



HAL
open science

Rayleigh-Taylor like thermal instabilities in supercritical fluids

Keltoum Boutrouft

► **To cite this version:**

Keltoum Boutrouft. Rayleigh-Taylor like thermal instabilities in supercritical fluids. Engineering Sciences [physics]. Arts et Métiers ParisTech, 2006. English. NNT: 2006ENAM0067. pastel-00002349

HAL Id: pastel-00002349

<https://pastel.hal.science/pastel-00002349>

Submitted on 7 May 2007

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.



Ecole doctorale n° 432 : Sciences des Métiers de l'Ingénieur

THÈSE

pour obtenir le grade de

Docteur

de

l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Spécialité "Mécanique"

*présentée et soutenue publiquement
par*

Keltoum BOUTROUFT

le 20 décembre 2006

INSTABILITES THERMOCONVECTIVES DE TYPE RAYLEIGH-TAYLOR DANS LES FLUIDES SUPERCRITIQUES

Directeur de thèse : Abdelhak AMBARI

Codirecteur(s) de thèse : Sakir AMIROUDINE

Jury :

M. Bernard ZAPPOLI , Responsable du Programme Science de Matière au CNES, Toulouse ..	Président
M. Abdelkader MOJTABI , Professeur, IMFT, Université Paul Sabatier, Toulouse	Rapporteur
M. Roger PRUD'HOMME , Directeur de Recherche au CNRS à Paris VI.....	Rapporteur
M. Khalil NACIRI , Professeur Université Hassan II, Casablanca	Examineur
M. Jalil OUZZANI , Directeur Scientifique Arcofluid, Pessac	Examineur
M. Abdelhak AMBARI , Professeur, LPMI, ENSAM, Angers	Examineur
M. Sakir AMIROUDINE , Maître de Conférences HdR, LPMI, ENSAM, Angers	Examineur

Laboratoire de Mécanique des Systèmes et des Procédés
ENSAM, CER de Paris

TABLE DES MATIERES

REMERCIEMENT	4
INTRODUCTION GENERALE	6
CHAPITRE 1 : Introduction aux fluides supercritiques.....	9
1.1 Propriétés des fluides supercritiques	9
1.2 Le point critique et stabilité thermodynamique.....	11
1.3 Les phénomènes critiques	14
1.3.1 Exposants critiques [Sta71].....	14
1.3.2 Les modèles classiques.....	17
1.3.3 L'influence de la gravité et les anomalies de transport de la chaleur	19
1.3.3.1 Effet de la gravité	19
1.3.3.2 Transfert de chaleur.....	20
1.4 Effet piston	21
1.5 Les fluides supercritiques dans le domaine industriel.....	23
1.6 Conclusion.....	29
CHAPITRE 2 : Quelques aspects sur les phénomènes d'instabilités	30
2.1 Instabilités d'interface	30
2.2 Régimes d'écoulement	31
2.2.1 Régime linéaire	31
2.2.2 Régime non linéaire	33
2.2.3 Régime turbulent	34
2.3 Les instabilités thermiques dans les fluides supercritiques	34
2.3.1 Instabilités de Rayleigh-Bénard dans les fluides supercritiques	35
2.3.2 Aspects théoriques et bibliographiques des instabilités de Rayleigh-Taylor	38
CHAPITRE 3 : Modélisation mathématique de la configuration de type Rayleigh-Taylor.	43
3.1 Position du problème (cas sans stratification initiale).....	43

3.2	Les équations dimensionnelles du problème.....	47
3.3	Equations adimensionnelles	48
3.4	Approximation à faible nombre de « Mach » :	50
3.5	Equations non filtrées :	52
3.6	Cas avec stratification initiale :	54
3.6.1	Intérêt de la stratification.....	54
3.6.2	Equations stratifiées	56
3.7	Conclusion.....	59
 CHAPITRE 4 : Méthode numérique des Volumes Finis.....		60
4.1	Introduction	60
4.2	Méthode des Volumes Finis.....	61
4.3	Schémas de discrétisation.....	66
4.4	Conditions aux limites.....	70
4.5	Couplage vitesse pression	71
4.6	Le maillage	74
4.7	Solveur	75
4.8	Filtrage acoustique	76
4.9	Conclusion.....	76
 CHAPITRE 5 : Résultats dans le cas sans stratification et avec filtrage acoustique.....		78
5.1	Validation du code : instabilités de Rayleigh-Bénard en fluide incompressible.....	78
5.2	Etude de la stabilité de deux couches d'un fluide supercritique placée en configuration instable avec filtrage acoustique	81
5.2.1	Contexte de l'étude.....	81
5.2.2	Analyse de stabilité linéaire	83
5.2.3	Effet de la taille de la couche inférieure sur la stabilité de la configuration de type Rayleigh-Taylor.....	90
5.3	Conclusion.....	93

CHAPITRE 6 : Résultats dans le cas sans filtrage acoustique et avec stratification.....	95
6.1 Contexte de l'étude.....	95
6.2 Diagramme de stabilité dans la configuration type Rayleigh-Taylor.....	96
6.3 Effet de la stratification initiale.....	99
6.4 Analyse des champs de densité (ou température) et de vitesse.....	103
6.5 Conclusion.....	110
CONCLUSION GENERALE	112
ANNEXE 1 : Propriétés thermophysiques de l'He³	115
ANNEXE 2 : Instabilités de Rayleigh-Bénard avec l'approximation de Boussinesq	118
Liste des Tableaux	128
Liste des Figures.....	129
Bibliographie.....	133

REMERCIEMENTS

C'est un grand plaisir de commencer mes remerciements en évoquant mes directeurs de thèse, M. Abdelhak Ambari, M. Sakir Amiroudine pour m'avoir guidé, encouragé, conseillé dans mon travail de recherche. Ils ont tous les deux fait preuve d'une patience, d'une disponibilité et d'une pédagogie sans égales. J'ai non seulement bénéficié de leurs compétences et de leurs visions générales de la physique, mais également de leur humour et de leur enrichissante culture.

Je tiens à remercier M. Marian Reszka, Directeur de L'ENSAM, qui m'a permis d'intégrer son établissement, ainsi que M. Jean-Pierre L'Huillier, Directeur du laboratoire LPMI à l'époque où j'ai débuté ma thèse pour leur hospitalité et leur compréhension dans l'apprentissage de mon travail.

Je remercie chaleureusement M. Jaafar Khaled Naciri, mon ancien professeur, pour m'avoir fait l'honneur de participer au Jury de soutenance en venant du Maroc et de m'avoir fait part de ses remarques constructives à propos du manuscrit.

Je remercie bien entendu M. Bernard Zappoli d'avoir présidé le jury de thèse. La manière dont il l'a fait a contribué à rendre l'atmosphère plus agréable et plus décontractée avec une touche d'humour dont je lui sais grès. Je suis reconnaissante à M. Roger Prud'homme et M. Abdelkader Mojtabi qui ont accepté d'être les rapporteurs de cette thèse, et je les en remercie, de même que pour leur participation au Jury. Ils ont également contribué par leurs nombreuses remarques et suggestions à améliorer la qualité de ce mémoire, et je leur en suis très reconnaissante pour leur temps qu'ils ont consacré à la rédaction des rapports, avec tout le travail et l'investissement que cela implique. Leurs rapports m'ont permis, entre autre, de jeter un nouveau regard sur mon travail, et de prendre plus de recul pour une vision plus globale. Je souhaite enfin exprimer ma gratitude à M. Jalil Ouazzani pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail en acceptant de faire parti du jury ainsi que pour ses conseils, ses remarques et ses suggestions pour l'amélioration de ce travail.

