}$
Chaleur spécifique ( $C_p$ )	$2500 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1}$
Chaleur latente ( $L$ )	$200 \text{ kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
Dilatation thermique ( $\beta$ )	$10^{-3} \text{ K}^{-1}$
Nombre de Prandtl	12,5
Température de fusion $T_f$	$20 \text{ }^\circ\text{C}$

Table V.1.: Propriétés du MCP.

## V.2.4. Résultats

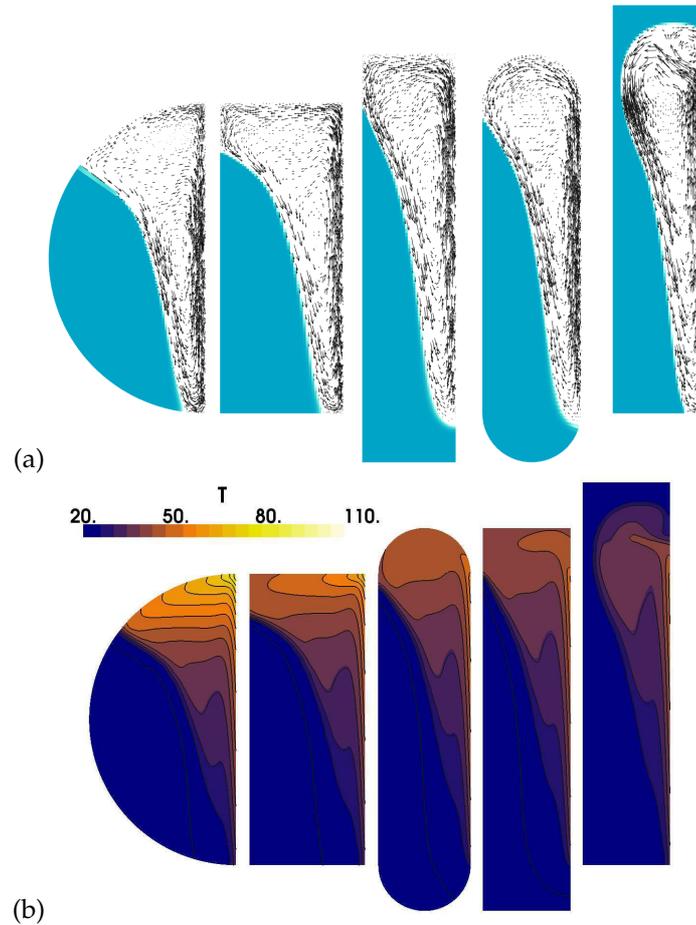
### Champs des vitesses et fronts de fusion

Nous présentons dans un premier temps (Fig.V.5(a)) la forme des écoulements dans les cavités, ainsi que les positions du front de fusion au même instant  $t = 200 \text{ s}$ , où approximativement 50% du MCP a fondu. Ces champs de vitesse présentent beaucoup de similitudes pour les 5 cavités, avec pour les cavités **c**, **d** et **e** des valeurs plus importantes grâce à l'espace liquide qui s'est créé au dessus de la surface  $S_p$ . Pour la cavité **e**, on remarque l'apparition de manière oscillante d'une double recirculation du fluide dans un creux à la forme arrondie. La particularité de cette cavité est qu'elle met en contact plus de MCP avec les courants fluides ascendants. La Fig.V.5(b) donne les champs de la température, on y remarque une stratification importante, surtout pour les cavités à hauteur réduite **a** et **b**.

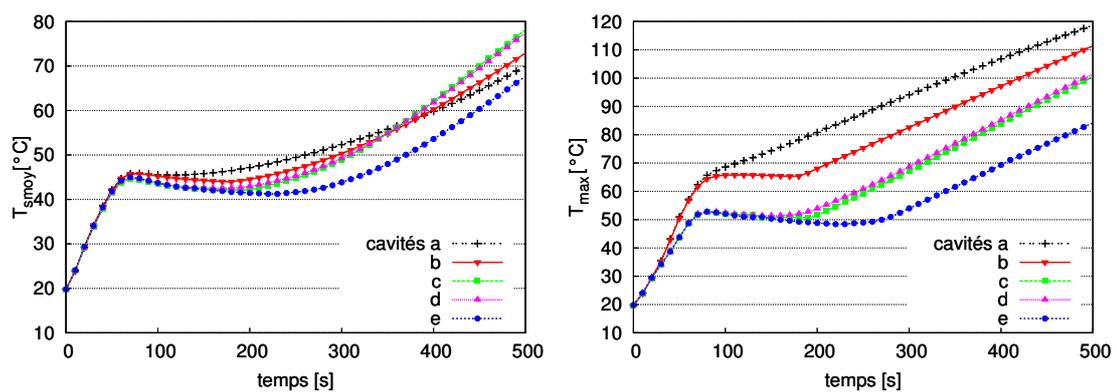
### Évolution des températures des parois

Sur la Fig. V.6, nous donnons l'évolution temporelle de la température moyenne  $T_{\text{smoy}}$  de la surface  $S_p$  ainsi que celle de son point le plus chaud  $T_{\text{max}}$ . La température moyenne évolue de la même manière pour les 5 cavités pendant la première minute en augmentant de façon linéaire : le transfert est essentiellement conductif. Ensuite, son évolution est ralentie pour la cavité **a** et même inversée pour la cavité **e**. La température maximale  $T_{\text{max}}$ , qui se situe en haut de la surface  $S_p$ , montre assez tôt des évolutions différentes selon les cavités. Pour la cavité **a**, son évolution change de pente vers  $60 \text{ }^\circ\text{C}$ . Pour la cavité **b**, elle reste stable à cette valeur pendant une centaine de secondes avant de repartir à la hausse. Les cavités plus aplaties, **c**, **d** et **e** maintiennent leurs  $T_{\text{max}}$  à moins de  $52 \text{ }^\circ\text{C}$  jusqu'à  $t = 200 \text{ s}$  pour **c** et **d** et jusqu'à  $t = 300 \text{ s}$  pour **e**. Au-delà, l'évolution devient linéaire et tend vers des valeurs élevées : le front de fusion étant à ce stade loin de la paroi, il joue un rôle moins important. On peut donc en déduire que, en utilisant la cavité **e**, il est impératif que ce dégagement thermique ne dure pas plus de  $500 \text{ s}$  afin que le point le plus chaud ne dépasse pas les  $90 \text{ }^\circ\text{C}$ . Cette durée se réduit à  $250 \text{ s}$  pour la cavité **a**.

Au vu de ces résultats, il est possible d'expliquer la différence de comportement entre les cavités **a** et **b** par la proximité d'une quantité plus importante de MCP de la surface  $S_p$  dans le cas de la cavité **b** : la forme circulaire de la cavité **a** augmente son épaisseur en son centre et la réduit sur les extrémités, notamment celle du haut. En affinant les cavités à volume constant (**c**, **d** et **e**),



**Figure V.5.:** (a) Vecteurs vitesses et positions des fronts de fusion et (b) champs des températures pour les 5 cavités (a, b, c, d et e) à l'instant  $t = 200$  s.



**Figure V.6.:** Évolution au cours du temps de la température moyenne (gauche) et de la température maximale (droite) de la surface  $S_p$ .

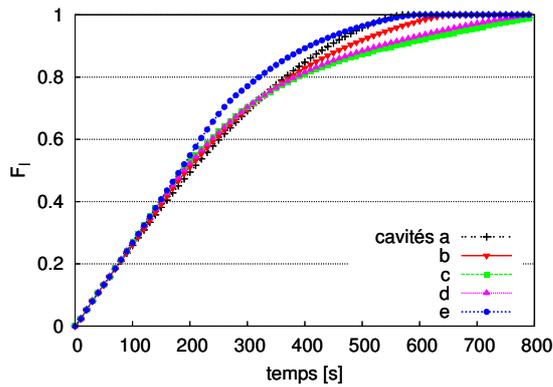


Figure V.7.: Évolution de la fraction liquide totale.

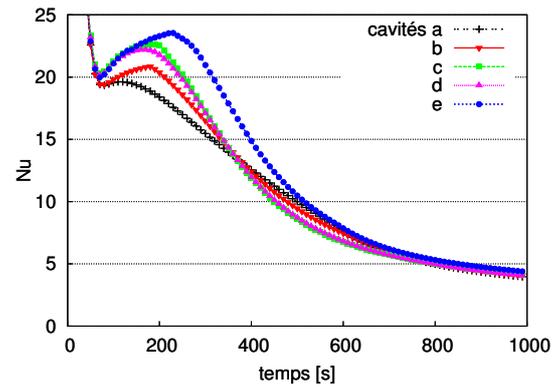


Figure V.8.: Évolution du nombre de Nusselt pariétal.

la performance est améliorée, et elle est maximale pour la cavité **e** qui contient plus de MCP dans sa partie haute.

### Évolution de la fusion globale du MCP

L'examen des courbes de progression de la fraction liquide totale (Eq. A.1) dans les 5 cavités tracées sur la Fig. V.7 montre une évolution identique jusqu'à  $t \approx 150$  s. Ensuite la cavité **e** présente l'évolution la plus rapide. Le comportement des autres cavités se différencie à partir de  $t \approx 400$  s : les cavités qui possèdent une extension basse voient leur fusion freinée, car une partie du MCP solide reste piégée plus longtemps dans ces poches inférieures.

### Transfert thermique pariétal

Pour rendre compte des transferts thermiques à la paroi, nous définissons un nombre de Nusselt tel que :

$$\text{Nu} = \frac{\varphi H}{k(T_{s_{\text{moy}}} - T_f)}$$

La Fig. V.8 nous donne l'évolution de cette quantité pour les 5 cavités. Après une période de transition rapide où les valeurs sont très importantes ( $T_{s_{\text{moy}}} - T_f \approx 0$ ) avant de chuter à 20, nous observons une remontée suivie d'une baisse progressive ayant des ampleurs différentes selon les cavités. Cette « bosse » correspond à l'impact de la fusion du MCP et de la convection naturelle sur la température de la paroi. Elle est la plus importante pour la cavité **e** et la plus faible pour la cavité **a** en accord avec tous les précédents résultats.

### V.2.5. Conclusion

Dans cette étude, nous avons proposé et comparé plusieurs solutions pour refroidir une paroi verticale évacuant un flux constant. Ces solutions sont basées sur des cavités de différentes géométries remplies de MCP dont la conductivité est améliorée. Nous avons montré l'importance du choix de la géométrie de la cavité pour maintenir la température du point le plus chaud à des températures en dessous de la température d'altération pendant une durée suffisamment longue. Nous avons établi que les géométries aplaties possédant une extension plus importante

au-dessus de la surface donnent de meilleurs résultats. Ceci étant valable pour des surfaces verticales, une suite de ce travail pourrait concerner l'étude de surfaces ayant d'autres orientations par rapport à la gravité. Il serait également important d'étudier l'impact du choix de la géométrie sur la phase de restitution de l'énergie stockée (solidification du MCP). D'autres aspects négligés dans cette étude pourraient être pris en compte, comme la relation entre le pourcentage de nanoparticules introduites et les propriétés du fluide telles que la viscosité.

### V.3. Transport d'énergie par coulis stabilisés

Le recours aux fluides frigoporteurs comme un moyen de transport d'énergie est très répandu dans les installations frigorifiques, puisqu'il permet de limiter la quantité du fluide frigorigène utilisée. Les coulis stabilisés font partie des fluides frigoporteurs diphasiques les plus performants et ils sont le sujet d'une grande activité de recherche. Outre le coulis de glace, on peut citer les billes de gel, les billes encapsulées et les microencapsulations.

#### V.3.1. Fluide frigoporteur chargé de billes remplies de matériau à changement de phase

En 2002, j'ai réalisé une première étude portant sur la modélisation du comportement d'un fluide chargé de billes encapsulant un matériau à changement de phase (MCP). Cette étude a été faite en collaboration avec B. Stutz et J.-P. Dumas, du LaTEP. L'écoulement d'un fluide dans un échangeur a été modélisé par un modèle unidimensionnel, en prenant en compte la présence de petites capsules sphériques de 2 mm de diamètre, remplies de MCP. L'hypothèse de monodimensionnalité devient acceptable à partir d'un nombre de Froude suffisamment élevé, rendant le profil de vitesse de l'écoulement en suspension relativement plat.

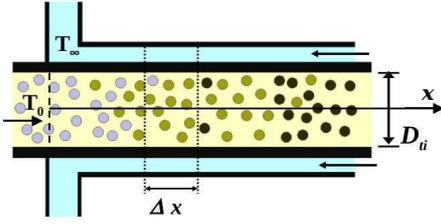
Le phénomène stochastique de surfusion a été pris en compte à travers une fonction de probabilité de cristallisation de la forme :

$$J(T) = A \exp\left(-\frac{B}{T(T - T_f)^2}\right) \quad (V.1)$$

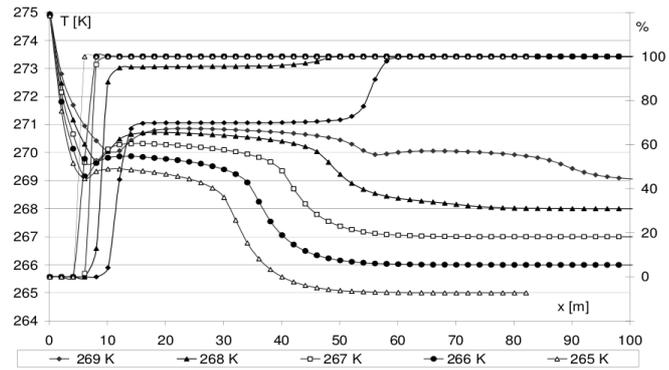
avec A et B deux constantes et  $T_f$  la température fusion. Ainsi,  $\Delta n = J(T)n_l \Delta t$  donne le nombre probable de billes dont la rupture de métastabilité se produit à la température T pendant une durée  $\Delta t$ , parmi les  $n_l$  billes toujours à l'état liquide.

Le modèle effectue le bilan thermique d'un volume de contrôle  $\Delta x$  du fluide frigoporteur (Fig. V.9) se déplaçant le long du tube de l'échangeur, en prenant en compte l'énergie dégagée par les billes. Pour cela, il différencie les billes toujours à l'état liquide des autres classes de population de billes dont la cristallisation a démarré à différents instants et qui sont à différents stades d'avancement. La cristallisation à l'intérieur des billes est modélisée par un modèle enthalpique 1D [13] afin de tenir compte également de l'énergie sensible des billes.

Différents effets ont été étudiés à l'aide de ce modèle, comme celui de la vitesse du fluide dans le tube U, du pourcentage de billes  $\alpha$  et de la température de la paroi du tube (température de la calandre)  $T_\infty$ . Ce dernier effet est analysé sur la Fig. V.10 qui donne la température du fluide le long du tube pour différentes températures de paroi  $T_\infty$ . On y observe que la température du fluide descend en-dessous de la température de fusion du MCP ( $T_f = 273$  K), avant d'augmenter et de suivre un plateau correspondant à la cristallisation des nodules et au dégagement d'énergie qui en résulte. Dans le cas où  $T_\infty$  est relativement haute ( $T_\infty = 269$  K), l'augmentation de



**Figure V.9.:** Schéma du tube de l'échangeur où circule le fluide chargé de billes et sa calandre.



**Figure V.10.:** Température du fluide chargé et pourcentage des billes dont la cristallisation a débuté, pour différentes températures de calandre  $T_\infty$ .  $\alpha = 30\%$  et  $U = 1$  m/s.

température du fluide réduit considérablement la probabilité de cristallisation, ce qui empêche la transformation de nouvelles billes. Leur cristallisation survient plus tard, lorsque la température redescend.

Plus de détails sur cette étude peuvent être trouvés dans [CN3].

### V.3.2. Convection forcée dans une suspension de MCP microencapsulé surfondu

Plus récemment, j'ai collaboré avec mes collègues T. Kousksou, Y. Le Guer, T. El Rhafiki et Y. Zéraouli sur une étude relativement similaire à celle présentée dans la section précédente. Néanmoins, cette nouvelle étude se veut plus complète. Elle a été publiée dans [A7]. Il s'agit de l'écoulement, dans un tube, d'une suspension de micro-encapsulation de MCP. Le modèle élaboré est bidimensionnel axisymétrique. L'équation de l'énergie résolue est de la forme :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u C_p \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda_e \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda_e \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S \quad (\text{V.2})$$

La vitesse  $u$  est celle d'un écoulement laminaire considéré comme complètement développé avec un profil parabolique. De plus, les propriétés thermophysiques du fluide (comme la conductivité effective  $\lambda_e$ ) tiennent compte de la présence des particules [87]. Les particules sphériques sont considérées comme rigides, inertes et avec une densité proche du fluide porteur. Le terme source  $S$  prend en considération l'énergie latente libérée ou absorbée par les micro-encapsulations, respectivement lors de la cristallisation ou de la fusion. Lors d'un processus de refroidissement (stockage du froid), la surfusion est prise en compte à travers une fonction de probabilité similaire à celle de l'Eq. (V.1). Cela implique également le suivi des différentes populations de particules démarrant leurs transformations à différents instants. Ce modèle a été comparé avec satisfaction à l'étude expérimentale de Goel et al. [88], lors de la fusion du MCP car, à ce jour, aucun résultat expérimental concernant la cristallisation avec surfusion, utile pour une validation, n'est disponible dans la littérature.

Les effets de plusieurs paramètres ont été étudiés, comme :

- La densité du flux thermique à la paroi,  $q_w''$ ,
- La fraction volumique des micro-particules  $\epsilon$ ,

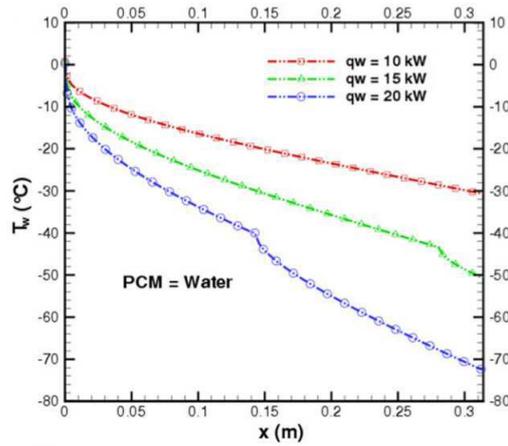


Figure V.11.: Température de la paroi du tube le long de celui-ci pour différentes valeurs du flux thermique à la surface ( $Re = 200$ ;  $Ste = 1$ ;  $r_p = 80\mu m$ ;  $\varepsilon = 0, 2$ ).

- Le nombre de Stefan de la suspension  $Ste$  (rapport de son énergie sensible sur son énergie latente),
- Le diamètre des micro-particules  $r_p$ ,
- Le nombre de Reynolds de l'écoulement.

La Fig. V.11 montre l'évolution de la température de la paroi le long du tube, pour différentes valeurs du flux thermique pariétal de refroidissement  $q_w$ . Sur la courbe de  $q_w = 20$  kW, on observe un changement de pente qui correspond à la position du début de la cristallisation des particules. Elle est due au changement des propriétés du matériau, lors du passage de l'état liquide à l'état solide. Pour  $q_w = 15$  kW, cette transition se manifeste plus loin dans le tube et à une température légèrement plus basse, car la probabilité de cristallisation est ralentie par un taux de refroidissement moins important.