Je remercie bien évidemment tous les thésards, les membres du laboratoire (LPMI) et tout le personnel de l'ENSAM pour avoir rendu mon séjour aussi agréable qu'instructif de tout point de vue.

Je remercie enfin le CNES qui a financé une bonne partie de mes études et m'a permis d'obtenir une allocation de recherche.

Sans oublier bien entendu, mon mari, mon père et toute ma famille pour m'avoir soutenu et supporter durant ces années. Par leurs encouragements et leur assistance aussi bien matérielle que morale, ils m'ont permis d'effectuer cette thèse dans de bonnes conditions.

Je remercie tous ceux sans qui cette thèse ne serait pas ce qu'elle est : aussi bien par les discussions que j'ai eues la chance d'avoir avec eux, leurs suggestions ou contributions.

Toutefois, que ce soit d'un point de vue personnel ou professionnel, les personnes qui m'ont aidée lors de mes études sont si nombreuses que je ne pourrais toutes les citer.

INTRODUCTION GENERALE

L'objectif de ce travail de thèse est d'analyser les résultats issus de la modélisation numérique du problème de deux couches d'un même fluide supercritique en configuration thermiquement instable.

Les fluides supercritiques font l'objet, depuis près d'un siècle, de plusieurs études dans des domaines très variés. En effet pour des températures et des pressions supérieures à celles du point critique, les notions de liquide et de gaz deviennent indissociables : le fluide supercritique devient aussi dense que le liquide tout en conservant certaines propriétés des gaz. Ce caractère intermédiaire des fluides supercritiques, s'il constitue parfois un avantage technique (croissance cristalline, fabrication de poudres fines, dépôts de films fins, extraction d'un polluant...), engendre en contrepartie un comportement hydrodynamique très complexe et souvent paradoxal.

Quand on s'approche du point critique, la diffusivité thermique tend vers zéro, et donc on s'attend à un temps très grand pour avoir une homogénéisation de la température du fluide. Or, c'est l'inverse qui a été observé par des expériences effectuées en microgravité, et qui montrent qu'en absence de la convection associée à la sédimentation, le transfert de chaleur est très rapide en s'approchant du point critique. Cet effet inattendu définit un mécanisme spécifique de transport qui pourrait être différencié des transports de chaleur classique comme la conduction, la convection ou le rayonnement. Il s'agit de l'Effet Piston ou convection thermoacoustique [Zap90, Onu90, Bou90] dû au chauffage adiabatique du fluide par l'expansion des couches limites thermiques hypercompressibles (la compressibilité isotherme tend vers l'infini au point critique). Cette introduction aux fluides supercritiques fait l'objet du *Chapitre 1*.

Dans cette étude, nous avons considéré le problème des instabilités thermoconvectives dans les fluides supercritiques, particulièrement le problème lié à l'instabilité de type Rayleigh-Taylor et qui sera décrit dans le *Chapitre 2*. Le problème des instabilités de Rayleigh-Bénard dans les fluides supercritiques a été étudié de façon très intensive [Mey02, Chi01, Car99, Ami01, Acc05].

Un des résultats marquants de ces études (et qui nous intéresse particulièrement dans l'étude considérée ici), est le fait que la couche supérieure isotherme donne lieu à une instabilité qualifiée d'effet piston froid à cause de l'existence d'une couche limite de contraction analogue à la couche limite de dilatation de la paroi inférieure. Ceci donne naissance à des gouttes « froides » qui tombent sous l'effet de la gravité. Comme ce mécanisme s'apparente à une instabilité de Rayleigh-Taylor dans le cas des fluides miscibles, nous avons considéré l'étude de la stabilité de deux couches d'un même fluide supercritique.

Les équations de Navier-Stokes couplées à celles de l'énergie et de l'état (décrites dans le *Chapitre 3*) régissant dans de tels systèmes (fluide hypercompressible et diffusant très peu la chaleur) nécessitent une méthode numérique avec des algorithmes robustes, efficaces et relativement précis (décrits dans le *Chapitre 4*). Nous avons fait le choix de la méthode des volumes finis puisque cette méthode est une méthode intégrale (formulation variationnelle) afin de discrétiser et de résoudre les différentes équations avec un algorithme classique de couplage vitesse pression SIMPLER [Pat80]. Nous avons initialement adopté la méthode de filtrage acoustique (valable à une vitesse d'écoulement très faible par rapport à la vitesse du son : approximation à faible nombre de Mach) afin de réduire les coûts de calcul en augmentant le pas de temps puisque l'échelle de temps la plus petite correspond à l'échelle acoustique (de l'ordre 10^{-5} s dans le cas de l'Hélium3 et pour les proximités du point critique que l'on a considéré).

L'influence de l'épaisseur de la couche inférieure sur la stabilité a été particulièrement étudiée et analysée dans le *Chapitre 5*. Les échelles spatiales des microgouttes formées par cette instabilité sont en fait faibles. Il apparaît donc que le processus d'homogénéisation d'un fluide critique au sol puisse comporter une phase de micromélange pendant laquelle se forment les microgouttes qui s'homogénéisent ensuite sur une échelle de temps qui est beaucoup plus courte que le temps de diffusion rapporté à la dimension typique de la cavité. Cette première partie des résultats a utilisé la méthode de filtrage acoustique.

Il s'est avéré que ce filtrage n'était pas nécessaire puisque la méthode des volumes finis est naturellement filtrante (forme intégrale des équations). Dans la suite des calculs (*Chapitre 6*), nous avons étudié l'effet de la stratification sur la stabilité de notre configuration type Rayleigh-Taylor et nous avons résolu les équations adimensionnelles sans filtrage acoustique.

En fait, l'effet de la gravité devient aussi de plus en plus important à l'approche du point critique à cause de la très forte compressibilité de tels fluides et qui permet l'effondrement d'un tel système considéré sous son propre poids (statique) alors que la divergence du nombre de Rayleigh rend le système très instable aux petites perturbations de température (dynamique). C'est le problème de la stratification qui reste d'ordre 1 jusqu'à une certaine proximité du point critique, mais en s'approchant du point critique elle devient de plus en plus importante.

Des variations de densité d'ordre de 10% dans une cellule de l'ordre de 1cm de hauteur ont été observées à une proximité donnée du point critique [Mol79]. Ce qui se produit pour l'atmosphère à l'échelle du kilomètre devient donc sensible à l'échelle du laboratoire pour les fluides proches de leur point critique, et ce problème s'amplifie avec la proximité du point critique. En fait, il existe deux effets antagonistes : on devient de plus en plus instable lorsque l'on s'approche du point critique puisque le nombre de Rayleigh diverge et par ailleurs, on stabilise de plus en plus la configuration de type Rayleigh-Taylor puisque l'effet de stratification augmente de plus en plus à l'approche du point critique et c'est ce qui va être présenté en détail dans le *Chapitre 6*.

CHAPITRE 1 : Introduction aux fluides supercritiques

L'objectif de ce *Chapitre* est de donner une brève présentation des fluides supercritiques, des différentes représentations thermodynamiques de l'état supercritique, quelques principaux comportements dynamiques particuliers qu'un fluide supercritique est susceptible de présenter, ainsi que quelques méthodes classiques pour calculer les propriétés de ces fluides, afin de familiariser le lecteur avec la notion des phénomènes critiques.

1.1 Propriétés des fluides supercritiques

Un corps pur, est un système constitué d'une seule espèce chimique, qui peut exister en équilibre thermodynamique, dans des états physiques différents : gazeux, liquide, solide ; on dit aussi sous différentes phases, lesquelles sont des parties homogènes qui ont même propriétés physiques et chimiques, ses états d'équilibre étant définis par la donnée de deux variables d'état. Les plus naturelles de ces variables sont par exemple la pression et la température, ou la pression et la densité (au sens de la masse volumique), on peut aussi choisir n'importe quel couple incluant des fonctions d'état telles que l'énergie interne ou l'entropie.

La distinction entre ces différents états physiques se fait facilement, mais on peut se trouver dans des situations plus difficiles pour distinguer entre un liquide et un gaz ; c'est lorsque le composé pur est sous pression et que le ménisque habituel séparant le liquide de la phase gazeuse est non visuel. C'est une réelle continuité entre ces deux phases, et qui représente un état de fluide appelé *fluide supercritique*. Ce résultat a été trouvé depuis 1822 par le Baron Cagniard de la tour [Cag22], qui avait observé, qu'en chauffant de l'éther, de l'alcool ou de l'eau dans des tubes fermés (volume constant), un accroissement de quantité de liquide se produisait tout d'abord, suivi à plus haute température d'une disparition graduelle et totale de tout le liquide et le gaz, remplacés par une unique phase homogène. Il étudiait entre autre l'influence des températures sur la vaporisation des liquides et il déterminait le point critique de l'éther, de l'alcool et de l'eau.

Faraday et Gibbs ont aussi remarqué dans les résultats de leurs expériences le signe d'une réelle continuité entre les états liquides et gazeux. Ce n'est qu'avec les travaux d'Andrews [And69] et puis la thèse de van der Waals en 1873 [Van73] qu'une première formalisation théorique de ce phénomène fût obtenue.

Pour bien comprendre comment cette continuité se manifeste, il suffit de tracer la surface d'états d'un corps pur en fonction des trois variables thermodynamiques : pression, volume et température (P, V, T) (Figure 1.1).

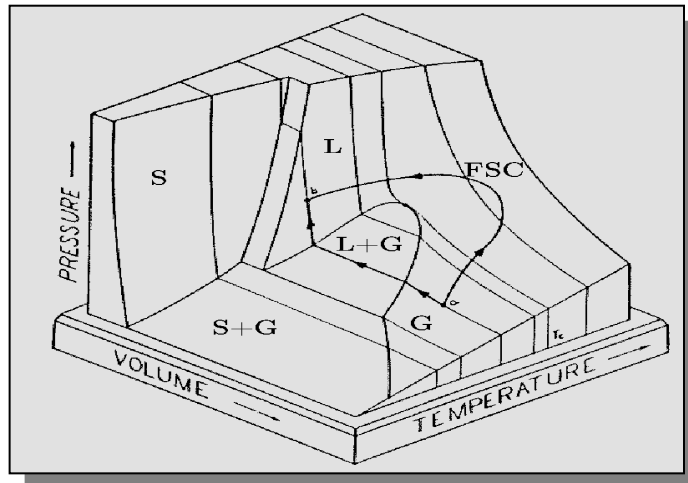


Figure 1.1: Surface d'états d'un corps pur

S = phase Solide **G** = phase Gazeuse **L** = phase Liquide **FSC** = Fluide Supercritique

La projection de ce diagramme sur les plans (pression P et température T) (Figure 1.2), donne le classique diagramme de phases dans lequel on sépare trois zones correspondantes aux trois phases usuelles de la matière : Solide, Liquide et Gazeuse, séparées les unes des autres par des *Courbes de Coexistence*.

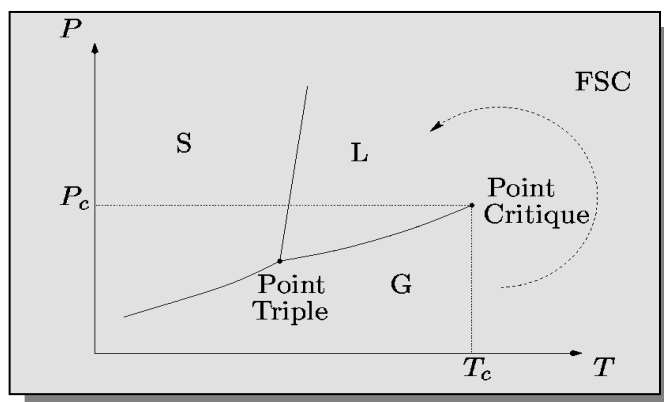


Figure 1.2 : Diagramme P, T d'un corps pur

1.2 Le point critique et stabilité thermodynamique

La courbe de coexistence Liquide-Vapeur se termine par un maximum et donc les phases liquides et gaz ne sont pas totalement disjointes, mais on peut au contraire passer continûment de l'un à l'autre sans traverser la ligne de transition de phase en passant par la phase intermédiaire nommée phase *supercritique* (Figure 1.3). Le sommet de la courbe de vaporisation a été nommé par Andrew [And69] « *Point Critique* » en raison de son caractère singulier (voir plus loin). Ce point est repéré par les coordonnées notées P_c , ρ_c , T_c qui sont respectivement, la pression, la densité et la température critiques de ce corps. Ce point critique est défini comme un point où on perd la stabilité mécanique. On peut interpréter cette instabilité d'après la Figure 1.3 par :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T (T_c, P_c) = 0 \quad (\text{Compressibilité infinie}) \quad (1.1)$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_T (T_c, P_c) = 0 \quad (\text{Point d'inflexion sur l'isotherme critique}) \quad (1.2)$$

$$\left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3}\right)_T (T_c, P_c) > 0 \quad (\text{Stabilité le long de l'isotherme critique de part et d'autre du point critique}) \quad (1.3)$$

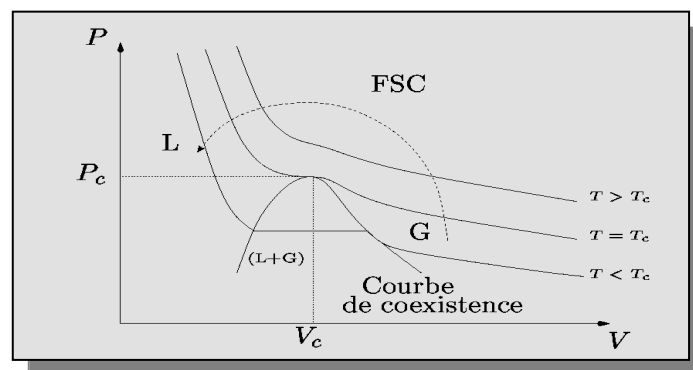


Figure 1.3 : Diagramme P, V d'un corps pur.

Les fluides supercritiques peuvent être décrits comme des fluides ayant une pression et une température supérieure à celles du point critique (**PC**). En raison de leur caractère intermédiaire entre les liquides et les gaz, ils possèdent des propriétés parfois paradoxales, qui tantôt rappellent celles des gaz de par leur compressibilité et tantôt celles des liquides de par leur densité.

Pour avoir une idée des coordonnées critiques de ces fluides, on cite dans le tableau ci-dessous celles de quelques corps.