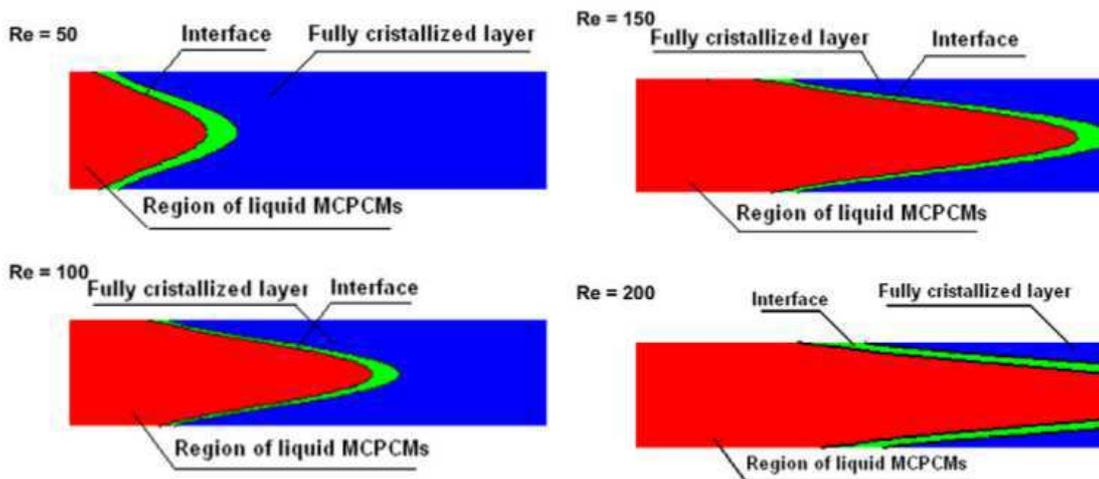


Figure V.12.: Cartographie de la fraction de MCP liquide pour différentes valeurs de  $Re$  ( $q_w = 20$  kW,  $Ste = 1$ ;  $r_p = 80\mu m$ ;  $\varepsilon = 0, 2$ ).

Lorsque le nombre de Reynolds de l'écoulement augmente (Fig. V.12), on observe le déplacement de la zone restant à l'état liquide vers l'aval. A partir de  $Re = 150$ , une partie des particules quitte le tube sans être solidifiée car leur temps de séjour dans le tube se réduit avec l'augmentation du débit. Cependant, le taux de MCP solidifié est plus important puisque le débit est plus

grand. La Fig. V.13 montre l'impact du nombre de Reynolds sur la température de la paroi  $T_w$ . On remarque que la position de l'inflexion de la courbe de  $T_w$  correspond à la zone de transition entre phases liquide et solide et qu'un débit plus important maintient une température de paroi plus haute.

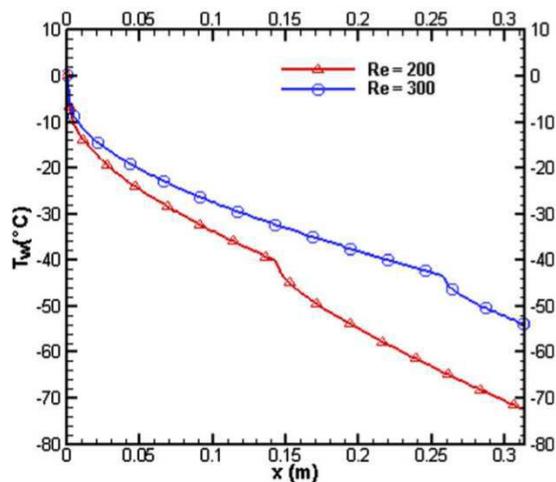


Figure V.13.: Effet du Re sur la température de la paroi du tube ( $q_w = 20 \text{ kW}$ ,  $Ste = 1$ ;  $r_p = 80 \mu\text{m}$ ;  $\varepsilon = 0, 2$ ).

Cette étude a montré que ce modèle simplifié permet d'apprécier l'importance de certains paramètres. Ainsi, il est apparu que la caractérisation précise des propriétés thermophysiques de la suspension (conductivité, viscosité, probabilité de cristallisation ...) est indispensable pour la conception et le dimensionnement de ce type d'échangeur. Il serait donc intéressant de réaliser des expérimentations dédiées à la validation du modèle, afin de l'affiner et l'utiliser pour l'analyse paramétrique de ce procédé.

#### V.4. Projet en cours : modélisation du comportement thermique d'un mur à inclusion de MCP

Cette étude s'insère dans un projet plus large (le projet Polysol) de collaboration entre le SIAME, l'IPREM de l'UPPA, et le I3A-GITSE de l'Université de Saragosse pour le développement de composites isolants thermiques. Le projet consiste à développer conjointement en Aquitaine et en Aragon une technologie innovante pour la fabrication de composites isolants thermiques actifs, comportant une matrice polymère avec des inclusions de matériaux à changement de phase (MCP). Le composite est obtenu à l'aide du procédé d'émulsification concentrée basse énergie décrit dans le chapitre IV. Le MCP est dispersé dans une phase continue (la matrice) constituée d'un mélange de polymères. En plus de deux volets expérimentaux consacrés à la réalisation du matériau et à sa caractérisation, ce projet comporte un volet de modélisation numérique.

Le modèle en cours de développement considère un mur constitué d'une matrice solide contenant un nombre important de micro-inclusions sphériques de MCP dont la distribution de taille est déterminée par le processus d'émulsification (voir par exemple la Fig. IV.9). Ce mur fait l'objet d'une sollicitation thermique instationnaire sur une de ses faces. Sa section est discrétisée en volumes de contrôle (Fig. V.14). L'équation de la chaleur est résolue dans ces volumes de contrôle en prenant en compte la cristallisation ou la fusion de différentes populations de sphères de différentes tailles à l'aide d'une méthode enthalpique unidimensionnelle. Le modèle peut être

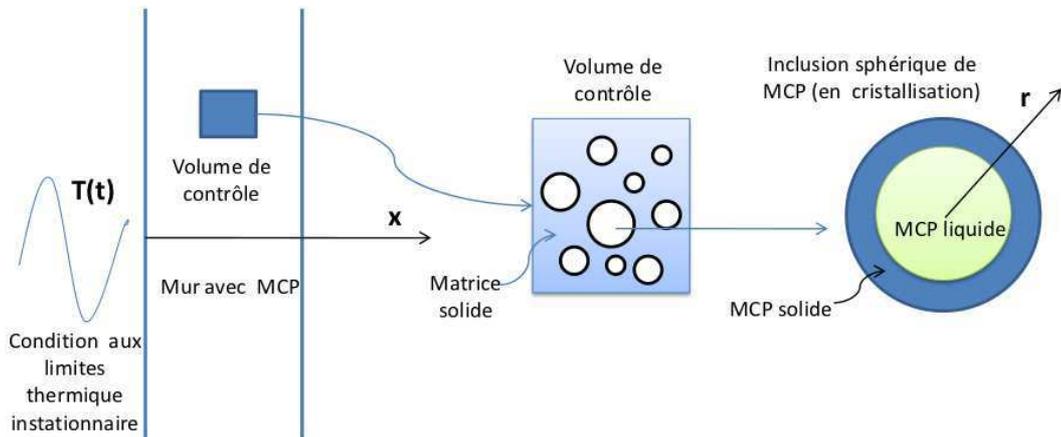


Figure V.14.: Schéma du modèle du mur à inclusions de MCP.

complexifié en incluant l'effet de la surfusion par l'introduction d'une probabilité de cristallisation. Après validation expérimentale, ce modèle pourra être utilisé pour étudier les effets de la granulométrie et du pourcentage de MCP sur l'efficacité de l'isolant.



---

---

# CHAPITRE VI

---

## *Autres travaux*

Dans ce chapitre je présente des études qui ont récemment démarré ou qui ne font pas ou plus partie de mes thématiques principales de recherche.

### **VI.1. Écoulements à effets thermocapillaires**

Les effets thermocapillaires (ou effets Marangoni) peuvent avoir un impact important dans plusieurs situations impliquant des écoulements à surface libre avec convection thermique. Quand un gradient thermique est appliqué perpendiculairement à une couche mince et plane d'un fluide à surface libre, de la convection s'organise sous forme cellulaire à partir d'un état de repos initial. Le déclenchement de cette convection est dû aux effets combinés de la déstabilisation de la stratification thermique et aux effets thermocapillaires. En effet, la thermodépendance de la tension interfaciale à la surface libre peut déstabiliser l'état du fluide statique vers des cellules de convection plus ou moins régulières. La taille de ces cellules a la même échelle de grandeur que l'épaisseur de la couche fluide. Le gradient thermique normal peut être créé par de la convection à la surface ou par l'évaporation du fluide ou d'un solvant qu'il contient.

Si ces phénomènes ont fait l'objet d'une grande quantité d'études théoriques qui ont amélioré grandement la compréhension de la physique de l'écoulement, il n'en reste pas moins que la simulation numérique directe permet de réaliser des études complémentaires plus poussées. En effet, la résolution des équations complètes de l'écoulement donne la possibilité de se dispenser de plusieurs hypothèses simplificatrices utilisées dans les études de stabilité. Elle rend possible également un affranchissement des complications introduites par la flottabilité lors des expérimentations dans le champ de la gravité terrestre.

Dans le cadre d'un projet de recherche HC Volubilis (2009-2012), auquel je participe, et qui fait l'objet d'une coopération entre l'Université de Pau et des Pays de l'Adour, en France, et les Universités d'Agadir et de Marrakech, au Maroc, deux thèses de doctorat en co-tutelle ont démarré en septembre 2009, à Pau, pour l'étude numérique des instabilités hydrodynamiques et thermocapillaires d'une couche fluide sujette à un gradient thermique. Cette couche fluide est statique pour la première thèse (convection Bénard-Marangoni), et en écoulement pour la seconde (Poiseuille-Bénard-Marangoni). Ces deux thèses sont dirigées au sein de l'axe « Transport Multiphasique » du Laboratoire SIAME, par Y. Le Guer et S. Blancher. Les Directeurs de thèse au Maroc sont T. Mediouni (Agadir) et B. Benhamou (Marrakech) et pour la seconde thèse unique-

ment). Je participe activement à l'encadrement de ces deux thèses qui reposent principalement sur l'utilisation du code Tamaris que je développe (cf. chap. II).

### VI.1.1. Simulation de la convection de Bénard-Marangoni dans des récipients cylindriques

Il s'agit du travail de thèse de Rachid Es-Sakhy, dont les premiers résultats ont été communiqués dans [CN15, CN12] (voir liste I.4.3).

#### Description

L'étude porte sur les écoulements convectifs dans une couche horizontale de fluide à surface libre, initialement au repos et soumise à un gradient de température. Ces écoulements peuvent être produits soit par les forces de flottabilité, soit par thermocapillarité, soit encore par ces deux effets conjugués. Dans la littérature, ces phénomènes sont désignés comme instabilités de Rayleigh-Bénard-Marangoni ou le plus souvent comme instabilités de Bénard-Marangoni. Ces phénomènes sont rencontrés dans les procédés mettant en jeu la croissance des cristaux, ou ceux qui concernent le revêtement de surface par film mince, ainsi que dans les expérimentations des écoulements à faible gravité. Beaucoup d'études expérimentales sur la convection de Bénard-Marangoni ont été entreprises pour comprendre les mécanismes responsables de ces phénomènes d'instabilité. Koshmeider et al. [89] ont par exemple mis en évidence l'influence de la géométrie du récipient et de son rapport de forme sur le nombre des cellules convectives obtenues, Rahal et al. [90] ont pour leur part étudié l'influence du refroidissement surfacique (nombre de Biot) et de la nature du fluide (nombre de Prandtl) sur la convection de Bénard-Marangoni dans des petits récipients cylindriques. D'autres travaux numériques ont été menés pour étudier ces phénomènes, comme ceux de Médale et al. [91] et de Kuhlmann et al. [92]. Ces études ont montré que plusieurs facteurs tels que la géométrie des cavités et les propriétés physiques du fluide influent de façon importante sur les motifs des écoulements convectifs et leur distribution et par conséquent sur les transferts thermiques au sein du fluide.

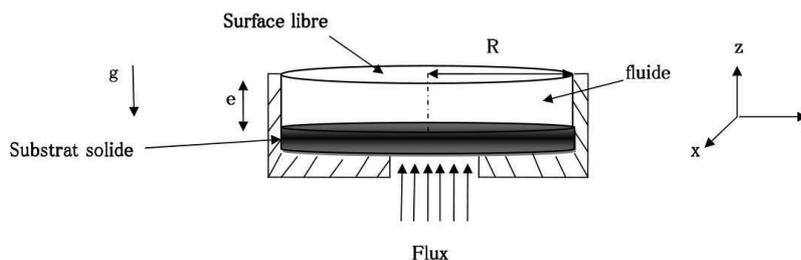


Figure VI.1.: Couche liquide dans un récipient cylindrique chauffé par son centre.

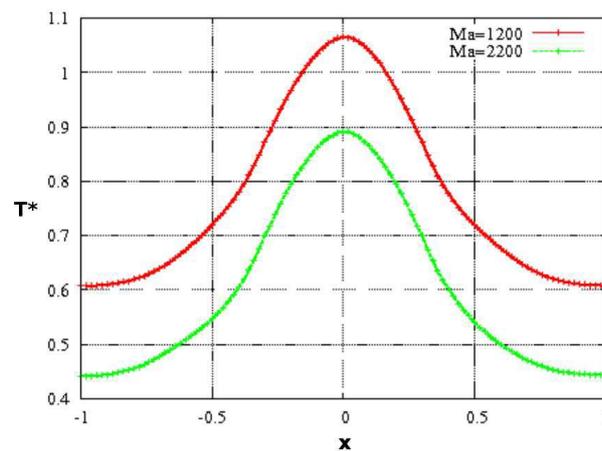
La situation étudiée ici est celle d'un récipient cylindrique de rayon  $R$  et de profondeur  $e$ , chauffé par le bas de manière non uniforme (Fig. VI.1). Le rapport de forme du récipient est de  $2R/e = 10$ . La base du récipient est composée d'un substrat solide dont la conductivité thermique est différente de celle du liquide et possède une épaisseur non nulle. Elle est chauffée uniquement sur sa zone centrale par un flux thermique  $q$ . Suivant la valeur de la conductivité du substrat, le profil de température à l'interface solide-liquide peut varier d'une forme centrée vers une forme

plate et cela induit des différences importantes dans les mécanismes d'écoulement et de transfert thermique.

La démarche utilisée est la résolution directe des équations 3D de Navier-Stokes et de la conservation de l'énergie par le code Tamaris (chapitre II), en prenant en compte les effets thermocapillaires, comme précisé dans la section II.2.2. La condition aux limites thermique à la surface libre est celle de l'Eq. II.16, mais en ne retenant que la contribution convective (sans évaporation pour le moment). La surface libre est supposée plane dans les conditions étudiées. La condition aux limites sur la partie centrale ( $\sqrt{x^2 + y^2} \leq 0,3 R$ ) de la surface basse du substrat solide est celle de l'Eq. II.12, le reste des parois étant adiabatique. La conduction thermique dans le substrat solide est modélisée de manière à garantir la conservation du flux et la continuité de la température à travers l'interface solide-liquide. Un maillage unique couvre les deux milieux, qui ont des propriétés différentes, notamment la viscosité du milieu solide  $\eta_s$  fixée à une valeur beaucoup plus grande que celle du fluide :  $\eta_s/\eta_f = 10^8$ . Ceci garantit une vitesse nulle dans les cellules de calcul du milieu solide. Le maillage utilisé contient 380000 cellules. La validation du code pour les situations d'écoulement thermocapillaire en cavités ouvertes est présentée à la section A.1.7.

### Quelques résultats

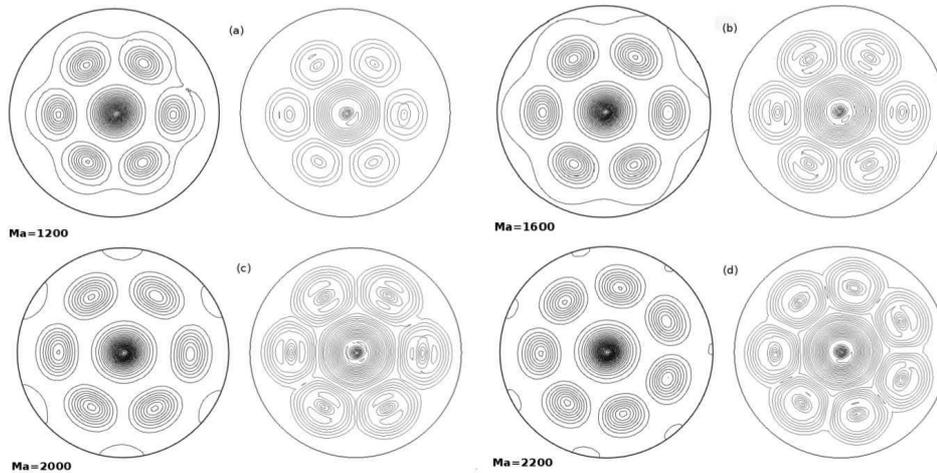
Ce travail est actuellement en cours. Néanmoins, les premières études ont montré l'effet important de certains des paramètres étudiés, comme la force de la convection à la surface libre (influence du nombre de Biot), l'importance relative entre les forces thermocapillaires et de flotabilité (nombres de Marangoni et de Rayleigh), ainsi que la nature du fluide (nombre de Prandtl).



**Figure VI.2.** Profil de la température adimensionnelle suivant un diamètre de l'interface solide-fluide pour deux valeurs de Ma ( $Bi = 180$  ;  $Ra = 100$  ;  $Pr = 9000$ ).

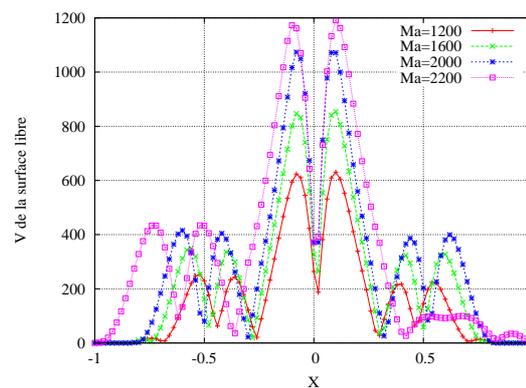
La distribution de la température sur l'interface solide-fluide dépend du rapport des conductivités thermiques des deux milieux et aussi des conditions d'écoulement. La Fig. VI.2 donne un exemple d'une telle distribution pour un rapport des conductivités  $\lambda_s/\lambda_f = 100$  et pour deux valeurs du nombre de Marangoni. Un profil de cette forme induit une cellule de convection centrale, et selon l'intensité des forces thermocapillaires, des cellules périphériques se forment ou pas autour d'elle. Comme le montre la Fig. VI.3, l'étendue de la zone couverte par les cellules convectives s'élargit avec l'augmentation du nombre de Marangoni. Entre  $Ma = 2000$  et  $Ma = 2200$ , la configuration d'écoulement à 6 cellules périphériques se déstabilise et une 7ème cellule

convective apparaît. En effet, l'augmentation de l'énergie cinétique du fluide avec l'augmentation du  $Ma$  a provoqué l'augmentation du nombre des cellules convectives et leur réorganisation. La Fig. VI.4 donne la comparaison quantitative du module de la vitesse  $V$  au niveau de la surface libre pour ces différentes valeurs de  $Ma$ . On observe pratiquement le doublement de la valeur de la vitesse avec le doublement de la valeur de  $Ma$ . Aussi, la valeur de la vitesse au centre de la surface est trois fois plus importante que sa valeur au niveau des cellules périphériques.

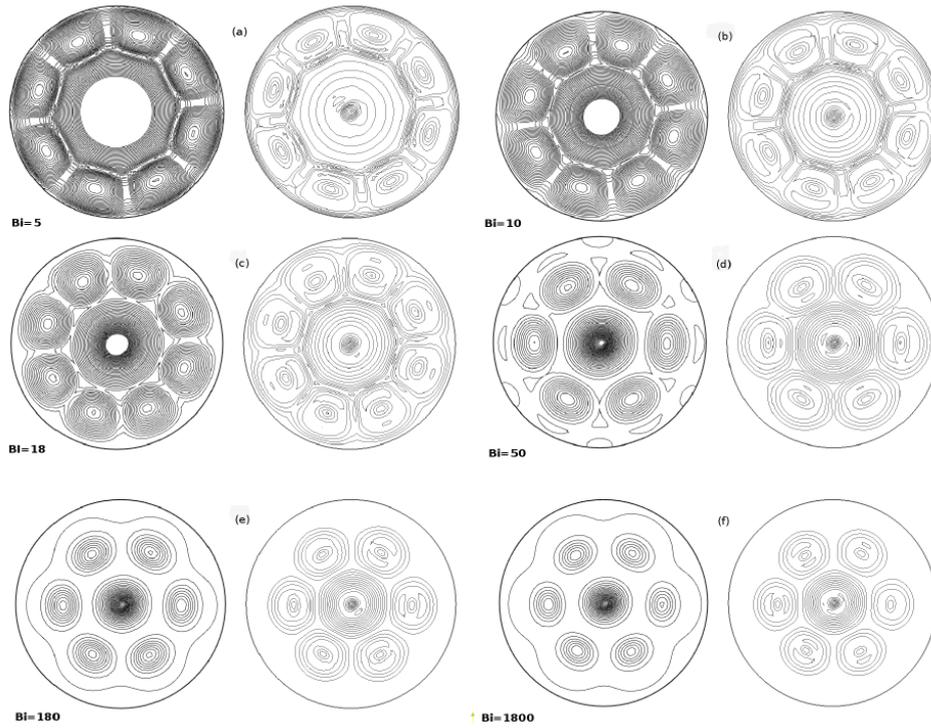


**Figure VI.3.:** Isothermes (gauche) et isovalues de la vitesse (droite) sur la surface libre pour différents nombres de Marangoni (a)  $Ma = 1200$ , (b)  $Ma = 1600$ , (c)  $Ma = 2000$ , (d)  $Ma = 2200$ . ( $Pr = 9000$  ;  $Bi = 180$  et  $Ra = 1000$ ).