Corps	T_c (K)	P_c (MPa)	ρ_c (Kg.m ⁻³)
Eau	647.1	22.06	322.2
Dioxyde de carbone	304.14	7.378	467.8
Oxygène	154.58	5.043	436.2
Azote	126.24	3.398	313.9
Ammoniac	405.4	11.1	235
Hélium ³	3.316	0.114	41.45

Tableau 1.1 : Coordonnées du point critique de quelques corps [Gar92].

Contrairement à la courbe de coexistence Liquide-Vapeur, la courbe de coexistence Liquide-Solide est probablement infinie. Personne n'a en fait jamais pu identifier de point critique sur cette courbe, et de nombreux auteurs pensent actuellement que les liquides et les solides ont des propriétés de symétrie trop profondément différentes pour permettre l'existence d'un point critique Liquide-Solide. Il n'y'a donc pas continuité des états liquides et solides, alors que c'est le cas pour les états liquide et gaz. L'existence d'un tel point marque la naissance d'un nouvel état (ou plus exactement la fin de la différenciation de deux états de corps pur suggère intuitivement une modification abrupte et profonde des caractéristiques du corps en question). Par exemple, sur la *Figure 1.3*, les isothermes tendent à s'aplatir localement au voisinage du point critique ($T=T_c$) avec $(\partial P/\partial V)_T$ qui tend vers zéro quand on s'approche du point critique. Cette propriété est associée au fait que la stabilité mécanique d'un fluide pur est caractérisée par la concavité de son énergie libre F ($F=U-TS$, U désigne l'énergie interne et S l'entropie) en fonction du volume.

La condition de stabilité s'écrit alors :

$$\left(\partial^2 F/\partial V^2\right)_T = -(\partial P/\partial V)_T > 0 \quad (1.4)$$

La valeur asymptotiquement nulle de $(\partial P/\partial V)_T$ au point critique correspond donc à une perte de stabilité mécanique du fluide monophasique. Au dessous du point critique, le corps pur se sépare en deux phases distinctes qui retrouvent individuellement l'équilibre mécanique, et vu l'égalité de leur potentiel chimique, la stabilité thermodynamique est vérifiée.

En fait, pour qu'un fluide mono-constituant reste thermiquement et mécaniquement stable, il faut que sa compressibilité isotherme :

$$\chi_T = -1/V (\partial V/\partial P) = (V(\partial^2 F/\partial V^2))^{-1} \quad (1.5)$$

soit positive, c'est à dire qu'un accroissement de pression entraîne une diminution de volume.

Dans la même perspective, dire que la dérivée seconde de l'énergie libre par rapport au volume devient nulle au point critique (équation (1.4)) revient à dire que la compressibilité du fluide y est infinie, ce qui correspond à des fluctuations locales de la densité très rapides lorsqu'une variation isotherme de la pression est effectuée. Quand la grandeur caractéristique de ces fluctuations locales de la masse volumique atteint la longueur d'onde de la lumière d'observation, cela induit un phénomène d'*opalescence* au point critique (voir *Figure 1.4*).

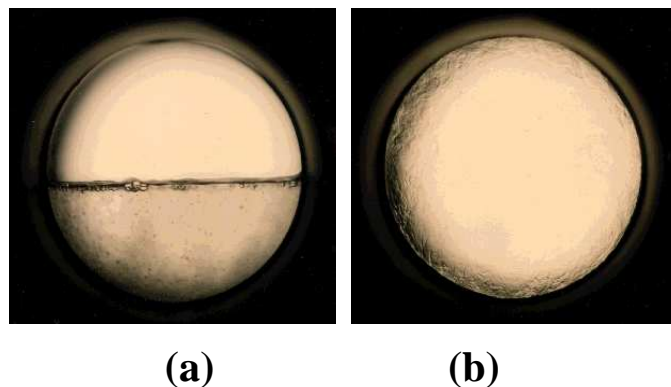


Figure 1.4 : (a) les 2 phases (liquide et gaz) clairement apparentes (ménisque) pour le CO₂. (b) avec un accroissement de température, lorsque la température et la pression critiques sont atteintes, les phases (liquide et gaz) ne sont plus visibles, la phase supercritique apparaît (Laboratoire LCSG, Université de Leeds).

Après cette brève présentation du point critique, on peut se contenter à définir ce point comme un point singulier, dont quelques propriétés du fluide présentent des comportements asymptotiques divergents ou évanescents.

1.3 Les phénomènes critiques

Comme on vient de le voir, un fluide proche de son point critique a une compressibilité isotherme qui tend vers l'infini. D'autres propriétés ont aussi le comportement singulier. Parmi ces quantités, on peut citer la capacité calorifique à pression constante C_p (voir relation de Mayer généralisée, §1.3.1), la capacité calorifique à volume constant C_v , la conductivité thermique λ ou la longueur de corrélation ζ qui mesure l'extension spatiale des fluctuations de densité. En revanche, la diffusivité thermique κ ou la célérité du son C tendent vers zéro (voir §1.3.1).

La tension de surface (dans le domaine diphasique) tend aussi vers zéro, ce qui peut se traduire par la grande similitude des phases liquide et gaz à l'approche du point critique. Le comportement particulier des propriétés thermodynamiques et des propriétés de transport au voisinage du point critique constitue une classe de phénomènes que l'on nomme *Phénomènes Critiques* ; ils constituent les différents mécanismes par lesquels le fluide supercritique se prépare à la transition de phase à l'approche du point critique.

1.3.1 Exposants critiques [Sta71]

Les phénomènes critiques reposent en grande partie sur la notion d'Exposants Critiques, et de lois d'Echelles. On caractérise la divergence des paramètres de transport en donnant cinq informations : le paramètre considéré (\mathbf{X}), un chemin particulier sur la surface d'état pour approcher le point critique (C), une variable caractérisant la proximité au point critique (\mathbf{r}), une amplitude nommée amplitude critique (\mathbf{A}) et un exposant de divergence critique (\mathbf{e}). La singularité en question est alors exprimée, pour une valeur de \mathbf{X}_c finie (l'indice c indique une valeur prise au point critique), sous la forme de la loi asymptotique suivante:

$$\left| \frac{\mathbf{X} - \mathbf{X}_c}{\mathbf{X}_c} \right| = \mathbf{A} \left| \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_c}{\mathbf{r}_c} \right|^{\pm \mathbf{e}}$$

La vitesse de convergence ou de divergence dépend de la façon dont on s'approche du point critique, il est donc très important d'avoir une précision sur le chemin C .

Des études expérimentales ont mené à une caractérisation empirique assez précise des amplitudes et exposants critiques pour les divers paramètres qui divergent au point critique et pour les divers chemins qui s'en approchent. C'est la différence entre la valeur des exposants trouvée expérimentalement et celle prévue par l'analyse dimensionnelle qui a conduit les physiciens dès les années 1930 à réaliser qu'il se cachait quelque chose de fondamental derrière cette discordance. Ce n'est que dans les années 70 avec l'application aux phénomènes critiques de la théorie des Groupe de Renormalisation [Sen78] (c'est une théorie qui a été développée en 1957 par K.G.Wilson), qu'un argument théorique a pu en fixer les valeurs. Il a été ainsi démontré que tous les fluides possédaient les mêmes exposants au point critique liquide-vapeur et en particulier que seuls deux de ces exposants étaient indépendants, la vitesse de n'importe quel paramètre sur n'importe quel chemin pouvant être déduite de ces deux-là seulement. De plus il a été prouvé que la donnée de seulement deux amplitudes propres au fluide suffisait à caractériser totalement son comportement critique. Cette réduction de la spécificité du fluide à seulement deux amplitudes critiques est désignée sous le nom d'*Universalité Critique*, cette universalité de comportement s'étend même au-delà des systèmes fluides.