L'impact du refroidissement par convection à la surface libre est analysé sur la Fig. VI.5 pour différentes valeur de  $Bi$ . Pour les faibles valeurs de  $Bi$ , le niveau moyen de la température est plus élevé et la taille de la cellule centrale est très étendue, avec 8 cellules périphériques. Pour  $Bi \geq 50$ , la taille de la cellule centrale se réduit ainsi que celle des cellules périphériques, dont le nombre a chuté à 6. La Fig. VI.6 donne la distribution de la vitesse sur un axe de la surface libre en fonction de  $Bi$ . Pour des  $Bi$  faibles, les zones concernées par des vitesses élevées sont plus étendues et se resserrent vers le centre avec l'augmentation du refroidissement surfacique (augmentation de  $Bi$ ). On remarque aussi, à partir de  $Bi = 180$ , l'apparition d'une zone périphérique où la vitesse surfacique est quasi-nulle.



**Figure VI.4.:** Module de vitesse adimensionnelle sur l'axe  $\bar{x}$  à la surface libre pour différents nombres de Marangoni.



**Figure VI.5.** Isothermes (gauche) et isovaleurs de la vitesse (droite) sur la surface libre pour différentes valeurs de Bi (a) Bi = 5, (b) Bi = 10, (c) Bi = 18, (d) Bi = 50, (e) Bi = 180 et (f) Bi = 1800. (Pr = 9000 ; Ma = 1800 et Ra = 1000.)

Le rôle de la flottabilité est examiné sur la Fig. VI.7 qui donne la valeur de l'énergie cinétique calculée par :

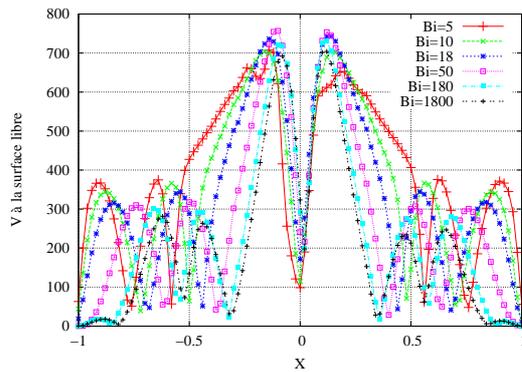
$$E_C = \frac{1}{2\nu} \int_V V^2 dv \quad (\text{VI.1})$$

avec  $\nu$  le volume du fluide, en fonction du nombre de Rayleigh. On remarque une très faible évolution des vitesses en-dessous de Ra = 1000. Au-delà, cette énergie augmente rapidement. Effectivement, l'examen de la Fig. VI.8 montre que lorsque Ra passe de 10 à 1000, aucun changement n'est observé sur la forme de l'écoulement composé de 8 cellules périphériques. A Ra = 3000, ces cellules se resserrent vers le centre et une nouvelle rangée de 8 cellules se forme à la périphérie. En dessous de Ra = 1000, ce sont les effets thermocapillaires qui sont responsables de cette structure de l'écoulement. En effet, pour le cas limite de Ma = 0 (non représenté ici) et lorsque la convection naturelle est faible (Ra=100), une seule cellule de convection est présente. Elle est axisymétrique et occupe tout le volume du fluide, avec des courants ascendants au centre du récipient et descendants à la périphérie (à comparer à la Fig. VI.8(b)). Cette symétrie est donc déstabilisée par la superposition des effets thermocapillaires.

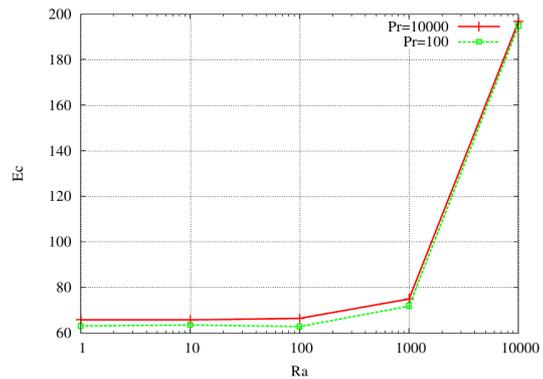
Comme on peut le voir sur la Fig. VI.7, le nombre de Prandtl du fluide n'a que très peu d'impact sur l'écoulement entre les valeurs Pr = 100 et Pr = 10000. Des modifications notables n'ont été observées que pour des Pr  $\leq$  10.

### Perspectives

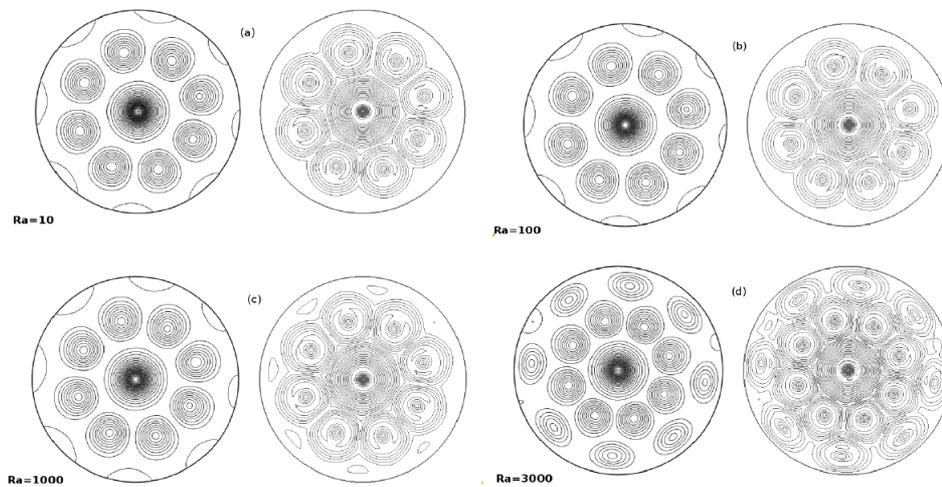
Ce travail nécessite d'être approfondi et le rôle de certains autres paramètres examinés, comme celui du rapport des conductivités du solide et du fluide ainsi que celui du rapport de forme du



**Figure VI.6.**: Module de vitesse adimensionnelle sur l'axe  $\bar{x}$  à la surface libre pour différents nombres de Biot.



**Figure VI.7.**: Énergie cinétique du fluide pour différentes valeurs de Ra et Pr. ( $Ma = 2000$  et  $Bi = 100$ ).



**Figure VI.8.**: Isothermes (gauche) et isovaleurs de la vitesse (droite) sur la surface libre pour différentes valeurs de Ra. ( $Ma = 2000$ ,  $Bi = 100$  et  $Pr = 100$ ).

réceptif. Par la suite, les situations pour lesquelles l'écoulement devient instationnaire seront étudiées. Lorsque ces différents aspects seront maîtrisés, une dernière situation pratique sera étudiée dans le cadre de cette thèse. Il s'agit de l'évaporation d'une couche mince de liquide posée sur un substrat solide. Cette préoccupation est née d'une collaboration que nous avons amorcée avec l'Equipe de Physique et Chimie des Polymères de l'IPREM<sup>1</sup>(L. Billon). Un flux thermique lié à l'énergie latente d'évaporation sera modélisé et la composition du fluide modifiée afin d'étudier les causes de la formation de certains motifs géométriques (réseau hexagonal de pores) ayant été observés expérimentalement par cette équipe, lors de la réalisation de films polymères très minces. La compréhension d'un tel phénomène et la maîtrise de la synthèse des films seraient d'un grand intérêt pour le développement de matériaux innovants.

1. Institut Pluridisciplinaire de Recherche sur l'Environnement et les Matériaux (UMR UPPA-CNRS 5254).

## VI.1.2. Effets thermocapillaires sur la convection mixte en canal ouvert

Il s'agit du travail de thèse de Lahcen Bammou dont les premiers résultats ont été communiqués dans [CN16, CN13] (voir liste I.4.3).

### Description

La convection mixte au sein des films liquides ruisselant sur des plaques planes est rencontrée dans de nombreuses applications industrielles telles que les dispositifs de refroidissement par évaporation, ou les échangeurs de chaleur compacts. La diversité des paramètres thermophysiques qui interviennent lors de ces écoulements explique une relative abondance d'études théoriques et expérimentales. Par exemple, une étude expérimentale a été effectuée par Wang et al. [93] pour déterminer les conditions hydrodynamique et thermique d'un écoulement dans un canal ouvert uniformément chauffé par le bas et étudier l'effet de flottabilité sur le développement de la couche limite thermique. D'autres travaux ont été réalisés sur des films liquides minces (2D) à surface libre ondulée, pour lesquels les auteurs ont tenu compte des effets thermocapillaires [94, 95]. La plupart des auteurs n'a pas étudié les instabilités thermoconvectives tridimensionnelles qui se produisent au sein du film liquide chauffé uniformément par le bas. En effet, lorsque les forces induites par les courants de convection naturelle et forcée sont du même ordre de grandeur (soit un nombre de Richardson  $Ri = Ra/(Pr.Re^2) = O(1)$ ), des instabilités se développent sous la forme de rouleaux convectifs longitudinaux semblables à ceux rencontrés pour des écoulements de Poiseuille-Rayleigh-Bénard [96, 97]. Lorsque la thermodépendance de la tension de surface est suffisamment importante, les effets thermocapillaires se superposent aux courants de convection naturelle. Le but de ce travail est d'analyser ces écoulements et de caractériser l'impact de l'effet Marangoni sur eux.

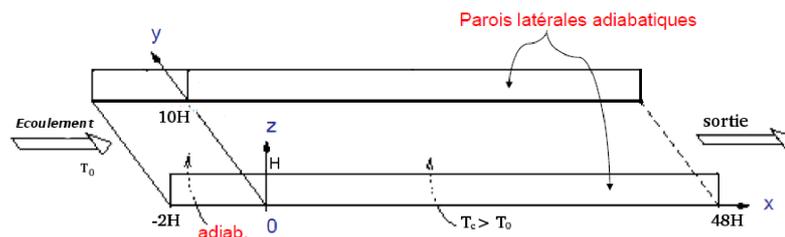


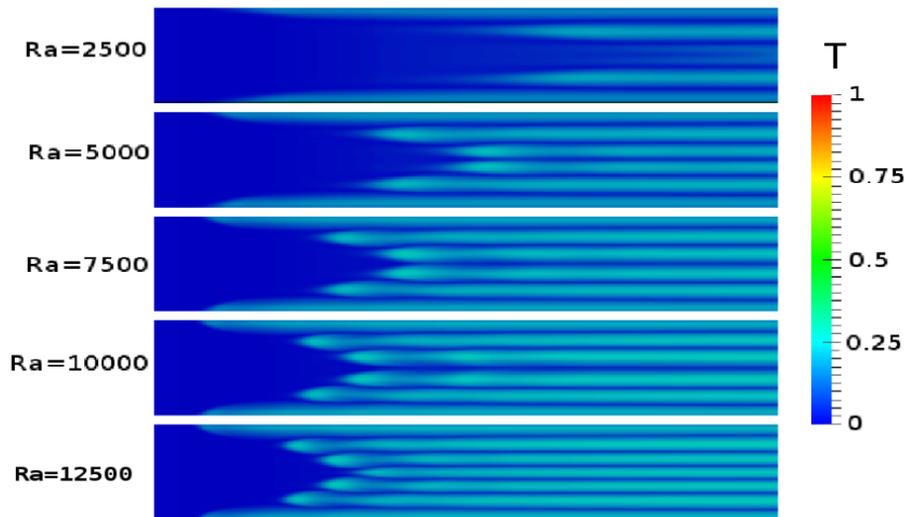
Figure VI.9.: Géométrie du canal ouvert et ses conditions aux limites pour un rapport de forme 10.

Nous considérons l'écoulement d'un liquide ( $Pr = 7$ ) dans un canal rectangulaire horizontal de hauteur  $H$ , de largeur  $\Gamma \times H$  ( $\Gamma$  est le rapport de forme), de longueur  $50 H$ , et dont la surface supérieure est libre (Fig. VI.9). Les parois latérales du canal sont adiabatiques, la paroi horizontale du bas est adiabatique sur une longueur  $2 H$  mesurée à partir de la section d'entrée du canal. Au delà, cette paroi est maintenue à une température uniforme  $T_c$  supérieure à la température d'entrée de l'eau  $T_0$  ( $T_c > T_0$ ). A l'entrée du canal, un profil de vitesse correspondant à la moitié inférieure d'un profil de Poiseuille 3D est imposé. Cette géométrie est similaire à celle du cas test de l'écoulement de Poiseuille-Rayleigh-Bénard proposé par Médale et al. [98, 99] (sans la paroi supérieure) et qui a servi de test de validation pour le code de calcul dans la section A.1.6.

Les équations gouvernant cet écoulement laminaire sont résolues à l'aide du code Tamaris (chapitre II). Le maillage adopté après une étude de dépendance des résultats à la taille du maillage est de  $1,12 \times 10^6$  cellules. Toutes les situations étudiées correspondent à des écoulements stationnaires.

### Quelques résultats

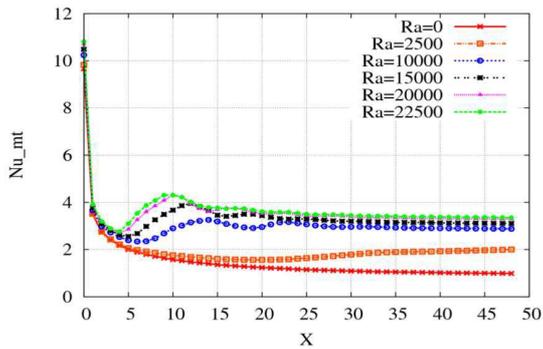
La Fig. VI.10 montre la distribution de la température sur la surface libre du canal pour différentes valeurs de  $Ra$  correspondant à des valeurs du nombre de Richardson ( $Ri$ ) allant de 1,6 à 8. Sur cette figure, on aperçoit bien la formation de rouleaux longitudinaux dans le canal. Lorsque la force de la convection naturelle augmente ( $Ra$  augmente), la position de naissance de ces rouleaux se déplace vers l'amont. Ceci est particulièrement vrai pour les rouleaux centraux, alors que les rouleaux proches des parois latérales se forment pratiquement à la même abscisse  $x$ . Cela est dû au fait que la vitesse axiale de la convection forcée est plus faible près des parois latérales. A partir de  $Ra=12500$ , le nombre de rouleaux augmente et passe de 10 à 12 rouleaux.



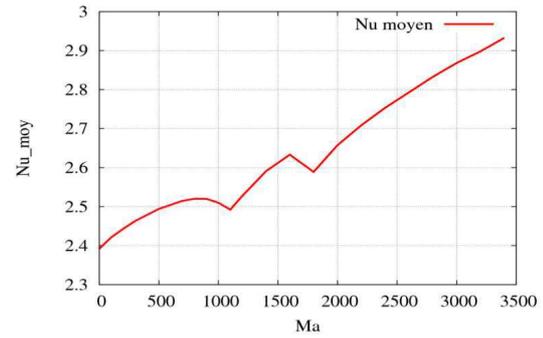
**Figure VI.10.** Champ de la température sur la surface libre du canal pour plusieurs valeurs de  $Ra$  ( $Re=15$ ;  $Bi=15$ ;  $Ma=500$ ;  $\Gamma = 10$ ).

Les échanges thermiques à la paroi du fond du canal sont affectés par la structure de l'écoulement. La Fig. VI.11 donne le nombre de Nusselt moyen par ligne transversale  $Nu_{mt}$ . Dès  $Ra = 2500$ , l'apparition des rouleaux améliore le transfert de chaleur par rapport au cas de convection forcée ( $Ra = 0$ ). La zone concernée par cette amélioration se déplace vers l'amont avec l'augmentation du  $Ra$ . L'échange thermique est le plus fort dans la zone de naissance des rouleaux puis baisse légèrement et se stabilise vers l'aval. L'apparition de deux rouleaux supplémentaires au centre du canal ( $Ra=12500$ ) augmente notablement le transfert.

L'impact de la thermocapillarité sur l'échange thermique global, entre la paroi chauffée et le fluide, est analysé sur la Fig. VI.12. Cette figure donne la valeur du nombre de Nusselt moyen  $Nu_m$  sur la surface du fond, en fonction du nombre de Marangoni. La tendance générale est à l'augmentation du  $Nu_m$  avec l'augmentation du  $Ma$ , car la vitesse transversale (non montrée ici) augmente. On remarque néanmoins, au voisinage des valeurs de  $Ma = 1100$  et  $1700$ , une baisse du Nusselt. Cette inversion de tendance s'explique par une restructuration de l'écoulement, comme le montre la Fig. VI.13. Cette figure donne le champ des vitesses sur une coupe transversale à la position  $x = 30H$ . Pour  $Ma = 0$ , on observe des rouleaux bien réguliers, qui se resserrent vers le centre et s'élargissent sur les bords du canal avec l'augmentation du  $Ma$ . Entre  $Ma = 1100$  et  $1200$ , les quatre rouleaux centraux fusionnent et n'en forment plus que deux. Le même scénario se répète entre  $Ma = 1600$  et  $1800$ . On observe également l'apparition de nouveaux rouleaux latéraux qui s'élargissent avec l'augmentation du  $Ma$ . On peut donc expliquer les baisses de



**Figure VI.11.:** Variation du nombre de Nusselt moyen par ligne transversale le long de la surface du fond du canal pour plusieurs valeurs de  $Ra$  ( $Re=15$ ;  $Bi=15$ ;  $Ma=500$ ;  $\Gamma = 10$ ).