La théorie des Groupes de Renormalisation prévoit que les comportements du système au voisinage du point critique sont identiques pour une même *Classe d'Universalité*, c'est à dire qu'on peut regrouper les différents systèmes physiques représentant des transitions de phase les plus variées, en un petit nombre de groupes nommé *Classe d'Universalité*, caractérisé par un certain ensemble de valeurs d'exposants. On définit les *Lois d'Echelle* comme des relations entre les exposants critiques. Cette loi présente un caractère d'universalité encore plus grand.

Les valeurs actuellement admises des exposants critiques universels sont présentées dans le *Tableau 1.2*. La divergence critique d'une propriété est définie selon un chemin thermodynamique spécifié. Si une quantité diverge pour un chemin donné, elle garde ce critère de divergence pour tout autre chemin ; et la correspondance entre un exposant d'une divergence le long de l'isochore critique (χ_T, C_v, ξ) et l'exposant de la même divergence le long d'un autre chemin (isotherme critique ou la courbe de coexistence par exemple), peut être déterminée facilement [Sen78]. Par contre quand le chemin est plus complexe, il faut

connaître une équation d'état qui représente une des grandes difficultés de l'étude des fluides au voisinage de leur point critique.

Propriétés	Chemin thermodynamique	Expression de la propriété	Exposant critique
Compressibilité isotherme	Isochore critique	$\kappa_T = \Gamma \varepsilon ^{-\gamma}$	$\gamma = 1.239 \pm 0.002$
Capacité calorifique à volume constant	Isochore critique	$C_v = A \varepsilon ^{-\alpha}$	$\alpha = 0.110 \pm 0.003$
Ecart des densités du liquide et du gaz	Courbe de coexistence	$\rho_l - \rho_g = 2B \varepsilon ^\beta$	$\beta = 0.320 \pm 0.002$
Fonction de corrélation	Point critique	$h(r) = r^{2-d-\eta}$	$\eta = 0.031 \pm 0.004$
Longueur de corrélation	Isochore critique	$\xi = \xi_0 \varepsilon ^{-\nu}$	$\nu = 0.630 \pm 0.001$
Ecart à la pression critique	Isotherme critique	$ \Delta P = D \Delta\rho ^\delta$	$\delta = 4.8 \pm 0.02$

Tableau. 1.2 -Propriétés au voisinage du (PC) avec les exposants associés [Sen78]. Γ , A , B , ξ_0 et D sont les cofacteurs caractérisant la substance étudiée, $h(r)$ est la fonction de corrélation qui mesure la corrélation statique entre la densité en un point et la densité à une distance r de ce point. On note $\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c}$.

On peut déduire aussi du tableau d'autres comportements asymptotiques, par exemple si on considère la relation de Mayer généralisée [Cal60] :

$$C_p - C_v = -\frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T$$

Comme C_v diverge avec un exposant plus faible ($\alpha \approx 0.11$), et que $\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho$ est pratiquement constant à l'approche du point critique [Beh76], C_p diverge comme la compressibilité isotherme avec un exposant ($\gamma \approx 1,24$).

Pour la célérité du son, elle s'écrit sous la forme suivante [Lan89] :

$$C^2 = \frac{T_c}{\rho_c^2 C_v} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T$$

Elle tend vers zéro au point critique comme $\frac{1}{\sqrt{C_v}}$, avec un exposant égal à $\alpha/2 \cong 0.05$.

La valeur quadratique moyenne des fluctuations de densité augmente très rapidement au voisinage du point critique, ce qui explique l'importante corrélation entre deux positions de deux particules différentes. La longueur de corrélation ξ diverge donc d'une façon significative au voisinage du point critique [Sta71] :

$$\overline{[\rho(r) - \bar{\rho}]^2} \approx (\partial\rho/\partial P)_T \rightarrow \infty$$

Autrement dit, les particules fortement éloignées les unes des autres doivent être fortement corrélées pour provoquer un changement de densité d'une façon importante.

La viscosité de cisaillement $\mu_s \approx \mu_0 \Delta T^{-\eta}$ et la conductivité thermique $\lambda = \lambda_0 \Delta T^{-(\gamma-\nu-\eta)}$ ($\gamma - \nu - \eta > 0$) divergent toutes les deux au point critique, et cela peut être expliqué à l'aide des arguments issus de la thermodynamique et de la physique statique [Sen78].

Pour la viscosité du volume, certains auteurs prédisent sa divergence [Kad68, Kaw70], mais d'autres [Car98] montrent que celle-ci n'a d'influence pratique sur le comportement du fluide qu'à des proximités extrêmes du point critique. La diffusivité thermique $\kappa = \lambda/\rho C_p$ tend vers zéro au voisinage du point critique, car C_p diverge plus vite que la conductivité thermique λ , ce qui fait que la relaxation de la température par diffusion thermique est extrêmement lente dans les fluides supercritiques.

1.3.2 Les modèles classiques

Le modèle de van der Waals, basé sur une équation d'état très connue [Van73], est le premier modèle qui a permis une description qualitative de l'équilibre des phases liquide-gaz et du comportement des fluides proche du point critique. Celui-ci s'avère être un bon outil pour l'interprétation des divergences critiques. C'est un cas particulier d'une classe de modèles plus vaste appelés *Les Modèles classiques* ou *les Modèles de Champ Moyen* et sont caractérisés par le fait que leur fonction thermodynamique et leur équation d'état sont des fonctions analytiques au point critique et développables en série de Taylor [Kre93]. Leur nom « Champ Moyen » provient de la propriété commune de ces modèles et qui se base sur le fait que les interactions moléculaires n'agissent sur une molécule donnée que sous la forme d'un Champ Moyen, indépendant de la position de la molécule vis-à-vis de ses voisines. Cela était démontré par la physique statistique. Cette propriété ne permet pas de prendre en

considération la répartition spatiale des molécules dans l'analyse des interactions moléculaires. Cette simplification abusive peut expliquer l'insuccès de ces modèles.

On considère une équation d'état d'un fluide, écrite sous la forme générale $P = f(T, \rho)$. Comme on vient de le préciser, l'hypothèse de champ moyen est associée au caractère analytique de la fonction f au point critique. On peut donc écrire, pour de petits écarts de température $\delta T = T - T_c$ et de densité $\delta \rho = \rho - \rho_c$:

$$\begin{aligned} P = P_c &+ \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^c \delta T + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T^c \delta \rho \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_\rho^c \delta T^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T \partial \rho} \right)^c \delta T \delta \rho + \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2} \right)_T^c \delta \rho^2 \right\} \\ &+ \frac{1}{6} \left\{ \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^3} \right)_\rho^c \delta T^3 + 3 \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^2 \partial \rho} \right)^c \delta T^2 \delta \rho + 3 \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T \partial \rho^2} \right)^c \delta T \delta \rho^2 + \left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3} \right)_T^c \delta \rho^3 \right\} + \dots \end{aligned}$$

L'indice supérieur c indique des quantités prises au point critique.