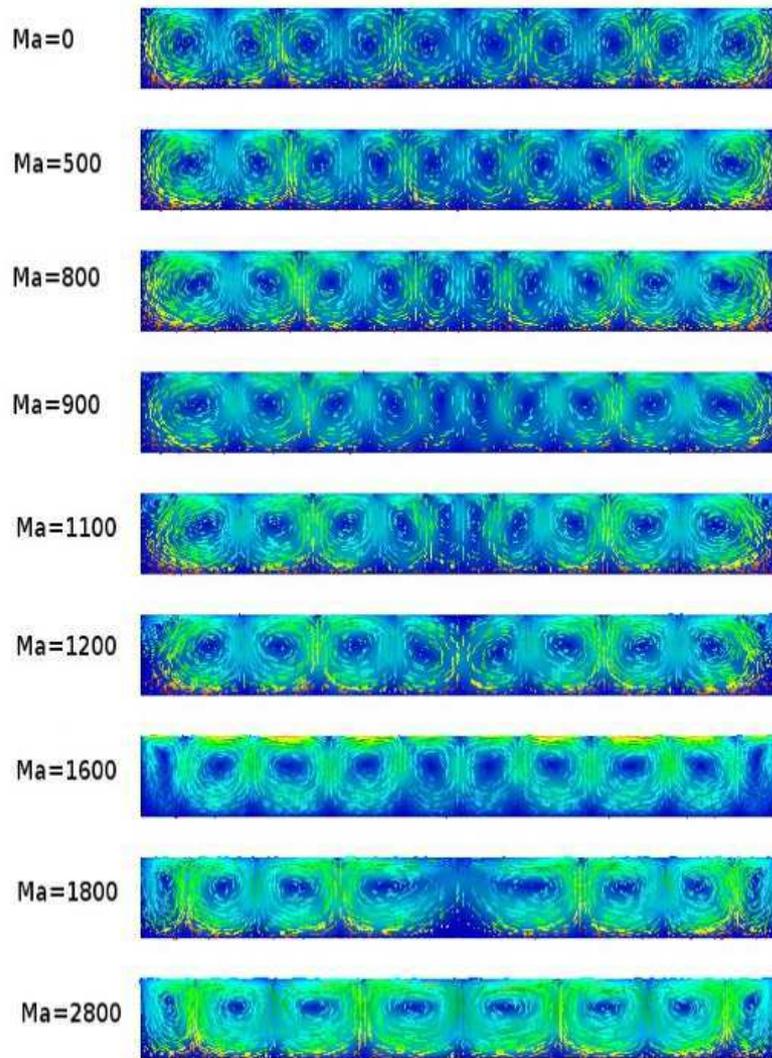


**Figure VI.12.:** Nusselt moyen sur la paroi chauffée en fonction du  $Ma$  ( $Ra=5000$ ;  $Re=15$ ;  $Bi=15$ ;  $\Gamma = 10$ ).

l'échange thermique observées sur la courbe de la Fig. VI.12 par des situations d'écoulement où les rouleaux centraux deviennent trop petits, avec un niveau de frottement important, baissant leur vitesse et affaiblissant l'échange thermique.

### Perspectives

Plusieurs autres aspects ont été étudiés ou sont à l'étude. Cette étude pourra par la suite être étendue vers les faibles nombres de Richardson, pour lesquels des rouleaux transversaux apparaissent et l'écoulement devient instationnaire. Cela engendra néanmoins des simulations beaucoup plus gourmandes en ressources de calculs. Comme indiqué dans la section II.6, les futurs développements du code Tamaris, s'orienteront vers la modélisation des écoulements diphasiques fluide-fluide. À l'aide des modèles développés, il serait intéressant de modéliser l'écoulement d'un gaz (ex. l'air), au dessus de le l'écoulement du liquide, et d'analyser l'impact de l'interaction entre les deux écoulements sur la forme de la surface libre. Le phénomène d'évaporation pourra être abordé en tenant compte du transfert massique entre les deux phases et de l'apparition de zones d'assèchement. Bien entendu, ces extensions ne se feront pas uniquement dans le cadre de la seule thèse de L. Bammou, mais certainement dans nos futures collaborations avec les universités d'Agadir et de Marrakech.



**Figure VI.13.:** Champ des vitesses sur une coupe transversale à l'abscisse  $x=30$  pour différents  $Ma$  ( $Ra=5000$  ;  $Re=15$  ;  $Bi=15$  ;  $\Gamma = 10$ ).

## VI.2. Suivi thermique d'un front de polymérisation pour un procédé gel

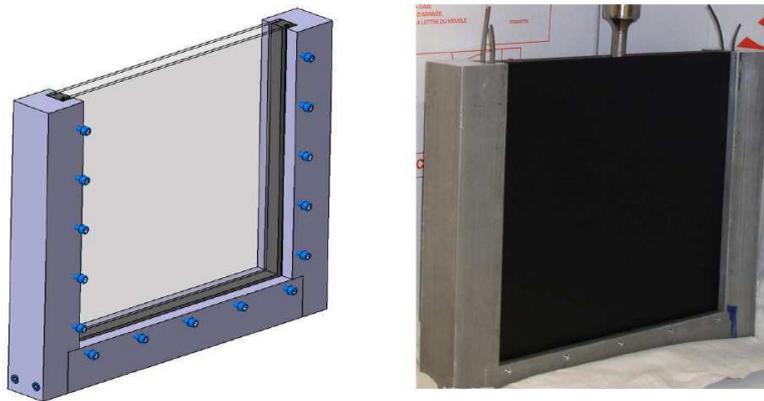
Cette étude a été menée dans le cadre d'une collaboration entre l'équipe TM du laboratoire SIAME et l'équipe EPCP de l'Institut IPREM. Les compétences de notre équipe en thermographie infrarouge et en modélisation des transferts thermiques ont été associées aux savoir-faire de l'équipe EPCP en physico-chimie des polymères et à leur synthèse.

Les résultats issus de cette collaboration ont été publiés dans [A14, CN9] (voir liste I.4.3).

### VI.2.1. Introduction

Le procédé de polymérisation étudié est utilisé pour synthétiser du polyacrylamide qui sert à formuler par la suite des fluides aqueux au comportement rhéologique choisi. Ces fluides sont principalement utilisés pour la récupération tertiaire du pétrole, en tant que fluides de forage ou de fracturation, ou encore pour réduire les pertes de charge lors d'écoulements. Ce procédé gel, par rapport à d'autres procédés de synthèse, permet d'éliminer l'étape de chauffe nécessaire à l'élaboration du polymère, en utilisant un amorçage localisé de la polymérisation par les ultrasons, puis la propagation de celle-ci tout le long du réacteur sous l'effet de sa propre exothermicité [100]. Ce procédé réduit l'énergie à mettre en œuvre et diminue ainsi l'impact environnemental.

### VI.2.2. Matériel et procédure expérimentale

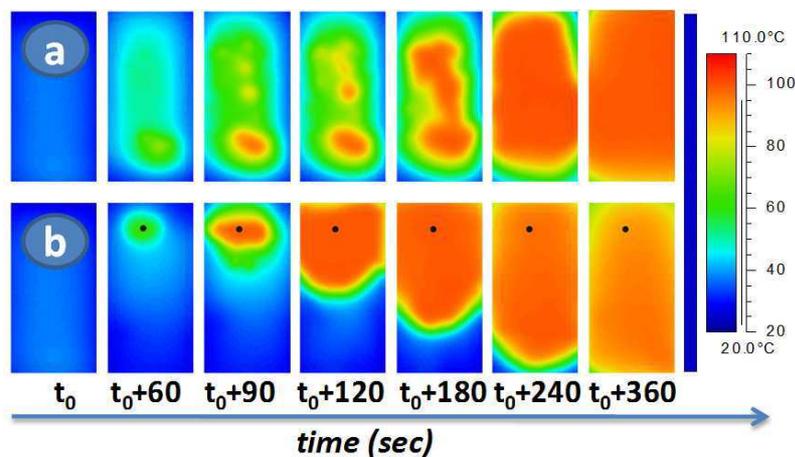


**Figure VI.14.** : Schéma et photographie du réacteur de polymérisation. La position de la sonde ultrasonore est visible sur la photographie en partie supérieure du réacteur.

Le réacteur de synthèse qui a été construit est de type plan de forme parallélépipédique et de volume variable. Ses dimensions internes sont :  $300 \times 100 \times 15 \text{ mm}^3$  (0,45 litre) ou  $300 \times 300 \times 15 \text{ mm}^3$  (1,35 litre). Il est représenté sur le schéma de la Fig. VI.14. Les faces externes de ce réacteur (deux plaques en acier inoxydable d'épaisseur 2 mm) ont été peintes en noir mat de manière à se rapprocher de l'émissivité d'un corps noir (estimée à 0,92). Ce réacteur permet de suivre l'évolution des températures sur l'une de ses faces à l'aide d'une caméra infra-rouge (IR). Le réacteur est placé verticalement sur la tranche, la surface horizontale du liquide réactif est à l'air libre et la sonde ultrasonore est plongée dans le liquide à 50 mm de ce niveau. Les synthèses

sont réalisées pour des solutions aqueuses préparées à partir d'un mélange d'acrylamide (35 % en masse) et d'un amorceur hydrosoluble (le Vazo 56). De l'eau déionisée et filtrée est utilisée. Le polyacrylamide (PAM) est obtenu par une méthode de polymérisation radicalaire classique. La sonde ultrasonore est une Vibra Cell 72408, dont la puissance a été fixée à 40 W seulement. L'énergie d'activation de la réaction est obtenue par un amorçage chimique assisté par ultrasons en un point de la solution concentrée de monomère. En se déplaçant, le front de propagation de la réaction conduit à la formation d'un gel physique de polymère.

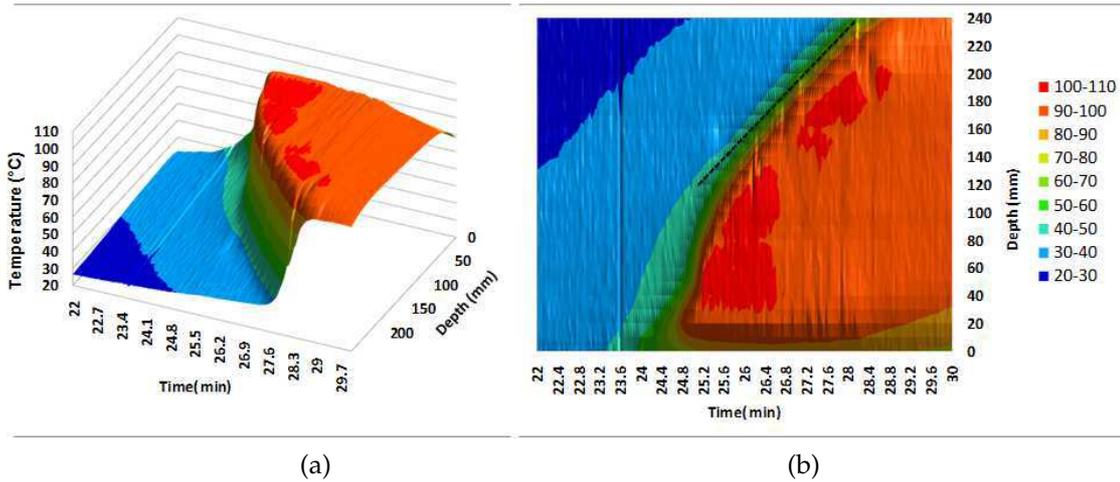
### VI.2.3. Résultats expérimentaux



**Figure VI.15.** : Images infrarouges successives de la surface du réacteur ( $300 \times 150 \times 15 \text{ mm}^3$ ) lors d'une polymérisation : (a) sans amorçage ultrasonore (b) avec amorçage ultrasonore.

Sur la Fig. VI.15, sont données deux séries d'images prises par thermographie infrarouge, lors de polymérisation assistée et non assistée par l'amorçage ultrasonore. Sans amorçage, la réaction démarre à de multiples endroits, comme le montrent les nombreux points chauds qui apparaissent en surface, et sa propagation n'est pas homogène. Lorsque la réaction est amorcée par ultrasons, on observe que le point de départ de la polymérisation coïncide bien avec la position de la sonde, et que la réaction se propage de manière frontale. C'est du moins ce que suggère l'empreinte thermique perçue de l'autre côté de la plaque d'acier. Il faudrait néanmoins vérifier que l'image thermique externe correspond bien à la position du front exothermique de polymérisation. Cette vérification a été accomplie par modélisation (cf. section VI.2.4).

À partir des images thermiques enregistrées au cours du temps, il est possible de construire des cartographies 3D (Fig. VI.16(a)) ou spatio-temporelles (Fig. VI.16(b)) représentant les évolutions temporelles des températures le long d'une ligne verticale centrale passant par la sonde. On observe que la température croît d'abord assez lentement, de  $20^\circ\text{C}$  à  $40^\circ\text{C}$ , puis beaucoup plus rapidement, pour atteindre les  $100^\circ\text{C}$  (en 2 min environ). L'évolution du front étant bien marquée, sa vitesse de propagation peut être déduite aisément de la représentation spatio-temporelle. Dans la partie basse du réacteur (120-240 mm de profondeur, loin des perturbations liées à la surface libre et à la sonde), la phase de propagation du front est linéaire et correspond à une vitesse de  $45 \text{ mm/mn}$ .

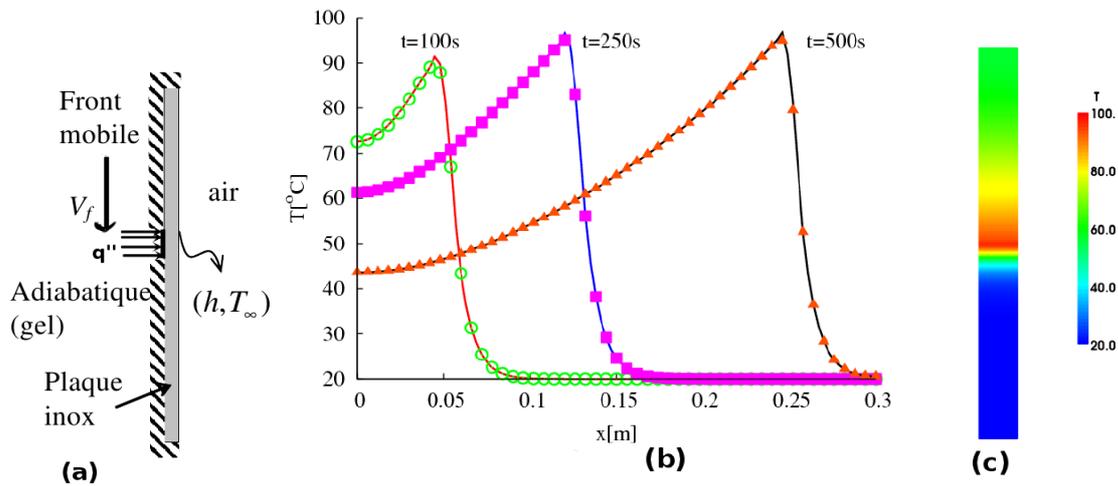


**Figure VI.16.:** (a) Visualisation 3D des températures et (b) image spatio-temporelle construite à partir de l'évolution de la température dans le temps sur une ligne verticale portée par l'axe de la sonde ultrasonore, au centre du réacteur plat de forme rectangulaire  $300 \times 150 \times 15 \text{ mm}^3$ , lors de la polymérisation de l'acrylamide (35 % en masse).

#### VI.2.4. Modèle thermique numérique

La localisation du front de polymérisation via les images IR présentées précédemment dépend de la transmission de la chaleur par conduction à travers la plaque d'acier du réacteur, mais aussi des échanges internes (au sein du polymère) et externes (avec l'air ambiant). Un modèle de transfert thermique 2D instationnaire à travers la plaque du réacteur a été formulé. L'objectif n'est pas de reproduire le phénomène de polymérisation, mais de vérifier que ce front assimilé à une source de chaleur mobile d'un côté de la plaque d'acier a une image IR enregistrée de l'autre côté de celle-ci, reflétant sa position réelle, et qu'elle n'est pas en avance, en raison de la conductivité, ou en retard, à cause de l'inertie thermique. Pour ce faire, l'équation de l'énergie est résolue par une méthode des volumes finis, en utilisant des schémas de discrétisation spatiale centré d'ordre deux en précision et implicite du second ordre en temps. Le domaine spatial 2D considéré sera donc un rectangle de 300 mm par 2 mm (Fig. VI.17(a)), le maillage est de  $300 \times 40$  et le pas de temps de calcul fixé à 0,25 s. Initialement la plaque est à  $20 \text{ }^\circ\text{C}$ , sa face externe à l'air libre est soumise à de la convection et à du rayonnement (un coefficient  $h$  global a été estimé à  $20 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ ). Sur la face interne, côté polymère, les conditions imposées sont un front mobile de largeur 10 mm qui dissipe un flux de chaleur constant dans le temps et des conditions adiabatiques de part et d'autre du front. La valeur de la densité de flux est estimée en prenant en compte le dégagement de chaleur correspondant à une masse de produits réactifs contenue dans un volume de dimensions  $10 \text{ mm} \times 7,5 \text{ mm} \times 1 \text{ m}$ , rapporté à une surface de  $10 \text{ mm} \times 1 \text{ m}$  pendant la durée de la réaction. Pour étudier les effets induits par la vitesse de propagation du front sur les températures, deux vitesses ont été considérées : 300 mm parcourus en 10 min ou en 1 min, ce qui donne respectivement,  $q'' = 3 \times 10^4$  et  $3 \times 10^5 \text{ Wm}^{-2}$ . Ces deux temps ont été choisis à partir des vitesses expérimentales observées et qui se situent toutes entre ces deux valeurs (cf. Fig. VI.16).

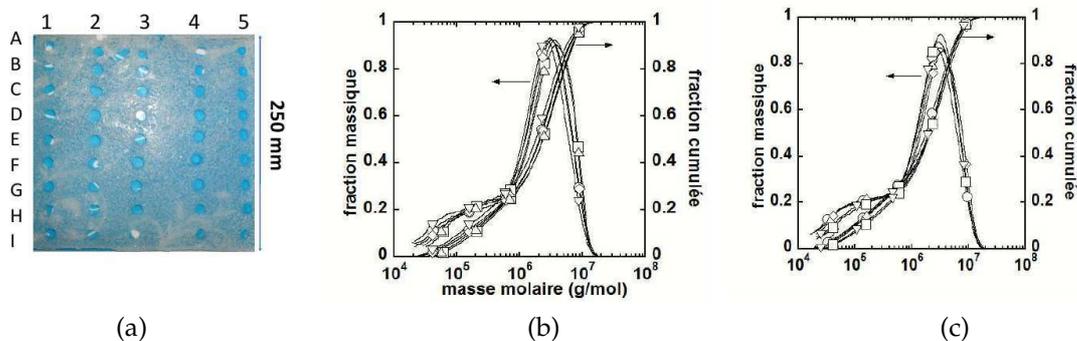
Sur la Fig. VI.17(b), ont été tracés les profils de température le long des faces interne et externe de la plaque, pour différents instants, pour un déplacement du front de polymérisation pendant 10 min. Les courbes présentent un pic de température qui correspond à la position du front avec une queue aval vers les hautes températures et une queue amont vers les basses températures, qui chute rapidement vers la température initiale. Que ce soit en aval ou en amont du front, les



**Figure VI.17.** : Résultats numériques : (a) Schéma du modèle thermique 2D avec conditions aux limites. (b) Profils des températures aux deux surfaces de la plaque d'acier du réacteur pour différents temps. Lignes continues : surface interne. Symboles : surface externe. (c) Distribution de la température sur la surface externe à  $t = 30$  s. Ici la vitesse de propagation du front choisie est fixée à 30 mm/mn.

températures des faces internes et externes sont parfaitement superposées, ce qui indique que les informations thermiques des deux côtés de la plaque sont identiques. Le même constat est fait pour une vitesse de propagation plus grande (300 mm en 1 min). A partir de ces résultats, nous pouvons estimer que les températures données sur les cartographies IR par la caméra thermique à la surface externe de la plaque du réacteur sont représentatives des évolutions de températures au sein de celui-ci.

### VI.2.5. Analyse chromatographique du gel formé



**Figure VI.18.** : (a) Gel de PAM formé, avec références et positions des prélèvements. Superposition des distributions en masse molaire selon (b) un axe vertical 3A-3I ( $\circ$  : 3A ;  $\diamond$  : 3C ;  $\square$  : 3E ;  $\triangle$  : 3F ;  $\nabla$  : 3I) et (c) un axe horizontal 1E-5E ( $\circ$  : 1E ;  $\diamond$  : 2E ;  $\square$  : 3E ;  $\triangle$  : 4E ;  $\nabla$  : 5E).

Un exemple de gel de PAM obtenu après polymérisation frontale dans le réacteur est donné sur la Fig.VI.18(a) (réacteur de géométrie  $300 \times 300 \times 15 \text{ mm}^3$ ). Le gel formé est compact et collant. Des prélèvements sont réalisés à l'emporte-pièce aux positions référencées sur la figure. Les échantillons de PAM sont ensuite dissous dans l'eau, dilués dans le solvant de chromatographie, filtrés à  $0,45 \mu\text{m}$  et analysés en chromatographie d'exclusion stérique (CES) couplée à de la diffusion de la lumière [101]. Les résultats des distributions des masses molaires ainsi obtenues pour

les échantillons répartis sur les axes horizontal et vertical sont illustrés sur les Figs.VI.18(b) et (c). Les masses molaires obtenues sont de l'ordre de quelques millions de grammes par mole et les distributions se superposent relativement bien, ce qui traduit une homogénéité des échantillons. La synthèse au sein du réacteur s'est faite donc de façon isotrope et présente des caractéristiques adaptées aux applications envisagées.

### VI.2.6. Conclusion

Une nouvelle méthode de polymérisation a été présentée. Elle permet l'obtention d'un gel uniforme sans apport important d'énergie thermique pour la réaction. Ce travail a montré qu'il est possible d'effectuer un suivi thermique de son front de propagation à l'aide d'une caméra IR. Cette méthode constitue une aide précieuse pour l'optimisation de la géométrie des réacteurs de synthèse.

## VI.3. Aérodynamique, turbulence et aéro-élasticité

Entre 2002 et 2004, j'ai effectué des travaux de recherche post-doctorale (18 mois), au sein de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA), dans le cadre d'un large projet financé par la région Aquitaine et le fond européen FEDER, pour le développement de dirigeables gros porteurs de très grandes dimensions (300 m de long), destinés au transport de très lourdes charges (200-300 Tonnes). Ce projet de recherche a été piloté par l'UPPA, avec la participation de plusieurs autres Universités. Au sein de l'UPPA, les laboratoires des mathématiques appliquées (LMA) et de thermique, énergétique et procédés (LaTEP) ont collaboré étroitement autour de ce projet.

Mon activité de recherche a porté sur l'étude numérique des écoulements turbulents à bas nombre de Mach, autour d'un dirigeable en vol, afin d'en déterminer les caractéristiques aérodynamiques : la répartition des efforts sur la coque, les différents coefficients aérodynamiques, l'identification des formes de l'écoulement (vortex, décollement de couche limite) et des modes de déformations de la coque. Dans le cadre de ce contrat, j'ai été en charge de la mise en place d'une plateforme complète de calcul numérique en mécanique des fluides, depuis la réalisation des maillages jusqu'à l'exploitation et la synthèse des résultats. Mon travail comportait également une collaboration étroite avec l'Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique (INRIA) de Sophia-Antipolis. En effet, le code de calcul qui a été utilisé est le code de recherche AERO3D développé dans cet institut, principalement par A. Dervieux, Directeur de Recherche à l'INRIA et B. Koobus, Professeur au département de mathématiques de l'Université de Montpellier, avec lesquels j'ai travaillé, notamment lors d'un séjour de deux semaines à INRIA Sophia-Antipolis.

Deux volets de recherche ont été abordés au cours de ce postdoc. Le premier concerne les écoulements turbulents et leur modélisation et le second concerne le couplage entre l'écoulement d'air et la déformation de coque du dirigeable. Les résultats de ces travaux ont été publiés dans : [C5, C4, C3, C2, CN5, CN4, R1, R2] (voir liste I.4.3).

### VI.3.1. Écoulement turbulent autour d'un dirigeable générique avec un grand angle d'incidence

#### Présentation

Un écoulement à grand angle d'incidence (d'attaque) autour d'un dirigeable se produit lorsqu'un vent latéral est présent lors du déplacement du dirigeable. Cet écoulement est pleinement turbulent au vu de la taille de la coque, mais reste faiblement compressible. Afin de mener une première étude générique, la géométrie simplifiée de l'ellipsoïde à rapport de forme 6 :1 a été adoptée. Cette géométrie a été très étudiée expérimentalement, notamment par Chesnakas et Simpson [102]. À grand angle d'incidence, cette géométrie représente un défi pour le calcul numérique, car la zone de détachement de la couche limite de l'écoulement n'est pas imposée par un aspect géométrique et sa ligne de décollement sur la surface de l'ellipsoïde prend des formes complexes.

Nous souhaitons dans cette étude comparer le comportement de trois modèles de turbulence différents, dont deux sont des modèles aux grandes échelles (LES). Les modèles LES nécessitent des maillages très fins lorsque le nombre de Reynolds devient très grand. Afin de pouvoir réaliser une première étude comparative dans les délais impartis, un nombre de Reynolds modéré a été choisi ( $Re = 4 \times 10^4$ ), permettant le recours à un maillage de taille moyenne, composé de 162234 nœuds et 946663 tétraèdres (Fig. VI.19).

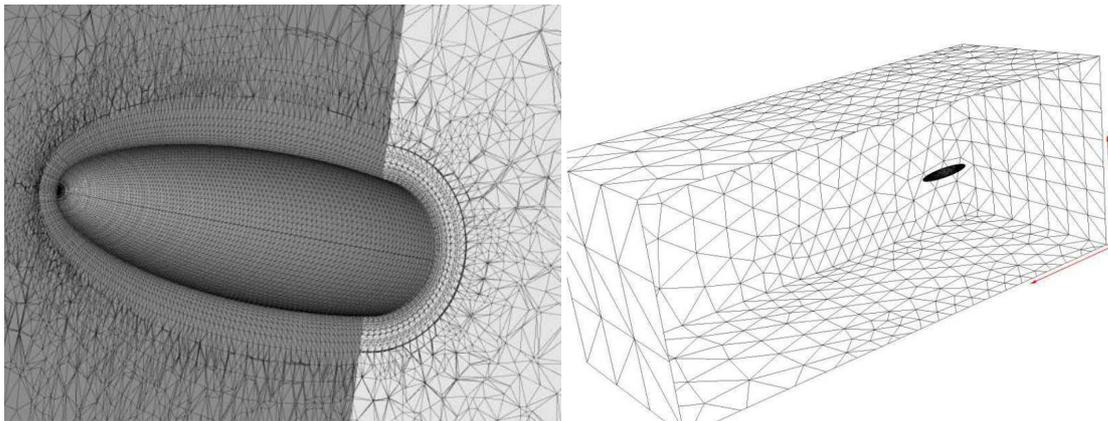


Figure VI.19.: Maillage de la surface de l'ellipsoïde et sur des coupes voisines (gauche). Vue globale du domaine de calcul (droite).

#### Méthode numérique

Le code AERO3D résout les équations de Navier-Stokes pour un fluide newtonien compressible par une formulation mixte volumes finis/éléments finis sur un maillage composé de tétraèdres [103]. Les termes diffusifs sont évalués par une méthode d'éléments finis P1-Galerkin. En revanche, les termes convectifs sont discrétisés dans l'espace par un schéma en volumes finis décentré amont, grâce à l'utilisation d'un schéma de Roe [104] et d'une méthode de reconstruction de type MUSCL [105, 106] dont deux variantes ont été comparées. La première notée (V4) introduisant une viscosité numérique dans le schéma formée par des dérivées d'ordre 4, et donnant au schéma une précision spatiale du second ordre. La seconde variante (V6) introduit une plus faible diffusion constituée de dérivées d'ordre 6 et assurant au schéma une précision du 3ème ordre au moins [107]. Pour les faibles nombres de Mach, le schéma de Roe est amélioré grâce au

préconditionneur de Turkel. AERO3D est un code parallèle, nécessitant une décomposition du maillage en plusieurs sous-domaines sans chevauchement. Je l'ai principalement utilisé sur la plateforme de calcul intensif du CINES de Montpellier.

Trois modèles de turbulence différents ont été comparés :

**RANS** : les modèles statistiques basés sur les équations de Navier-Stokes moyennées et l'approche de viscosité turbulente de Boussinesq sont conçus pour fournir un champ stationnaire moyen. Nous avons utilisé un modèle à deux équations  $k - \epsilon$  [103].

**LES** : les simulations aux grandes échelles (Large Eddy Simulation) reposent sur une filtration spatiale des équations de Navier-Stokes par rapport à une taille de filtre adéquate. Seules les structures à grande échelle de l'écoulement sont résolues directement. Des modèles de sous-maille sont introduits pour modéliser l'impact des petites échelles sur les grandes. Nous avons utilisé le modèle sous-maille de Smagorinsky [107].

**VMS-LES** : ou modèle LES variationnel multi-échelle (Variational MultiScale LES). Contrairement aux modèles LES classiques, il n'y a pas de filtration spatiale mais une projection variationnelle des équations de Navier-Stokes dans les espaces des grandes et des petites échelles. Ainsi la méthode VMS-LES opère une séparation *a priori* des échelles, et n'introduit un modèle de sous-maille que dans les équations aux petites échelles. Ceci réduit la quantité de viscosité numérique introduite par le modèle [108].

Pour ces trois modèles la loi de paroi non linéaire de Reichardt est utilisée pour le calcul de la contrainte visqueuse pariétale [103].

### Quelques résultats

Les conditions d'écoulement sont donc un nombre de Reynolds  $Re = 4 \times 10^4$ , un nombre de Mach  $Ma = 0,15$ , une densité et une pression à l'infini amont  $\rho_\infty = 1,1 \text{ kg m}^{-3}$  et  $p_\infty = 101300 \text{ Pa}$  et un angle d'incidence  $\alpha = 20^\circ$ .

La Fig. VI.20 donne un aperçu de la forme du champ moyen de l'écoulement obtenu par un calcul VMS-LES et avec la schéma MUSCL V6. On observe un resserrement des lignes de courant vers l'arrière de l'obstacle à cause du grand angle d'attaque. Les trois modèles de turbulence sont comparés sur la Fig. VI.21 qui montre le champ des vitesses sur un plan à l'arrière de l'ellipsoïde. Des différences notables sont visibles. Le modèle RANS montre moins de détails de l'écoulement, alors que seul le modèle VMS-LES semble capturer les tourbillons secondaires observés expérimentalement [102]. En effet, les autres modèles souffrent d'un excédent de dissipation numérique.

Les coefficients aérodynamiques ont été calculés et présentés sur le Tab. VI.1. On y remarque bien une différence nette entre les résultats du modèle RANS et ceux des modèles LES. Ces derniers donnent des coefficients  $C_x$  et  $C_y$  similaires. Le modèle RANS semble donc introduire une grande quantité de viscosité numérique qui s'ajoute à la viscosité physique. On remarque également que dans cette situation d'écoulement le choix du schéma numérique MUSCL V4 ou V6 ne semble pas influencer notablement les résultats.

## VI.3.2. Couplage aéro-élastique entre l'écoulement et une coque flexible

### Présentation

La nécessité pour un dirigeable d'être plus léger que l'air, implique l'utilisation d'une structure flexible dont les déformations peuvent être amplifiées par les forces aérodynamiques. Dans cette

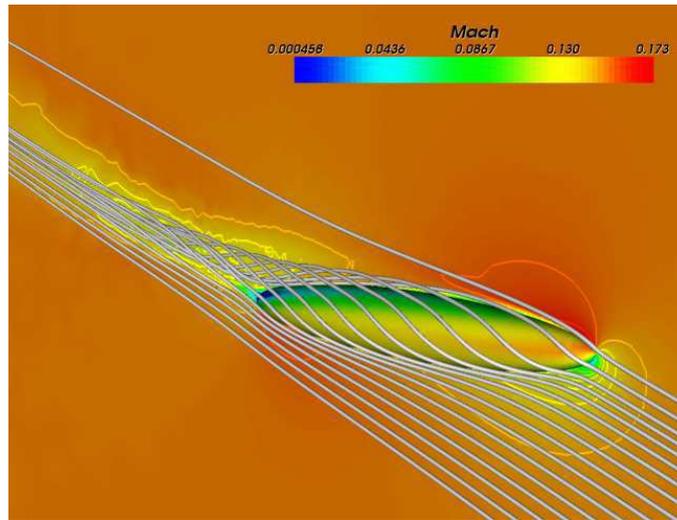


Figure VI.20.: Trajectoires et isovaleurs du nombre de Mach autour de l'ellipsoïde (modèle VMS-LES).

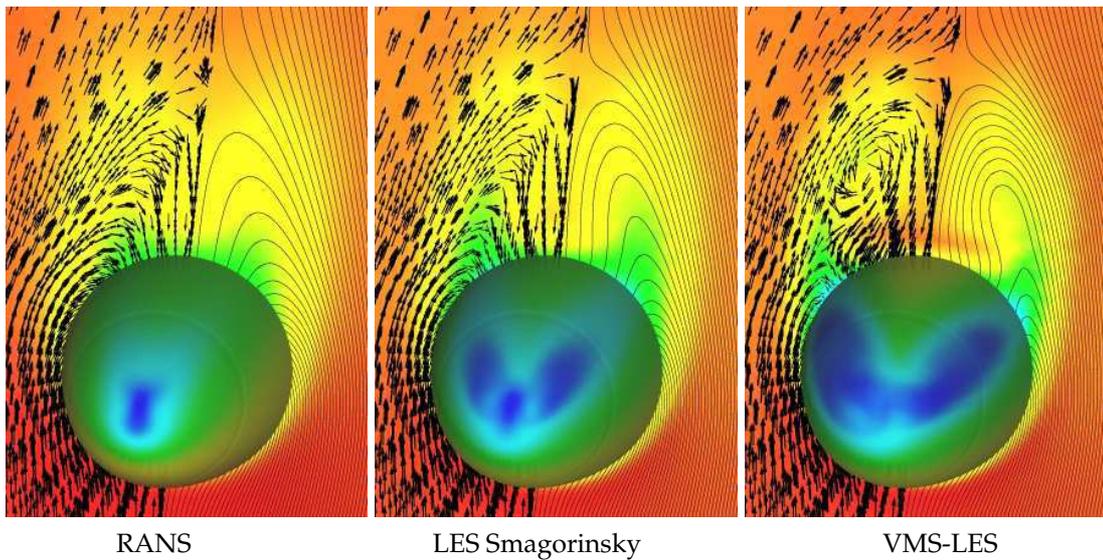
	$C_x$		$C_y$	
	V4	V6	V4	V6
RANS	0.1740	0.1745	0.0870	0.0861
LES	0.1295	0.1316	0.0578	0.0572
VMS-LES	0.1305	0.1313	0.0601	0.0581

Table VI.1.: Coefficients aérodynamiques obtenus par trois modèles de turbulence et deux schémas MUSCL.

optique une seconde étude s'est focalisée sur l'aéro-élasticité de la coque du dirigeable en vol, représentée par la géométrie générique de l'ellipsoïde 6 :1. Il s'agit d'appréhender les effets des contraintes et des vibrations subies par une coque plus ou moins souple au cours d'un vol avec ou sans angle d'incidence.

Dans AERO3D, les équations de Navier-Stokes sont exprimées sous une forme ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) à trois champs (fluide/structure/maillage), qui permet de tenir compte des déplacements et/ou déformations du maillage [103], afin de simuler des écoulements autour de structures solides qui se déforment sous l'effet des efforts aérodynamiques. En effet, le maillage fluide est représenté par un système pseudo-structural qui lui permet de garder sa cohérence lorsqu'il se déforme. Le schéma temporel est implicite, du second ordre et satisfait à la loi de conservation géométrique (GCL). La structure solide est, quant à elle, représentée par un modèle éléments finis utilisant les degrés de libertés physiques et implémenté dans le code AEROS développé à l'Université de Boulder au Colorado. Les deux codes sont couplés. Ainsi, le code AERO3D calcule l'écoulement et en déduit les forces subies par la structure. AEROS calcule les déformations de la structure correspondantes aux efforts subis. Il communique ensuite les déplacements de la coque au solveur pseudo-structural, qui répercute ces déformations sur l'ensemble des noeuds du maillage fluide. L'écoulement est calculé de nouveau sur ce maillage déformé. Cette procédure est ainsi réitérée [103].

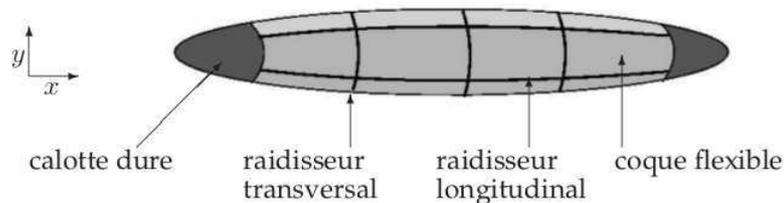
Pour s'approcher au mieux du cas du dirigeable, nous avons équipé la structure de l'ellipsoïde de calottes en matériau dur (non déformable dans nos conditions d'écoulement), et nous avons caractérisé le reste de la structure par un matériau plus souple, avec éventuellement des raidisseurs. Nous avons choisi des configurations de structure dont les premiers modes propres



**Figure VI.21.**: Lignes de courant et vecteurs vitesse projetés sur un plan perpendiculaire à l'ellipsoïde ( $x = 0,876 L$ ).

de déformation (flexion, torsion, flambement) sont cohérents physiquement avec ce qu'on peut attendre de la structure d'un dirigeable. Les trois configurations de structures étudiées sont (Fig. VI.22) :

- raid1** : la structure composée de deux extrémités (calottes) en matériau relativement dur, le reste de la structure (coque) est constitué d'un matériau relativement flexible ;
- raid2** : la coque est équipée de trois raidisseurs tubulaires en forme d'anneaux répartis sur la longueur de la structure ;
- raid3** : on rajoute enfin quatre autres raidisseurs longitudinaux qui relient les calottes et les différents anneaux et soutiennent ainsi l'ensemble de la structure.



**Figure VI.22.**: Structure de la coque et positions des raidisseurs (configuration **raid3**).

Les propriétés des matériaux utilisés sont données dans le Tab.VI.2. Les raidisseurs ont en plus les caractéristiques suivantes :

- section  $2,76 \times 10^{-4} \text{ m}^2$ ,
- trois moments d'inertie par rapport aux trois axes locaux :  $2,36 \times 10^{-7} \text{ m}^4$ ,  $1,18 \times 10^{-7} \text{ m}^4$  et  $1,18 \times 10^{-7} \text{ m}^4$ .

### Quelques résultats

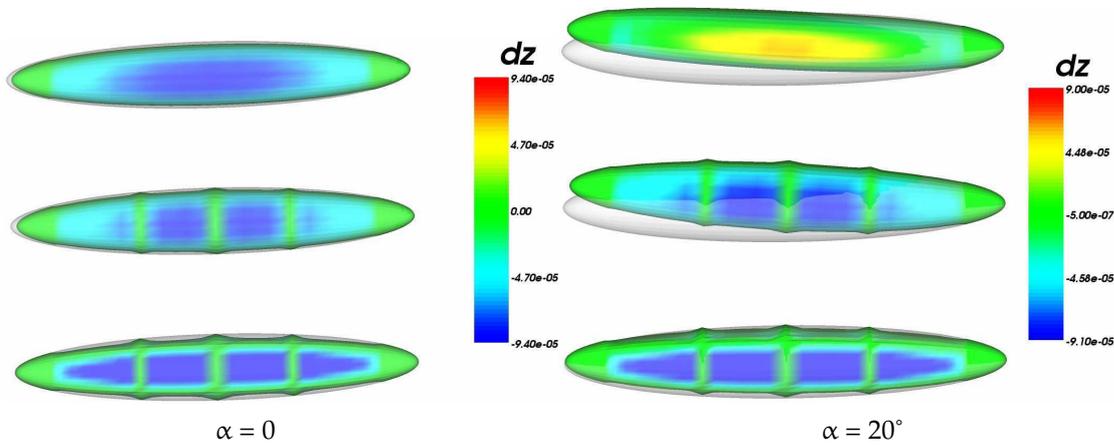
Pour simplifier les calculs, l'écoulement résolu est un écoulement non visqueux (équations d'Euler). Nous montrons, sur la Fig. VI.23, l'aspect déformé de la structure pour des angles d'incidence  $\alpha = 0^\circ$  et  $\alpha = 20^\circ$ . Pour une meilleure visibilité, les déformations ont été amplifiées 100 fois

	e [m]	E [Pa]	$\nu$	$\rho$ [kg m <sup>-3</sup> ]
Calottes	0,02	$1 \times 10^{12}$	0,3	3500
Coque souple	0,005	$1 \times 10^9$	0,3	3500
Raidisseurs	-	$7 \times 10^{10}$	0,3	8800

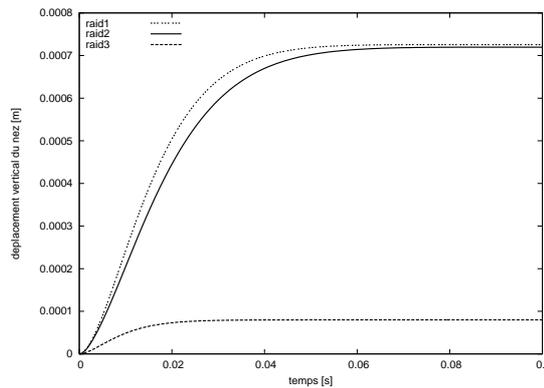
**Table VI.2.:** Caractéristiques des matériaux des différentes composantes de la structure, e : épaisseur, E : module de Young,  $\nu$  : coefficient de Poisson,  $\rho$  : masse volumique.

graphiquement sur les figures. La coloration de la surface représente les déplacements selon l'axe des z. Il y figure les trois configurations de raidisseurs citées plus haut : **raid1**, **raid2**, et **raid3**. La position initiale (non déformée) est représentée en gris transparent.