Si on se base sur les conditions critiques [équations (1.1)-(1.2)-(1.3)] le développement ci-dessus de la pression P devient :

$$\begin{aligned} P \cong P_c &+ \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^c \delta T + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_\rho^c \delta T^2 + \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T \partial \rho} \right)^c \delta T \delta \rho + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^3} \right)_\rho^c \delta T^3 \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^2 \partial \rho} \right)^c \delta T^2 \delta \rho + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T \partial \rho^2} \right)^c \delta T \delta \rho^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3} \right)_T^c \delta \rho^3 + \dots \end{aligned} \quad (1.6)$$

Par exemple pour déterminer l'écart à la pression critique, c'est-à-dire l'exposant δ qui relie ΔP à $\Delta \rho$, il suffit d'imposer $\delta T = 0$, et l'on obtient :

$$\delta P = \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3} \right)_T^c \delta \rho^3 + \dots, \quad \text{d'où l'exposant classique } \delta = 3$$

On remarque que cette valeur trouvée de δ est d'une part indépendante de la nature particulière de la fonction $P = f(T, \rho)$ donc de l'équation d'état; et d'autre part, elle est éloignée de la valeur expérimentale $\delta = 4.80$ (voir *Tableau 1.2*). De la même manière, on peut chercher à déterminer l'exposant γ de divergence de la compressibilité isotherme

$\left(\chi_T = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T\right)$ le long de l'isochore critique, si on dérive l'équation (1.6) membre à membre par rapport à ρ et on impose $\delta\rho = 0$, on a alors :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T \partial \rho}\right)^c \delta T + \dots \quad \text{d'où} \quad \gamma = 1$$

D'une façon similaire on peut généraliser et déterminer les autres exposants critiques. On présente dans le *Tableau 1.3* la différence entre les exposants réels et les exposants prédits par les modèles classiques. Cette différence a été très tôt reconnue comme un échec des théories classiques à décrire correctement les phénomènes critiques. L'exposant classique ν ne peut pas être déduit de considérations purement thermodynamiques comme celles développées ci-dessus, mais provient d'une analyse de physique statistique.

Exposants Classiques	Exposants Réels
$\gamma = 1$	$\gamma = 1.239 \pm 0.002$
$\alpha = 0$	$\alpha = 0.110 \pm 0.003$
$\beta = 1/2$	$\beta = 0.326 \pm 0.002$
$\delta = 3$	$\delta = 4.80 \pm 0.02$
$\nu = 1/2$	$\nu = 0.630 \pm 0.01$

Tableau 1.3 : Comparaison des exposants critiques classiques et réels [Sen78].

1.3.3 L'influence de la gravité et les anomalies de transport de la chaleur

1.3.3.1 Effet de la gravité

Comme on vient de le voir dans les paragraphes précédents, les fluides supercritiques ont un comportement étrange car à la fois aussi denses que des liquides et compressibles comme les gaz. L'association de ces deux propriétés est à l'origine de nombreux problèmes expérimentaux liés à la gravité.

Un fluide compressible se stratifie, sous l'effet de gravité, en couches de différentes densités, comme l'atmosphère et les océans sur de grandes échelles. En présence de gravité

Zappoli *et al.* [Zap96] ont montré qu'en configuration chauffée par le côté, cet effet était toujours responsable au sol de l'homogénéisation très rapide de la température, conduisant à l'existence d'un mouvement convectif intense et quasi-isotherme.

Un fluide supercritique devient donc instable pour de très faibles variations de pression ou de température, sous l'effet de la gravité. Les mécanismes de transport de masse et de la chaleur à grande échelle (échelle de la cellule par exemple) s'effectuent via les instabilités convectives, masquant ainsi les autres mécanismes de transport possibles. La gravité joue donc un rôle primordial dans l'accélération de ces instabilités, qui permettent d'homogénéiser rapidement le système critique après un changement de température imposé de l'extérieur.

En situation de gravité réduite, le transport de chaleur via les instabilités convectives ne s'effectue plus, on doit s'attendre alors à de sévères difficultés d'homogénéisation des systèmes critiques puisque les effets de diffusion thermique sont quasi-inexistants.

1.3.3.2 Transfert de chaleur

La divergence de la conductivité thermique nous laisse croire qu'un fluide proche de son point critique conduit de mieux en mieux la chaleur, ce qui n'est pas le cas. En fait, la relaxation de la température dépend de la diffusivité thermique ($\lambda / \rho C_p$) qui tend vers zéro au point critique liquide-vapeur. Le temps de relaxation τ tend vers l'infini, on s'attend donc à ce que le transport de chaleur se fasse très lentement.

Ce phénomène désigné sous le nom de *Ralentissement Critique* (« Critical Slowing Down »), a poussé vers le développement des expériences spatiales visant à mesurer certains paramètres avec une plus grande précision, en l'absence de l'effet de gravité, afin de supprimer tout effet dû à la convection.

Les résultats expérimentaux ([Nit87], [Dah72]) dans l'espace ont ouvert la porte à un autre point de vue sur le transfert de chaleur (par effet piston) dans un fluide près de son point critique, puisqu'ils semblent être en désaccord avec l'hypothèse de ralentissement critique.

1.4 Effet piston

Les expériences sur les fluides purs critiques en microgravité sont donc le seul moyen pour l'étude complète de tous les aspects des phénomènes hors équilibre.

En 1990, après les confirmations expérimentales en microgravité [Nit87], trois équipes différentes indépendantes [Zap90], [Bou90] et [Onu90] donnent l'explication de ce phénomène. Onuki *et al.* [Onu90] y relève que l'équation de transfert de la chaleur ($\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} = \kappa \nabla^2 \mathbf{T}$) qui est pertinente pour un fluide incompressible, non enfermé mais maintenu à pression critique, ne l'est plus quand il s'agit d'un fluide compressible maintenu dans un volume fixé. Dans ce dernier cas, un changement d'entropie en n'importe quel endroit dans le volume de fluide provoque un changement de pression qui est à son tour engendre un changement adiabatique de température dans tout le volume. Il souligne que ce phénomène a déjà été décrit dans la littérature, mais comme il est négligeable pour un fluide à compressibilité usuelle, il a malheureusement aussi été négligé dans l'étude des fluides proches de leur point critique.

Dans un fluide incompressible, les variations d'énergie interne sont dues uniquement à des variations de température qui découlent du flux de chaleur imposé au fluide, alors que pour un fluide compressible, on doit tenir compte des variations adiabatiques de température et de densité dues aux variations de pression dans le temps [Bou90]. Les effets adiabatiques sont dominants dans un fluide proche de son point critique, vu que sa compressibilité diverge.

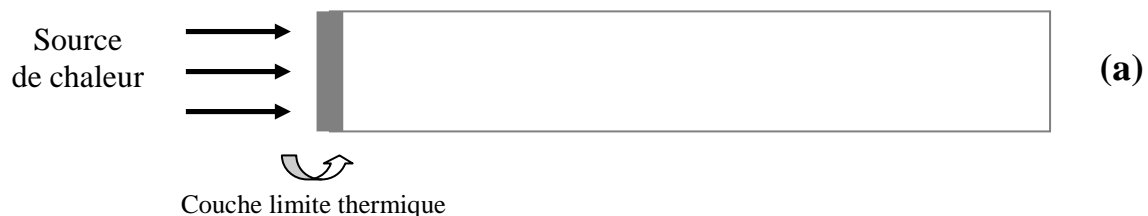
Un nouveau mécanisme de transfert de la chaleur a été mis en évidence au sein des fluides supercritiques. Lorsqu'on soumet une cellule remplie de fluide critique à un chauffage local, seule la couche diffusive de fluide au voisinage de la paroi subira (par le seul transport diffusif) une augmentation de température. Cette couche peut se dilater d'autant plus facilement que le reste du volume de fluide est plus compressible. Elle agit comme un piston, provoquant une variation de pression qui se propage dans le fluide. La variation de pression est à son tour convertie en variation de température. Le reste du volume de fluide s'échauffe donc très rapidement et de manière homogène. Le processus impliqué est désigné sous le nom d'*Effet Piston* [Zap90] et est directement lié à l'hyper-compressibilité et à la très faible diffusivité thermique des fluides proches de leur point critique.