Pour les deux incidences  $\alpha = 0^\circ$  et  $\alpha = 20^\circ$ , les structures **raid1** et **raid2** donnent des compressions et des flexions similaires. Cependant, les raidisseurs annulaires empêchent l'aplatissement de la structure **raid2** pour  $\alpha = 20^\circ$ . Le maintien contre la flexion est principalement dû à la présence des raidisseurs longitudinaux, comme c'est le cas de la configuration **raid3**. Cette structure équipée des deux types de raidisseurs ne présente que de très faibles déformations dans le cas des deux incidences. Une autre façon d'examiner et de quantifier les déformations de la structure



**Figure VI.23.:** Déformation de la structure pour les configurations de raidisseurs 1, 2 et 3 de haut en bas et pour deux angles d'incidence. Les déformations sont amplifiées 100 fois. L'échelle de couleur indique la déformation transversale. La position initiale est présentée en gris clair.



**Figure VI.24.:** Évolution du déplacement vertical du nez de la coque au cours du temps ( $\alpha = 20^\circ$ ).

est de représenter les déplacements du nez de la structure au cours de l'évolution du calcul. La

Fig. VI.24 donne son déplacement vertical (selon  $y$ ) pour  $\alpha = 20^\circ$ .

Ces travaux ont été prolongés par l'étude d'un écoulement turbulent autour d'un ellipsoïde élastique pressurisé et sans raidisseurs. Par un calcul de couplage aéro-élastique, il a été montré, la capacité de la pressurisation à procurer de la rigidité à la structure.



---

---

# CHAPITRE VII

---

## *Projet de recherche*

### VII.1. Écoulements avec interfaces

Mes futures activités de recherche s'intégreront principalement dans le domaine de la modélisation des écoulements avec interface. C'est une situation qui peut être rencontrée lors d'écoulements diphasiques de deux fluides ou encore lors d'écoulements avec changement de phase. Une des méthodes de modélisation les plus innovantes est celle des interfaces diffuses. Parmi les méthodes d'interfaces diffuses, la méthode du champ de phase [109] permet une description élégante des interfaces (fronts de changement de phase ou interface entre deux fluides) par rapports aux méthodes classiques à interface mince. Elle utilise une variable de phase prenant deux valeurs distinctes dans les deux phases, liquide et solide, et qui varie rapidement dans la région interfaciale, mais de manière progressive (non abrupte). Ainsi aucune condition aux limites dynamique ou thermique n'est nécessaire pour cette approche, qui a aussi la capacité de gérer facilement la coalescence de deux interfaces qui se rejoignent. L'énergie libre totale dans un volume de fluide est exprimée en fonction de cette variable de phase et de ses gradients. Le taux avec lequel l'interface évolue dans le temps est décrit dans le contexte de la thermodynamique irréversible et dépend des gradients des variables thermodynamiques et de la manière avec laquelle l'énergie libre varie avec la variable de phase. Pour la mise en oeuvre de cette méthode, les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la concentration d'un soluté (pour un fluide binaire) seront résolues dans le code Tamaris (cf. chap. II). Les fluides considérés seront newtoniens ou non newtonien avec comme première approche une modélisation de leur rhéologie par une loi de puissance. À terme, le couplage entre rhéologie, composition et température sera pris en compte, aussi bien dans la phase fluide qu'à l'interface.

Dans cette thématique, je co-dirigerai une nouvelle thèse à la rentrée 2011. Le sujet de cette dernière est la modélisation des changements de phase liquide-solide lors de l'écoulement d'un fluide complexe (non newtonien, multiconstituants). L'approche scientifique envisagée utilisera la méthode des interfaces diffuses. En outre, dans le cadre de mon congé pour recherche (CRCT), en 2012, mon projet scientifique reposera également sur l'utilisation de cette méthode, pour la modélisation des écoulements diphasiques fluide-fluide. Ces deux projets de développement de modèles numériques (thèse + CRCT) renforceront mon activité de développement du code Tamaris. Ce dernier intégrera, à terme, les innovations issues de ces travaux. L'objectif plus global est de se doter, au sein du laboratoire SIAME, et en particulier dans l'équipe « Transports Multiphasiques », des compétences et outils nécessaires à l'étude des écoulements multiphasiques, no-

tamment ceux rencontrés dans le domaine pétrolier, domaine établi comme prioritaire à l'UPPA. En effet, l'UPPA est porteuse de l'Institut Carnot ISIFoR<sup>1</sup>. Nous comptons intégrer nos actions de recherche dans celles définies par cet Institut. Notre proposition de recherche s'inscrit aisément dans les thématiques prioritaires qui y sont définies. Elle portera, sur les problématiques liées à l'écoulement des fluides pétroliers dans des canalisations, dans des conditions thermodynamiques pour lesquelles des complications apparaissent, telles que la solidification sur les parois. C'est une situation qui s'inscrit dans le cadre plus général de ce qui est appelé « *Flow assurance* » dans le domaine pétrolier. Cette problématique est au cœur des préoccupations de la future thèse citée plus haut. Une collaboration avec le laboratoire LFC<sup>2</sup> de notre fédération de recherche IPRA<sup>3</sup> est prévue. Ce laboratoire dispose de compétences importantes dans le domaine de la thermodynamique des fluides pétroliers. Le soutien financier recueilli pourrait être utilisé, entre autres, pour le recrutement d'un chercheur post-doctorant afin de renforcer et d'accélérer les travaux dans la direction de cette application particulière. Il sera ainsi possible d'améliorer l'accompagnement et l'environnement de cette thèse, notamment par le rapprochement ou la collaboration avec une des entreprises du domaine, nombreuses dans le bassin aquitain, à travers le cadre privilégié du pôle de compétitivité aquitain Avénia, dont il faudra solliciter le label pour un futur dépôt de projet ANR.

## VII.2. Mélange chaotique

Pour la thématique du macro-mélange chaotique, les études que je mène actuellement vont s'étendre vers l'analyse des effets inertiels sur la qualité du mélange. Il est donc envisagé d'étudier le mélange produit par des écoulements à nombres de Reynolds ou de Péclet plus élevés que ceux habituellement utilisés pour le mélange chaotique. Le but est d'analyser les limites hautes (en vitesse et en dimensions) de l'utilisation de ce procédé pour le macro-mélange. Il serait aussi intéressant d'étudier le comportement de fluides à seuil (ex. fluide de Bingham) dans notre mélangeur (cuve et barreaux tournants). C'est en effet un comportement rhéologique souvent rencontré pour les fluides impliqués dans les procédés industriels. Il est également prévu d'approfondir l'analyse des effets pariétaux sur le mélange. Une collaboration a été amorcée sur ce sujet avec J.-L. Thiffeault de l'Université de Wisconsin aux États-Unis. La rotation de la paroi périphérique du mélangeur semble, en effet, délimiter deux zones distinctes au sein du fluide. Cette délimitation a un impact important sur le mélange et nous proposons d'étudier l'évolution de l'étendue de cette séparation en fonction des paramètres du mélange. Le passage aux études tridimensionnelles est également envisagé. Une étape supplémentaire serait la construction d'un pilote expérimental, idéalement dans le cadre d'une thèse CIFRE, en partenariat avec une entreprise du domaine du génie chimique, par exemple. Néanmoins, la prospection devrait également inclure les entreprises de l'agroalimentaire ou tout autre entreprise susceptible de mélanger des fluides très visqueux.

## VII.3. Emulsification laminaire et changement de phase

En ce qui concerne l'activité autour de l'émulsification laminaire, elle se poursuivra principalement dans son application à la conception de matériaux isolants thermiques actifs. L'objectif

---

1. « *Institute for the Sustainable Engineering of Fossil Resources* ».

2. Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs ; UMR TOTAL CNRS 5150.

3. Institut Pluridisciplinaire de Recherche Appliquée dans le domaine du Génie Pétrolier, fédération de recherche CNRS, FR 2952.

est d'obtenir un matériau composé d'une matrice biocomposite solide contenant dans ses porosités un matériau à changement de phase (MCP). Nous cherchons à développer une démarche complète, par rapport à des matériaux plus traditionnels, de production d'un matériau dont l'utilisation est destinée à la réalisation d'économie d'énergie. Sa fabrication mettra en jeu un procédé sobre (émulsification laminaire) et les matières premières proviendront, autant que possible, de la valorisation de sous-produits issus d'autres industries, aussi bien pour la matrice (ex. biopolymères) que pour le MCP (ex. acides gras). Cette orientation comporte des volets en expérimentation et en modélisation. Le volet expérimental sera dédié à l'étude des conditions de faisabilité de l'émulsification de ces différents matériaux et à la caractérisation thermique et mécanique des produits. Dans le volet modélisation, le comportement du matériau sera analysé lorsqu'il est soumis à des variations cycliques de température. Le modèle réalisé devra prendre en compte la distribution de taille de gouttes de MCP telle qu'elle a été obtenue par émulsification (cf. Fig. V.14). Des difficultés telles que celle liée au phénomène de surfusion doivent être résolues. L'étude sera étendue au cas de l'inclusion de deux MCP différents dans la même matrice, et ayant des températures de fusion différentes. Ceci permettra d'élargir la gamme d'utilisation en température du matériau.

Nous poursuivrons ces études à travers la collaboration avec le I3A-GITSE<sup>4</sup> de l'Université de Saragosse notamment. Ainsi, le soutien financier du fond commun Aquitaine-Aragon sera de nouveau sollicité afin de continuer la collaboration sur ce sujet avec nos collègues espagnols. En France, un projet ANR MatetPro<sup>5</sup> sera déposé en 2012. Outre le SIAME, ce projet inclura l'IPREM<sup>6</sup> de l'UPPA, le PHASE<sup>7</sup> de l'Université de Toulouse et l'ISM<sup>8</sup> de l'Université de Bordeaux. Des partenaires industriels du domaine des Télécommunications se joindront à ce projet. Ils sont intéressés par les applications de ce procédé liées à la protection thermique des centres de données. En outre, la structuration de ce projet de recherche le place dans les thématiques prioritaires du nouvel institut aquitain INEF4<sup>9</sup>. Il serait donc important d'intégrer rapidement notre projet dans un des projets soutenus par cet institut, spécifiquement dans son programme « Nouvelles solutions technologiques pour la construction et la réhabilitation durables ».

---

4. I3A (Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón), GITSE (Grupo de Ingeniería Termal y Sistemas Energéticos).

5. Matériaux et Procédés pour des produits performants.

6. Institut des Sciences Analytiques et de Physico-chimie pour l'Environnement et les Matériaux, équipe de « Physique Chimie des Polymères ».

7. Physique de l'Homme Appliquée à Son Environnement.

8. Institut des Sciences Moléculaires.

9. Institut National d'Excellence Facteur 4 : Réhabilitation et Construction Durables. Il fait partie des instituts d'excellence sur les énergies décarbonées (IEED)



---

# Bibliographie

- [1] P. Yue, J.J. Feng, C. Liu, and J. Shen. A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 515(1) :293–317, 2004.
- [2] J.W. Cahn and J.E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. i. interfacial free energy. *The Journal of Chemical Physics*, 28 :258, 1958.
- [3] R. B. Bird, R. C. Armstrong, and O. Hassager. *Dynamics of polymeric liquids. Vol. 1 : Fluid mechanics*. John Wiley and Sons Inc., New York, 1987.
- [4] H. Jasak. *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows*. PhD thesis, University of London, 1996.
- [5] M. A. Alves, P. J. Oliveira, and F. T. Pinho. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 41 :47–75, 2003.
- [6] K. C. Ng, M. Z. Yusoff, and E. Y. K. Ng. Higher-order bounded differencing schemes for compressible and incompressible flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 53(1) :57–80, 2007.
- [7] P. H. Gaskell and A. K. C. Lau. Curvature-compensated convective transport : SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8(6) :617–641, 1988.
- [8] S. V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. McGraw-Hill, 1980.
- [9] C. M. Rhie and W. L. Chow. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal*, 21(11) :1525–1532, 1983.
- [10] C. W. Gear. *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*. Prentice-Hall Series in Automatic Control. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1971.
- [11] A.D. Brent, V.R. Voller, and K.J. Reid. Enthalpy–porosity technique for modeling convection–diffusion phase change : application to the melting of a pure metal. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 13(3) :297–318, 1988.
- [12] J. H. Ferziger and M. Perić. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer New York, 2002.
- [13] V.R. Voller. Fast implicit finite-difference method for the analysis of phase change problems. *Numerical Heat Transfer Part B-Fundamentals*, 17 :155–169, 1990.
- [14] J. Dongarra, A. Lumsdaine, R. Pozo, and K. Remington. A sparse matrix library in C++ for high performance architectures. In *Proceedings of the Second Object Oriented Numerics Conference*, pages 214–218, 1994.
- [15] C. Geuzaine and J. F. Remacle. Gmsh : a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(11) :1309–1331, 2009.

- [16] G. Karypis and V. Kumar. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20(1) :359, 1999.
- [17] B. Hendrickson and R. Leland. An improved spectral graph partitioning algorithm for mapping parallel computations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 16(2) :452–469, 1995.
- [18] Satish Balay, William D. Gropp, Lois Curfman McInnes, and Barry F. Smith. Efficient management of parallelism in object oriented numerical software libraries. In E. Arge, A. M. Bruaset, and H. P. Langtangen, editors, *Modern Software Tools in Scientific Computing*, pages 163–202. Birkhäuser Press, 1997.
- [19] H. Aref. Stirring by chaotic advection. *Journal of Fluid Mechanics*, 143 :1–21, 1984.
- [20] H. Aref. The development of chaotic advection. *Physics of Fluids*, 14 :1315–1325, 2002.
- [21] J. M. Ottino. *The kinematics of mixing : stretching, chaos, and transport*. Cambridge University Press, 1989.
- [22] J. H. E. Cartwright, M. Feingold, and O. Piro. An introduction to chaotic advection. In Eds. H. Chaté, E. Villermaux, and J.M. Chomaz, editors, *Mixing : Chaos and Turbulence*, volume 373, pages 307–342. Kluwer Academic / Plenum Publisher, 1999.
- [23] C. Castelain, A. Mokrani, P. Legentilhomme, and H. Peerhossaini. Residence time distribution in twisted pipe flows : helically coiled system and chaotic system. *Experiments in Fluids*, 22 :359–368, 1997.
- [24] I. Mezić. Residence–time distributions for chaotic flows in pipes. *Chaos*, 9(1) :173–182, 1999.
- [25] C. Castelain, A. Mokrani, Y. Le Guer, and H. Peerhossaini. Experimental study of chaotic advection regime in a twisted duct flow. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 20(2) :205–232, 2001.
- [26] C. Boesinger, Y. Le Guer, and M. Mory. Experimental study of reactive chaotic flows in tubular reactors. *AIChE Journal*, 51(8) :2122–2132, 2005.
- [27] S. W. Jones, O. M. Thomas, and H. Aref. Chaotic advection by laminar flow in a twisted pipe. *Journal of Fluid Mechanics*, 209 :335–357, 1989.
- [28] H. A. Kusch and J. M. Ottino. Experiments on mixing in continuous chaotic flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 236 :319–348, 1992.
- [29] V. V. Meleshko, O. S. Galaktivnov, G. W. M. Peters, and H. E. H. Meijer. Three-dimensional mixing in Stokes flow : the partitioned pipe mixer problem revisited. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 18 :783–792, 1999.
- [30] P. E. Arratia, G. Voth, and J. P. Gollub. Stretching and mixing of non-Newtonian fluids in time-periodic flows. *Physics of Fluids*, 17 :053102–053102–10, 2005.
- [31] N.T. Nguyen and S.T. Wereley. *Fundamentals and applications of microfluidics*. Boston : Artech House, Boston, 2002.
- [32] J. M. Ottino and S. Wiggins. Introduction : mixing in microfluidics. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 362 :923–935, 2004.
- [33] J. M. Ottino and S. Wiggins. Designing optimal micromixers. *Science*, 305(5683) :485–486, 2004.
- [34] N.T. Nguyen and Z. Wu. Micromixers - a review. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 15(2) :R1–R16, 2005.
- [35] V. Hessel, H. Löwe, and F. Schönfeld. Micromixers - a review on passive and active mixing principles. *Chemical Engineering Science*, 60(8-9 SPEC. ISS.) :2479–2501, 2005.
- [36] P. Tabeling. *Introduction to microfluidics*. Oxford University Press, Oxford, 2005.

- [37] E. A. Mansur, M. Ye, Y. Wang, and Y. Dai. A state-of-the-art review of mixing in microfluidic mixers. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 16(4) :503–516, 2008.
- [38] J. P. B. Mota, A. J. S. Rodrigo, and E. Saadjan. Optimization of heat-transfer rate into time-periodic two-dimensional Stokes flows. *International journal for numerical methods in fluids*, 53(6) :915–931, 2007.
- [39] A. Mokrani, C. Castelain, and H. Peerhossaini. The effects of chaotic advection on heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(13) :3089–3104, 1997.
- [40] N. Acharya, M. Sen, and H. C. Chang. Analysis of heat transfer enhancement in coiled-tube heat exchangers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44(17) :3189–3199, 2001.
- [41] S. Ghosh, H. C. Chang, and M. Sen. Heat-transfer enhancement due to slender recirculation and chaotic transport between counter-rotating eccentric cylinders. *Journal of Fluid Mechanics*, 238 :119–154, 1992.
- [42] V. Ganesan, M. D. Bryden, and H. Brenner. Chaotic heat transfer enhancement in rotating eccentric annular-flow systems. *Physics of Fluids*, 9 :1296–1306, 1997.
- [43] E. Saadjan and J.-C. Leprevost. Chaotic heat transfer in a periodic two-dimensional flow. *Physics of Fluids*, 10 :2102, 1998.
- [44] A. Lefevre, J. P. B. Mota, A. J. S. Rodrigo, and E. Saadjan. Chaotic advection and heat transfer enhancement in Stokes flows. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 24(3) :310–321, 2003.
- [45] A. J. S. Rodrigo, J. P. B. Mota, A. Lefèvre, and E. Saadjan. On the optimization of mixing protocol in a certain class of three-dimensional Stokes flows. *Physics of Fluids*, 15(6) :1505–1516, 2003.
- [46] A. J. S. Rodrigo, J. P. B. Mota, R. C. R. Rodrigues, and E. Saadjan. Heat transfer enhancement in annular Stokes flows. *Journal of Enhanced Heat Transfer*, 13(3) :197–213, 2006.
- [47] J. P. B. Mota, A. J. S. Rodrigo, and E. Saadjan. Heat-transfer enhancement by chaotic advection in the eccentric helical annular flow. *Journal of Heat Transfer*, 130(2) :024501, 2008.
- [48] K. El Omari and Y. Le Guer. Alternate rotating walls for thermal chaotic mixing. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53 :123–134, 2010.
- [49] C. P. De Campos, D. Perugini, W. Ertel-Ingrisch, D. B. Dingwell, and G. Poli. Enhancement of magma mixing efficiency by chaotic dynamics : an experimental study. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 161 :863–881, 2011.
- [50] E. Saadjan, A. J. S. Rodrigo, and J. P. B. Mota. Stokes flow heat transfer in an annular, rotating heat exchanger. *Applied Thermal Engineering*, 31(8-9) :1499–1507, 2011.
- [51] L. M. de la Cruz and E. Ramos. Mixing with time dependent natural convection. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 33(2) :191–198, 2006.
- [52] M. F. M. Speetjens. Topology of advective-diffusive scalar transport in laminar flows. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 77(2) :26309, 2008.
- [53] N. Acharya, M. Sen, and H. C. Chang. Heat transfer enhancement in coiled tubes by chaotic advection. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35 :2475–2489, 1992.
- [54] H. Peerhossaini, C. Castelain, and Y. Le Guer. Heat exchanger design based on chaotic advection. *Experimental thermal and fluid science*, 7(4) :333–344, 1993.
- [55] C. Chagny, C. Castelain, and H. Peerhossaini. Chaotic heat transfer for heat exchanger design and comparison with a regular regime for a large range of Reynolds numbers. *Applied Thermal Engineering*, 20(17) :1615–1648, 2000.
- [56] T. Lemenand and H. Peerhossaini. A thermal model for prediction of the Nusselt number in a pipe with chaotic flow. *Applied Thermal Engineering*, 22(15) :1717–1730, 2002.