L'équipe française [Zap90] s'est basée essentiellement sur les méthodes de perturbation singulières appliquées aux équations de Navier-Stokes pour un fluide de van der

Waals. Ils ont expliqué le mécanisme de l'Effet Piston de la façon suivante : lorsqu'on chauffe une paroi, la chaleur diffuse depuis sa source sur une faible épaisseur, le fluide soumis à cet échauffement se dilate fortement et comprime de façon isentropique le reste du fluide, qui subit alors une augmentation homogène de sa température. En fait le fluide dilaté contenu dans la couche limite agit comme un piston, entraînant la création d'un système d'ondes de compression qui se propagent dans tout le fluide; et la réponse première du système à une perturbation d'ordre thermique sur une faible épaisseur est donc mécanique. Le passage répétitif du champ acoustique continuellement produit, engendre l'apparition d'une vitesse faible du volume de fluide ainsi qu'une compression totale de tout le volume.

L'effet piston est alors le résultat d'un couplage thermomécanique, son développement dans une cellule confinée d'un fluide supercritique peut être expliqué suivant les schémas suivants :

-En microgravité, un fluide supercritique confiné dans une cellule est chauffé à l'une de ces extrémités, la chaleur amenée à l'extrémité diffuse dans une couche limite thermique de faible épaisseur, dans laquelle de très forts gradients de température apparaissent (*Figure 1.5.a*).



- La grande compressibilité du fluide provoquant la dilatation de la couche chaude, comprime d'une manière adiabatique le reste du fluide (*Figure 1.5.b*).



- La dilatation de la couche chaude agit comme un piston sur le reste du fluide d'où le nom de l'effet piston. On assiste à une augmentation rapide et homogène de la température dans toute la cellule (*Figure 1.5.c*).



Le va et vient de l'onde acoustique générée

Figure 1.5 : Représentation schématique du mécanisme de l'Effet Piston (Le niveau de gris symbolise la température).

En conclusion, par un mécanisme purement dynamique, un fluide qui diffuse très mal la chaleur peut néanmoins transporter de l'énergie thermique à très grande vitesse. La relaxation de la température est donc de plus en plus rapide dans une cellule parfaitement isobare, lorsque l'on s'approche du point critique. Ce phénomène qui contraste avec le *Ralentissement Critique* de la diffusion est nommé l'*Accélération Critique* (« Critical Speeding Up »).

Un gradient de température résorbé dans la cellule, entraîne des gradients de densité, qui vont à leur tour être résorbés mais cette fois sur une échelle de temps plus longue qui est de l'ordre du temps de diffusion (ou de convection si elle est présente).

Le transport de chaleur a donc lieu sur l'échelle de l'Effet Piston (**EP**), mais il faut attendre un temps de l'ordre du temps de diffusion pour que le fluide redevienne homogène et à l'équilibre.

Les résultats des simulations numériques présentés dans [Zap96] ont ainsi permis d'informer l'hypothèse fautive selon laquelle l'EP disparaîtrait en présence de gravité. En effet, cette dernière étude montre que l'EP n'est pas inhibé par la convection naturelle, mais au contraire il demeure le mécanisme de relaxation de la température plus rapide que la convection. Néanmoins, une autre étude expérimentale menée sur terre [Bey92] a montré qu'une cellule de fluide critique non isolée ne subissait quasiment pas d'échauffement en comparaison de ce qui se produisait en microgravité, et l'analyse des processus intervenant dans cette configuration est présentée dans [Jou99].

1.5 Les fluides supercritiques dans le domaine industriel

Les applications industrielles des fluides supercritiques (FSC) ont commencé depuis les années 40. A partir des années 70, elles ont pris un vrai essor à l'échelle industrielle [Zos64] principalement dans les industries alimentaires.

Les FSC sont utilisés pour la confection de café décaféiné, de tabac sans nicotine, et d'alimentation pauvre en cholestérol. Ils constituent des solutions de remplacement avantageuses aux solvants industriels traditionnels, car les procédés à base des FSC consomment d'ordinaire beaucoup moins d'énergie que ceux qui utilisent des solvants organiques, et cela est dû au fait qu'avec les FSC on évite des températures élevées et les transitions de phases de la distillation et de la condensation. Les solvants organiques présentent des risques professionnels et environnementaux. Les meilleurs éléments d'entre eux sont hautement inflammables et toxiques, ce qui n'est pas le cas du dioxyde de carbone CO₂ supercritique largement utilisé dans l'industrie, car ce produit est métabolisé naturellement par des organismes vivants. Aucun risque donc de contamination dangereuse du lieu de travail ou de l'environnement, et aucun résidu toxique dans le produit fini. Le CO₂ supercritique se comporte bien à des températures qui préservent les composés biologiques sensibles à la chaleur, ce qui le rend particulièrement intéressant pour l'industrie agro-alimentaire, mais l'adoption de ces fluides sur une large échelle de la technologie se heurte à certains obstacles. On peut citer parmi ces obstacles, le coût initial élevé d'un équipement FSC, combiné à l'incapacité de prédire le comportement des substances ou préparations traitées aux FSC.

Afin de fixer correctement les conditions de fonctionnement d'un procédé, il convient de bien connaître le comportement du soluté dans la phase supercritique, l'évolution de la solubilité et de son état physique en fonction de la pression et de la température. Il faut aussi avoir une meilleure connaissance des phénomènes de transport au sein de ces fluides, ce qui permet d'avoir une meilleure optimisation de ces procédés, et de développer de nouvelles méthodes sur la base des connaissances théoriques, pour l'amélioration de la technologie FSC. C'est l'espoir de toute la communauté scientifique qui étudie ces fluides.

Les fluides supercritiques font d'excellents solvants, ils sont aussi utilisés dans l'industrie pour le nettoyage des pièces des machines et les textiles, pour décontaminer les sols, pour extraire et purifier de nombreux composés, ou encore dans le secteur des polymères et des cosmétiques. Leur intérêt et leur choix se basent sur une propriété de ces composés qui est le pouvoir de modifier leurs propriétés de façon continue sous l'action de la pression et/ou la température en contournant le point critique. Ceci permet de comprimer un gaz de faible densité en un liquide dense sans franchir la ligne d'équilibre liquide-gaz, donc sans qu'il y ait une discontinuité dans les propriétés physico-chimiques du milieu (*Figure 1.3*).

Cela supprime les inconvénients liés à l'existence d'une interface qui est particulièrement intéressant pour le séchage des structures microporeuses.

On peut citer d'autres grands travaux relatifs à la synthèse et l'élaboration des matériaux en milieux supercritiques qui est un développement récent comparé à d'autres applications comme dans l'extraction ou la séparation. Il faut rappeler que la première réaction de polymérisation en milieu supercritique a été découverte par le groupe ICI en 1933 [Sch93] par la formation d'une cire solide blanche qui est caractérisé par la suite comme du polyéthylène [Pes99]. Une grande partie de production de polyéthylène est synthétisée on ce moment par les procédés haute pression.