- [57] Y. Lasbet, B. Auvity, C. Castelain, and H. Peerhossaini. A chaotic heat-exchanger for PEMFC cooling applications. *Journal of Power Sources*, 156(1) :114–118, 2006.
- [58] V. Kumar, M. Mridha, A. K Gupta, and K. D. P Nigam. Coiled flow inverter as a heat exchanger. *Chemical Engineering Science*, 62(9) :2386–2396, 2007.
- [59] V. Kumar and K. D. P. Nigam. Laminar convective heat transfer in chaotic configuration. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(13-14) :2469–2479, 2007.
- [60] A. Yamagishi, T. Inaba, and Y. Yamaguchi. Chaotic analysis of mixing enhancement in steady laminar flows through multiple pipe bends. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(7-8) :1238–1247, 2007.
- [61] S. Caubet. *Procédés basse énergie pour la production d'émulsions très concentrées huile dans eau : caractérisation, intensification et applications*. PhD thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour, décembre 2010.
- [62] S. Caubet, Y. Le Guer, B. Grassl, K. El Omari, and E. Normandin. A low-energy emulsification batch mixer for concentrated oil-in-water emulsions. *AIChE Journal*, 57(1) :27–39, 2011.
- [63] P. D. Swanson and J. M. Ottino. A comparative computational and experimental study of chaotic mixing of viscous fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 213 :227–249, 1990.
- [64] T. J. Kaper and S. Wiggins. An analytical study of transport in Stokes flows exhibiting large-scale chaos in the eccentric journal bearing. *Journal of Fluid Mechanics*, 253 :211–243, 1993.
- [65] V. V. Meleshko and H. Aref. A blinking rotlet model for chaotic advection. *Physics of Fluids*, 8(12) :3215–3217, 1996.
- [66] T. J. Price, T. Mullin, and J. J. Kobine. Numerical and experimental characterization of a family of two-roll-mill flows. *Royal Society of London, Proceedings Series A*, 459 :117–135, 2003.
- [67] D. L. Young, C. L. Chiu, and C. M. Fan. A hybrid Cartesian/immersed-boundary finite-element method for simulating heat and flow patterns in a two-roll mill. *Numerical Heat Transfer Part B : Fundamentals*, 51(3-4) :251–274, 2007.
- [68] C. L. Chiu, C. M. Fan, and D. L. Young. 3D hybrid Cartesian/immersed-boundary finite-element analysis of heat and flow patterns in a two-roll mill. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(7-8) :1677–1689, 2009.
- [69] S. C. Jana, G. Metcalfe, and J. M. Ottino. Experimental and computational studies of mixing in complex Stokes flows : the vortex mixing flow and multicellular cavity flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 269 :199–246, 1994.
- [70] S. M. Richardson. Flows of variable-viscosity fluids in ducts with heated walls. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 25(2) :137–156, 1987.
- [71] M. D. Finn, S. M. Cox, and H. M. Byrne. Mixing measures for a two-dimensional chaotic Stokes flow. *Journal of Engineering Mathematics*, 48(2) :129–155, 2004.
- [72] M. A. Stremmer. *Encyclopedia of microfluidics and nanofluidics*, chapter Mixing measures, pages 1376–1382. Springer Verlag, 2008. Editor : Li, D.
- [73] R. Sturman and S. Wiggins. Eulerian indicators for predicting and optimizing mixing quality. *New Journal of Physics*, 11 :075031, 2009.
- [74] G. Mathew, I. Mezic, and L. Petzold. A multiscale measure for mixing. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 211(1-2) :23–46, 2005.
- [75] E. Gouillart, N. Kuncio, O. Dauchot, B. Dubrulle, S. Roux, and J. L. Thiffeault. Walls inhibit chaotic mixing. *Physical Review Letters*, 99(11) :114501, 2007.

- [76] E. Gouillart, O. Dauchot, B. Dubrulle, S. Roux, and J. L. Thiffeault. Slow decay of concentration variance due to no-slip walls in chaotic mixing. *Physical Review E*, 78(2) :026211, 2008.
- [77] E. Gouillart, J. L. Thiffeault, and O. Dauchot. Rotation shields chaotic mixing regions from no-slip walls. *Physical Review Letters*, 104 :204502, 2010.
- [78] R.T. Pierrehumbert. Tracer microstructure in the large-eddy dominated regime. In Eds. H. Aref and M.S. El Naschie, editors, *Chaos Applied to Fluid Mixing*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [79] W. Liu and G. Haller. Strange eigenmodes and decay of variance in the mixing of diffusive tracers. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 188(1-2) :1–39, 2004.
- [80] G. Metcalfe and D. R. Lester. Mixing and heat transfer of highly viscous food products with a continuous chaotic duct flow. *Journal of Food Engineering*, 95(1) :21–29, 2009.
- [81] K. El Omari and Y. Le Guer. Thermal chaotic mixing of power law fluids in a mixer with alternately-rotating walls. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 165 :641–651, 2010.
- [82] S. Fournanty, Y. Le Guer, K. El Omari, and J.P. Dejean. Laminar flow emulsification process to control the viscosity reduction of heavy crude oils. *Journal of Dispersion Science and Technology*, 29(10) :1355–1366, 2008.
- [83] H.M. Princen. *Encyclopedia of Emulsion Technology*, chapter Structure, mechanics, and rheology of concentrated emulsions and fluid foams, page 259. Marcel Dekker, New York, 2001.
- [84] R. Kandasamy, X. Wang, and A. S. Mujumdar. Transient cooling of electronics using phase change material (PCM)-based heat sinks. *Applied Thermal Engineering*, 28(8-9) :1047 – 1057, 2008.
- [85] K. C. Nayak, S. K. Saha, K. Srinivasan, and P. Dutta. A numerical model for heat sinks with phase change materials and thermal conductivity enhancers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(11-12) :1833–1844, 2006.
- [86] S. Kim and L.T. Drzal. High latent heat storage and high thermal conductive phase change materials using exfoliated graphite nanoplatelets. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 93(1) :136–142, 2009.
- [87] P. Charunyakorn, S. Sengupta, and S.K. Roy. Forced convection heat transfer in microencapsulated phase change material slurries : flow in circular ducts. *International journal of heat and mass transfer*, 34(3) :819–833, 1991.
- [88] M. Goel, S. K. Roy, and S. Sengupta. Laminar forced convection heat transfer in microcapsulated phase change material suspensions. *International journal of heat and mass transfer*, 37(4) :593–604, 1994.
- [89] E.L. Koshmeider and S.A. Prahl. Surface-tension-driven Bénard convection in small containers. *Journal of Fluid Mechanics*, 215 :571–583, 1990.
- [90] S. Rahal, P. Cerisier, and H. Azuma. Bénard–Marangoni convection in a small circular container : influence of the Biot and Prandtl numbers on pattern dynamics and free surface deformation. *Experiments in Fluids*, 43(4) :547–554, 2007.
- [91] M. Médale and P. Cerisier. Numerical simulation of Benard-Marangoni convection in small aspect ratio containers. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 42(1) :55–72, 2002.
- [92] H. C. Kuhlmann and U. Schoisswohl. Flow instabilities in thermocapillary-buoyant liquid pools. *Journal of Fluid Mechanics*, 644 :509–535, 2010.
- [93] G. Wang, F. Incropera, and R. Viskanta. Mixed convection heat transfer in a horizontal open-channel flow with uniform bottom heat flux. *Journal of Heat Transfer*, 105 :817, 1983.

- [94] I. Sadiq and R. Usha. Linear instability in a thin viscoelastic liquid film on an inclined, non-uniformly heated wall. *International Journal of Engineering Science*, 43(19-20) :1435–1449, 2005.
- [95] U. Thiele and E. Knobloch. Thin liquid films on a slightly inclined heated plate. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 190(3-4) :213–248, 2004.
- [96] X. Nicolas. Bibliographical review on the Poiseuille-Rayleigh-Bénard flows : the mixed convection flows in horizontal rectangular ducts heated from below. *International Journal of Thermal Sciences*, 41(10) :961–1016, 2002.
- [97] A. Benderradji, A. Haddad, R. Taher, M. Médale, C. Abid, and F. Papini. Characterization of fluid flow patterns and heat transfer in horizontal channel mixed convection. *Heat and Mass Transfer*, 44 :1465–1476, 2008.
- [98] M. Medale and X. Nicolas. Call for contributions : Towards numerical benchmark solutions for 3d mixed convection flows in rectangular channels heated from below. *International Journal of Thermal Sciences*, 45(4) :331 – 333, 2006.
- [99] M. Médale, X. Nicolas, S. Glockner, and S. Gounand. Vers une solution numérique de référence pour un écoulement 3d de convection mixte : démarche et résultats. In *Actes du congrès SFT Le Touquet*, pages 209–214, 2010.
- [100] P.A. Williams. *Handbook of industrial water soluble polymers*. Wiley Online Library, 2007.
- [101] G. Dupuis, J. Rigolini, G. Clisson, D. Rousseau, R. Tabary, and B. Grassl. Determination of the macromolecular dimensions of hydrophobically modified polymers by micellar size exclusion chromatography coupled with multiangle light scattering. *Analytical chemistry*, 81(21) :8993–9001, 2009.
- [102] C.J. Chesnakas and R.L. Simpson. Detailed investigation of the three-dimensional separation about a 6 :1 prolate spheroid. *AIAA journal*, 35(6) :990–999, 1997.
- [103] B. Koobus, C. Farhat, and H. Tran. Computation of unsteady viscous flows around moving bodies using the k-turbulence model on unstructured dynamic grids. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190(11-12) :1441–1466, 2000.
- [104] P.L. Roe. Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of computational physics*, 43(2) :357–372, 1981.
- [105] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov’s method. *Journal of Computational Physics*, 32(1) :101–136, 1979.
- [106] A. Dervieux. Steady Euler simulations using unstructured meshes. *Von Karman Institute Lecture Series for Fluid Dynamics Computational Fluid Dynamics*, 1, 1985.
- [107] S. Camarri, M.V. Salvetti, B. Koobus, and A. Dervieux. A low-diffusion muscl scheme for les on unstructured grids. *Computers & fluids*, 33(9) :1101–1129, 2004.
- [108] B. Koobus and C. Farhat. A variational multiscale method for the large eddy simulation of compressible turbulent flows on unstructured meshes—application to vortex shedding. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(15-16) :1367–1383, 2004.
- [109] R. S. Qin and H. K. Bhadeshia. Phase field method. *Materials Science and Technology*, 26(7) :803–811, 2010.
- [110] O. Botella and R. Peyret. Benchmark spectral solutions on the lid-driven cavity flow. *Computers & Fluids*, 27(4) :421–33, 1998.
- [111] U. Ghia, K. N. Ghia, and C. T. Shin. High-Re solutions for incompressible flow using navier-stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, 48 :387–411, 1982.

- [112] L. Fuchs and N. Tillmark. Numerical and experimental study of driven flow in a polar cavity. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 5(4) :311–329, 1985.
- [113] B.C. Bell and K.S. Surana. p-version least squares finite element formulation for two-dimensional, incompressible, non-Newtonian isothermal and non-isothermal fluid flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 18(2) :127–162, 1994.
- [114] I. Demirdžić, Ž. Lilek, and M. Perić. Fluid flow and heat transfer test problems for non-orthogonal grids : Bench-mark solutions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 15(3) :329–354, 1992.
- [115] N. Hannoun, V. Alexiades, and T.Z. Mai. A reference solution for phase change with convection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 48(11) :1283–1308, 2005.
- [116] A. Zebib, G.M. Homsy, and E. Meiburg. High marangoni number convection in a square cavity. *Physics of Fluids*, 28 :3467, 1985.
- [117] B.M. Carpenter and G.M. Homsy. High Marangoni number convection in a square cavity : Part ii. *Physics of Fluids*, 2 :137, 1990.
- [118] H. C. Kuhlmann and S. Albensoeder. Three-dimensional flow instabilities in a thermocapillary-driven cavity. *Physical Review E*, 77(3) :036303, 2008.
- [119] Sheng-Tao Yu, Bo-Nan Jiang, Jie Wu, and J. C. Duh. Three-dimensional simulations of marangoni-benard convection in small containers by the least-squares finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 160(1-2) :71 – 88, 1998.
- [120] J.W. Peterson and G.F. Carey. Parallel adaptive solution of coupled Rayleigh-Bénard-Marangoni problems with the navier-slip. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 66(4) :428–451, 2011.



---

---

# ANNEXE A

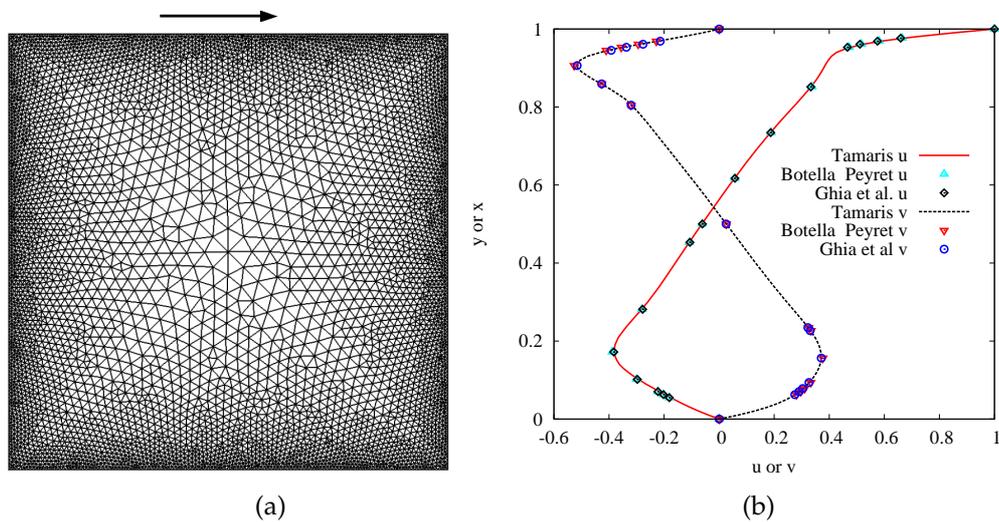
---

## *Quelques exemples de validations du code Tamaris*

Le code Tamaris a été validé dans plusieurs situations d'écoulement et de transfert thermique, incluant la convection naturelle ou mixte, la fusion ou les écoulements thermocapillaires.

### A.1. Écoulements en cavités entraînées

#### A.1.1. Fluide newtonien en cavité carrée



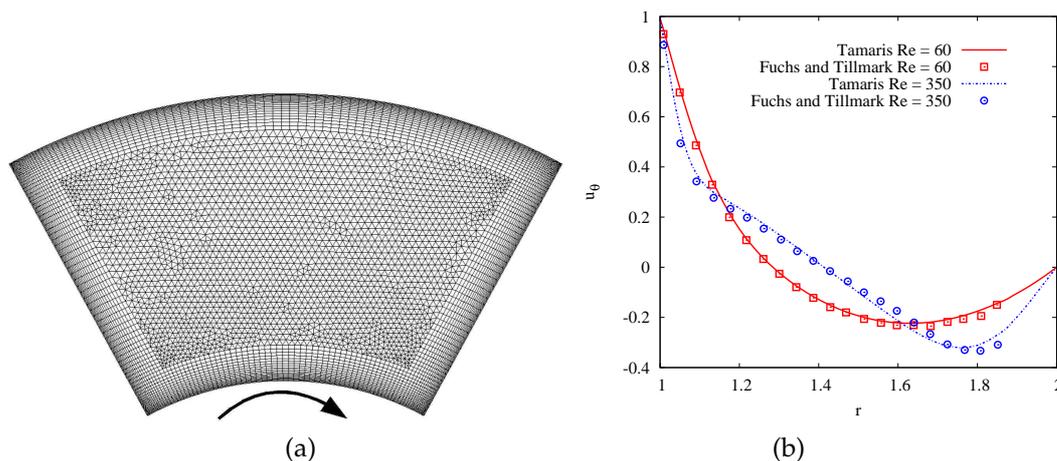
**Figure A.1.:** (a) Maillage non structuré de la cavité carrée à paroi supérieure entraînée (10468 cellules). (b) Composantes  $u$  et  $v$  de la vitesse, respectivement sur les axes  $x = 0.5$  et  $y = 0.5$  pour un écoulement à  $Re = 1000$ . Comparaisons avec [110] et [111].

Ce premier cas test est largement utilisé pour la validation des résultats hydrodynamiques de l'implémentation des codes numériques de mécanique des fluides. C'est celui de la cavité à paroi

entraînée. Ici la comparaison est faite pour un écoulement 2D laminaire de fluide newtonien à un nombre de Reynolds de  $Re = 1000$ . Le maillage non structuré utilisé est montré sur la Fig. A.1(a). C'est un maillage composé d'une seule couche de prismes à base triangulaire. Les résultats du code Tamaris sont comparés à la solution de référence de Botella et Peyret [110], obtenue à l'aide d'une méthode spectrale avec des polynômes de Chebyshev de degré  $N = 96$ , ainsi qu'aux résultats de Ghia *et al.* [111], obtenus par une formulation vorticité-fonction de courant résolue par différences finies sur un maillage  $128 \times 128$ . La Fig. A.1(b) montre un excellent accord avec ces résultats. Une comparaison quantitative des valeurs des extremums de  $u$  et  $v$  et de leurs positions avec les résultats de [110] montre des différences relatives inférieures à 2%.

### A.1.2. Fluide newtonien en cavité polaire

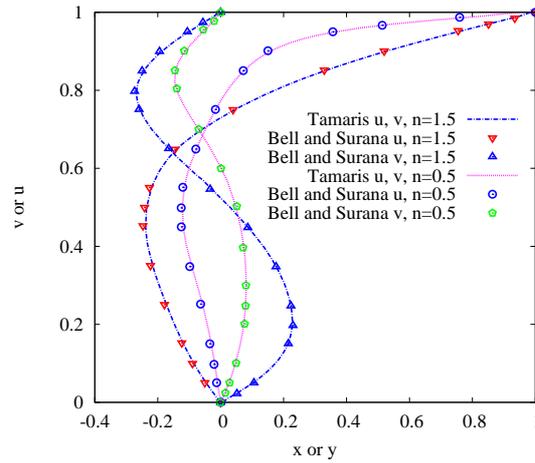
Un second cas test expérimental concerne l'écoulement dans une cavité polaire avec une paroi circulaire en rotation. Fuchs et Tillmark [112] ont réalisé des mesures de vitesse dans cette cavité par anémométrie laser Doppler. Le maillage utilisé pour l'écoulement est un maillage hybride, avec des cellules à bases rectangulaires au niveau des parois pour améliorer l'orthogonalité (Fig A.2(a)). Sur la Fig A.2(b), nous comparons les résultats du code Tamaris aux mesures réalisées pour des nombres de Reynolds  $Re = 60$  et  $350$ . Une bonne concordance est observée avec ces résultats.



**Figure A.2.:** (a) Maillage de la cavité polaire avec 9610 cellules. (b) Composante  $u_\theta$  de la vitesse le long de l'axe radial central pour  $Re = 60$  et  $350$ . Comparaison avec les résultats expérimentaux de [112].

### A.1.3. Fluide non newtonien en cavité carrée

Le cas test de cavité carrée entraînée a été appliqué aux écoulements de fluides non newtoniens modélisés par une loi de puissance (Eq. II.8) avec des comportements rhéologiques rhéo-fluidifiant ( $n = 0.5$ ) ou rhéoépaississant ( $n = 1.5$ ). Les résultats du code Tamaris sont comparés à ceux de Bell et Surana [113], obtenus par une méthode d'éléments finis moindres-carrés. Les deux écoulements sont caractérisés par un nombre de Reynolds généralisé  $Re_{pL} = 100$  (Eq. III.7), et le maillage utilisé est celui de la Fig. A.1(a). Une très bonne concordance des résultats est observée (Fig. A.3) et les erreurs relatives sur les extremums de la vitesse et leurs positions sont inférieures à 2,5%.



**Figure A.3.:** Composantes  $u$  et  $v$  de la vitesse de l'écoulement dans une cavité entraînée de fluides rhéofluidifiant ( $n = 0.5$ ) ou rhéopaisissant ( $n = 1.5$ ). Comparaison avec les résultats de [113] ( $Re_{PL} = 100$ ).

#### A.1.4. Convection naturelle entre un cylindre et une cavité carrée

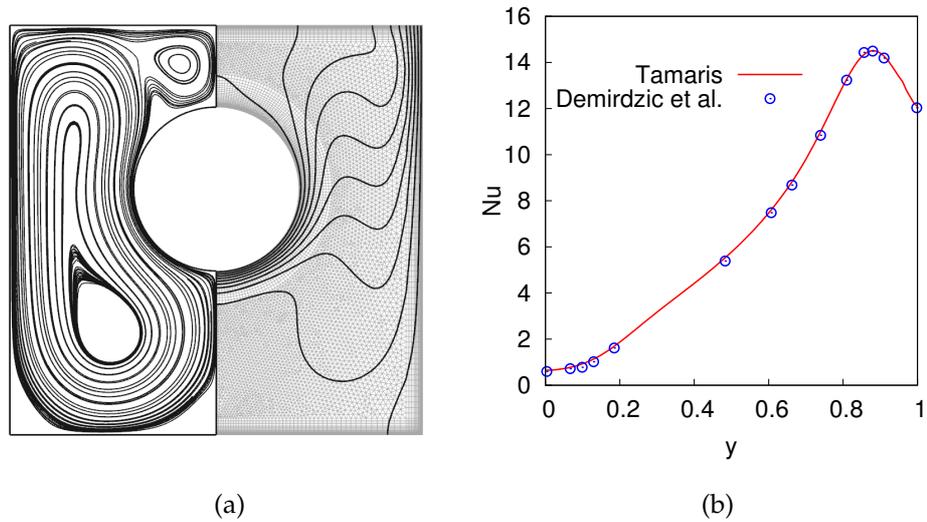
L'implémentation de la convection naturelle est vérifiée ici vis-à-vis du cas test proposé par Demirdzic et al. [114]. Dans une cavité carrée de dimensions  $L \times L$ , un cylindre circulaire de diamètre  $d/L = 0,4$  est placé à une position verticale excentrée de  $\delta/L = 0,1$ . La surface du cylindre est chauffée à  $T_h = 1$ , les parois verticales de la cavité sont à  $T_c = 0$  et les parois horizontales sont adiabatiques. Le nombre Rayleigh de l'écoulement est  $Ra = 10^6$  et le nombre de Prandtl  $Pr = 0,1$ . La solution de Demirdzic et al. [114] a été obtenue sur un maillage structuré de  $256 \times 128$  de la moitié du domaine, grâce à la symétrie du problème. Le maillage utilisé par Tamaris est celui de la Fig. A.4(a) avec 15,366 cellules. Sur cette figure, les lignes de courant et les isothermes obtenues correspondent à celles de [114]. Une très bonne correspondance est observée aussi pour la distribution du Nusselt local sur la paroi verticale (Fig. A.4(b)). L'erreur relative sur le Nusselt moyen est inférieure à 0,1 %.

#### A.1.5. Fusion de l'étain en cavité, couplée à la convection naturelle

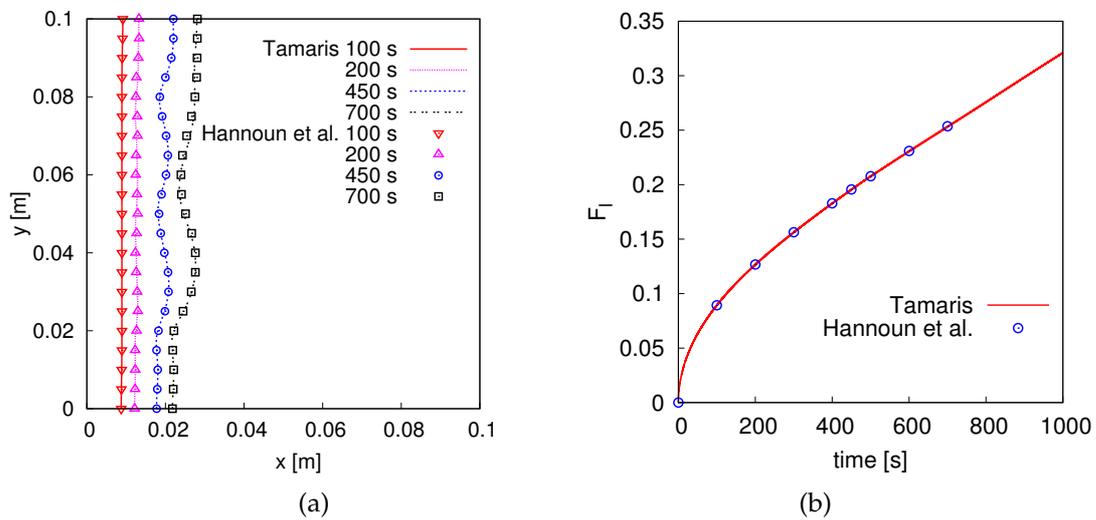
Hannoun *et al.* [115] proposent un cas test numérique pour la vérification de l'implémentation des algorithmes de changement de phase liquide-solide. Il s'agit de la fusion de l'étain dans une cavité carrée dont une des parois verticales est maintenue à une température supérieure à la température de fusion du matériau initialement solide. Ces auteurs ont obtenu leur solution de référence par une méthode de volumes finis sur un maillage structuré très fin de  $600 \times 600$ . La Fig. A.5 donne les résultats obtenus par Tamaris sur un grille uniforme de  $200 \times 200$ . Les fronts de fusion (Fig. A.5(a)) aux instants 450 s et 700 s présentent des sinuosités correspondant à des recirculations du liquide. L'évolution de la fraction liquide totale calculée par :

$$F_l = \frac{1}{\sum_c V_c} \left( \sum_c V_c f_c \right), \quad (\text{A.1})$$

avec  $V_c$  le volume de cellule  $c$ , est donnée sur la Fig. A.5(b). Ces résultats présentent une très bonne correspondance avec ceux de Hannoun *et al.* [115].



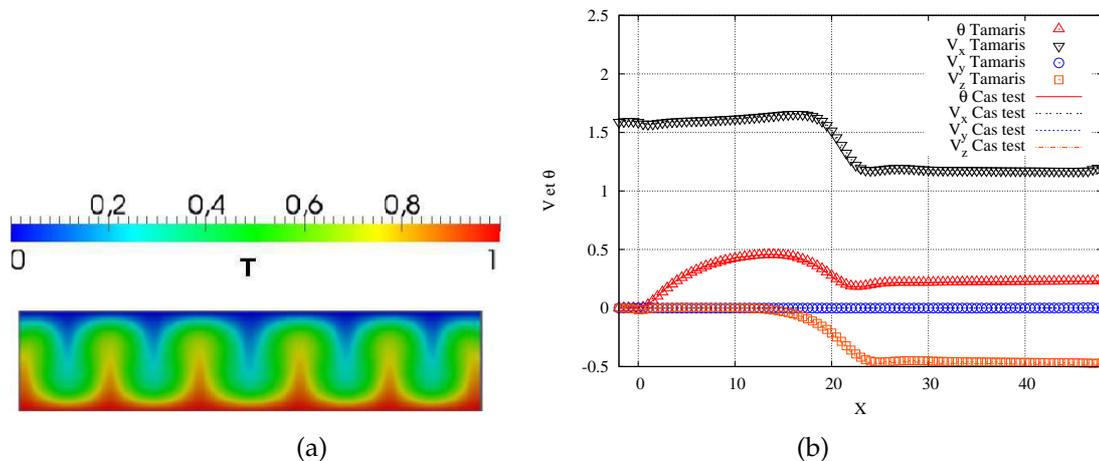
**Figure A.4.** : Cas test de convection naturelle de Demirdzic et al. [114]. (a) Droite : maillage utilisé et isothermes calculées (isovaleurs de 0,05 à 0,95 avec un pas de 0,1). Gauche : lignes de courant. (b) Distribution du nombre de Nusselt local le long de la paroi verticale, comparaison avec les résultats de Demirdzic et al. [114].



**Figure A.5.** : Comparaison des fronts de fusion obtenus à différents instants (a) et de l'évolution de la fraction liquide totale dans la cavité (b) avec les résultats de référence de Hannoun et al. [115].

### A.1.6. Écoulement de convection mixte Poiseuille-Rayleigh-Bénard

Sur la Fig. A.6, nous donnons l'exemple d'une validation dans le cas d'un écoulement tridimensionnel stationnaire de convection mixte de type Poiseuille-Rayleigh-Bénard dans une conduite à section rectangulaire de rapport de forme 10, caractérisé par  $Re = 50$ ,  $Ra = 5000$  et  $Pr = 0,7$ . Ce cas test numérique a été proposé par Médale et al. [98,99]. Le fluide entre dans la canalisation à une température adimensionnelle  $\theta = 0$ , les parois inférieure et supérieure sont respectivement à  $\theta = 1$  et  $\theta = 0$ , alors que les parois latérales sont adiabatiques. Le maillage utilisé est une grille resserrée sur les parois de taille  $128 \times 176 \times 50$ . On observe la formation de rouleaux longitudinaux dans la canalisation, dont une coupe du champ de température est montrée sur la Fig. A.6(a). Une comparaison des valeurs de la vitesse et de la température réalisée le long d'un axe ( $y = 5, z = 0,5$ ) avec la solution de référence proposée dans [99] est montrée sur la Fig. A.6(b).

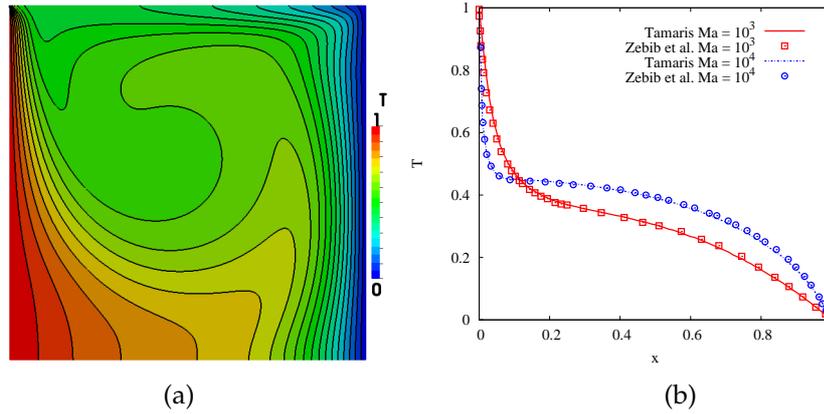


**Figure A.6.:** (a) Champ de la température sur une coupe verticale à  $x = 30 H$ . (b) Profils longitudinaux des composantes de la vitesse  $V_x, V_y, V_z$  et de la température  $\theta$  adimensionnées le long de l'axe ( $y = 5, z = 0,5$ ) de la conduite à section rectangulaire. Comparaison avec le cas test [98,99].

### A.1.7. Écoulements thermocapillaires en cavité 2D

L'implémentation des conditions aux limites thermocapillaires dans le code est vérifiée par comparaison à la solution de référence donnée par Zebib et al. [116]. Il s'agit d'une cavité 2D carrée avec une surface libre adiabatique, deux parois verticales à températures imposées différentes et une base adiabatique. Sur la Fig. A.7(a) est représenté le champ de température obtenu pour un écoulement à nombre de Marangoni  $Ma = 10^4$ . Une comparaison est effectuée avec succès sur la Fig. A.7(b) pour  $Ma = 10^3$  et  $Ma = 10^4$ .

Pour d'autres conditions d'écoulement, le Tab. A.1 donne les valeurs de la vitesse au centre de la surface libre et du Nusselt moyen sur les deux parois verticales, comparées aux résultats de référence proposés par Carpenter et Homsy [117] et Kuhlman [118]. Les concordances sont satisfaisantes.



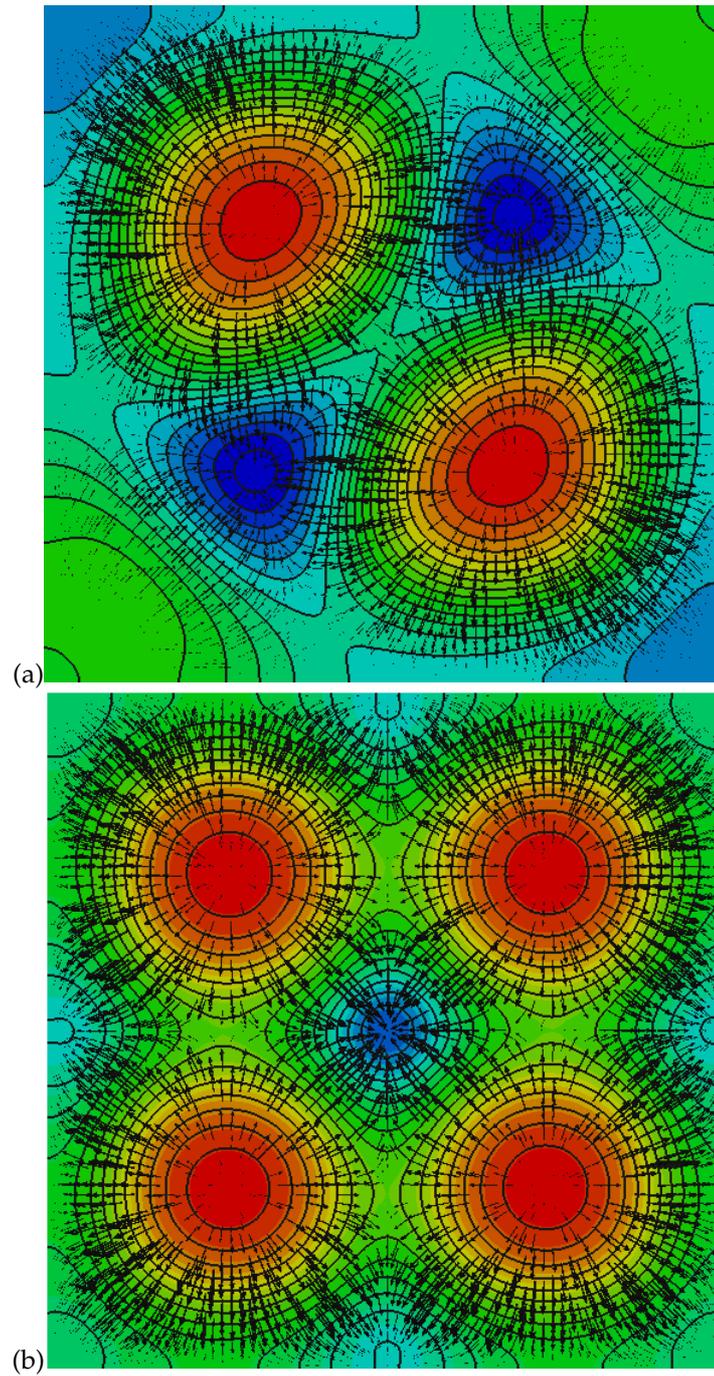
**Figure A.7.:** Écoulement thermocapillaire dans une cavité carrée 2D. (a) Champ des températures. (b) Distribution de la température sur la surface libre pour des valeurs du nombre de Marangoni de  $10^3$  et  $10^4$  ( $Pr = 1$ ).

Source (Maillage)	$u(0.5,1)$	$\overline{Nu}(x=0)$	$\overline{Nu}(x=1)$
Carpenter et Homsy [117]	-179	4,17	4,14
Kuhlman (211x211) [118]	-175,93	4,546	4,545
Tamaris (120x120)	-174,38	4,543	4,543

**Table A.1.:** Résultats du cas test de validation pour un écoulement thermocapillaire dans une cavité carrée ouverte de parois latérales maintenues à une différence de température constante ; Comparaison avec la littérature [117,118] ( $Pr=30$ ,  $Ma = 6 \times 10^4$ ,  $Ra=0$ ).

### A.1.8. Écoulements thermocapillaires en cavité 3D

Enfin, sur la Fig. A.8, nous présentons des résultats obtenus pour des écoulements thermocapillaires dans des cavités 3D de surface libre carrée et ayant un grand rapport de forme, largeur sur profondeur  $\Gamma$ . Leurs parois sont adiabatiques et leurs surfaces libres refroidies ( $Bi = 0,2$ ). Ces écoulements ont été étudiés expérimentalement par Koschmieder et Prahl [89]. Les formes d'écoulement obtenues par Tamaris pour un maillage de  $4 \times 10^5$  cellules (calcul parallèle) correspondent qualitativement à celles retrouvées expérimentalement et par simulation numérique par d'autres auteurs [91,119,120] dans les mêmes gammes de  $Ma$  et de  $\Gamma$ .



**Figure A.8.** Écoulement thermocapillaire dans une cavité 3D à surface libre carrée. Vecteurs vitesse et champ de la température sur la surface libre.  $Bi = 0,2$ ;  $Pr = 880$ . (a)  $\Gamma = 5,68$ ;  $Ma = 92$ ;  $Ra = 33$ . (b)  $\Gamma = 6,36$ ;  $Ma = 95$ ;  $Ra = 30$ .



---

---

## ANNEXE B

---

### *Sélection de publications*

- [A14] Rigolini J., Bombled F., Ehrenfeld F., **El Omari K.**, Le Guer Y., Grassl B., 2D-infrared thermography monitoring of ultrasound-assisted polymerization of water-soluble monomer in a gel process. *Macromolecules*, 44, pp. 4462-4469, 2011.
- [A13] Le Guer Y., **El Omari K.**, Chaotic advection for thermal mixing, *Advances in Applied Mechanics*, 2011, à paraître.
- [A12] **El Omari K.**, Kousksou T., Le Guer Y., Impact of shape of container on natural convection and melting inside enclosures used for passive cooling of electronic devices, *Applied Thermal Engineering*, 31, pp. 3022-3035, 2011.
- [A10] Jamil A., Caubet S., Grassl B., Kousksou T., **El Omari K.**, Zeraouli Y., Le Guer Y., Thermal properties of non crystallizable oil-in-water highly concentrated emulsions, *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects*, 382(1-3), pp. 266-273, 2011.
- [A9] **El Omari K.**, Le Guer Y., Alternate rotating walls for thermal chaotic mixing. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, 53, pp. 123-134, 2010.
- [A8] **El Omari K.**, Le Guer Y., Thermal chaotic mixing of power law fluids in an alternate rotating walls mixer. *Journal of Non-Newtonian fluid mechanics*, 165, pp. 641-651, 2010.
- [A7] Kousksou T., El Rhafiki T., **El Omari K.**, Zeraouli Y., Le Guer Y., Forced Convective Heat Transfer in Supercooled Phase-Change Material Suspensions with Stochastic Crystallization. *Int. J. of Refrigeration*, 33(8), pp. 1569-1582, 2010.
- [A5] Caubet S., Le Guer Y., Grassl B., **El Omari K.**, Normandin E., A Low-Energy Emulsification Batch Mixer For Concentrated Oil-In-Water Emulsions. *AIChE Journal*, 57(1), pp. 27-39, 2011.
- [A3] Fournanty S., Le Guer Y., **El Omari K.**, Dejean J-P., Laminar flow emulsification process to control the viscosity reduction of heavy crude oils. *J. of Dispersion Science and Technology*, 29(10), pp. 1355-1366, 2008.
- [A2] **El Omari K.**, Dumas J.P., Crystallization of supercooled spherical nodules in a flow, *Int. J. Thermal Sciences*, 43(12), pp. 1171-1180, 2004.