D'autre part, l'élaboration des matériaux à forte porosité est obligatoire pour leur intérêt dans différents domaines comme l'optique, l'isolation phonique et thermique,...etc. La technique sol-gel est la plus utilisée en ce moment, son principe est le suivant : les particules formées dans une solution s'agrègent particulièrement pour former des amas lacunaires : c'est la formation d'un sol, ces amas remplissent tout l'espace de la solution en poursuivant la réaction, et la solution prend en masse pour donner un gel qui représente un réseau tridimensionnel de particules dans les pores dans lesquelles est emprisonné le solvant. Typiquement, à ce stade, le matériau a une porosité d'environ 90% [Pes99]. Classiquement, une évaporation lente de la solution, produit aussi des tensions très importantes dues à l'interface liquide-gaz.

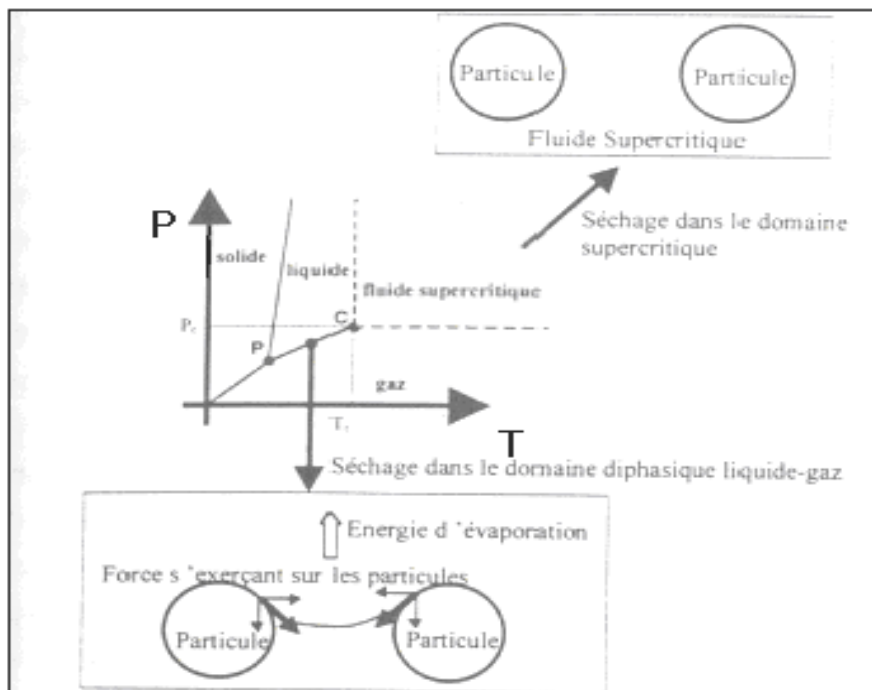


Figure 1.6 : Le séchage à l'air et le séchage avec (FSC) [Pes99].

Ce type de séchage conduit à l'apparition de fissures qui peuvent provoquer une destruction du matériau. Ce problème est évité lorsqu'on utilise un séchage au-dessus du point critique du solvant, (en contournant le point critique selon le chemin inverse de celui représenté sur la *Figure 1.3*, car les forces capillaires sont absentes avec ce type de séchage, ce qui est expliqué par l'absence de l'interface liquide-gaz, et les tensions interfaciales [Paj94], (*Figure 1.6*).

Pour l'élaboration des couches minces, les fluides supercritiques sont largement utilisés. Dans un procédé de préparation de couches minces par les fluides supercritiques, le précurseur est dissous en milieu fluide supercritique avant d'être déposé sous forme de film sur une surface dont la température permet la transformation chimique du précurseur.

Les méthodes classiques utilisées présentent de nombreux inconvénients. Parmi ces méthodes, on trouve la méthode CVD où les précurseurs volatils sont vaporisés sous pression réduite à des températures inférieures à leurs températures de décomposition, les vitesses de dépôt sont lentes. Le précurseur doit être volatil, et souvent on se heurte à sa toxicité élevée, ce qui n'est pas le cas pour les fluides supercritiques qui présentent moins de limitations puisqu'ils permettent l'utilisation de précurseurs non volatils, souvent peu toxiques et bon marché. Cela permet à la fois d'élargir considérablement la nature des dépôts et faire ainsi de nombreuses combinaisons pour obtenir soit des métaux, soit des semi-conducteurs, soit des matériaux diélectriques.

D'autres types d'applications pour l'élaboration des solides divisés en utilisant les fluides supercritiques existent, comme l'atomisation et la précipitation par anti-solvant.

Pour le procédé RESS (Rapid Expansion of Supercritical Solution), le principe est le suivant : on dissout le produit dans un fluide supercritique sous pression, la solution ainsi formée subit une dépressurisation dans une buse à basse température et pression, ce changement brutal des conditions provoque une cristallisation (précipitation) rapide du mélange. Le produit final est exempt de solvant résiduel et l'on obtient des particules de taille submicronique.

Le coût énergétique du procédé réside essentiellement dans la compression du mélange initial et dans le chauffage de la buse, et lorsque des jets de fort débit sont employés, il peut être nécessaire de compenser également le refroidissement dû à la détente du fluide par un chauffage de l'enceinte de détente [Sub99]. Un autre procédé GAS (Gaseous Anti

Solvant), qui a pour objectif la diminution du pouvoir solvant d'un liquide, en lui ajoutant un anti-solvant dans lequel le produit à précipiter n'est pas soluble. Cela permet d'exploiter le faible pouvoir solvant des fluides et notamment du dioxyde de carbone, vis à vis de composés tels que les polymères, les protéines, ou bon nombre de composés biologiques.

Dans le procédé par anti-solvant, les composés sont dissous ou mis en suspension dans un solvant organique liquide. Cette phase organique est ensuite mise en contact avec l'anti-solvant qui présente une faible affinité pour le composé mais est miscible avec le solvant organique. Le contact entre la solution organique et le fluide anti-solvant peut être réalisé soit par addition progressive du fluide dans un volume initial de solution (mode batch auquel se réfère l'appellation GAS) soit par pulvérisation de la solution liquide dans la phase continue fluide (mode appelé ASES pour Aérosol Solvant Extraction System).

Les deux mécanismes qui gouvernent la nucléation et la croissance des cristaux, dans le système soluté/phase organique/anti-solvant fluide, sont la diffusion de l'anti-solvant dans la phase organique et l'évaporation du solvant dans le fluide anti-solvant.

La diffusion de l'anti-solvant diminue la valeur de solubilité à saturation du composé, tandis que l'évaporation du solvant augmente sa concentration. La précipitation a lieu quand la concentration locale devient supérieure à la concentration à saturation. On obtiendra des cristaux de petites tailles et faiblement dispersés lorsque le soluté est consommé principalement par nucléation, c'est à dire dans le cas de solutions concentrées ou de flux anti-solvant/solvant important.

A coté des produits pharmaceutiques, le GAS a été appliqué à la mise en forme de polymères, de précurseurs de catalyse, de protéines ou d'explosifs.

L'avantage de l'utilisation des fluides supercritiques dans l'élaboration de solides divisés, est leur pouvoir d'agir plus rapidement sur le système en utilisant des variations de pression (surtout dans le sens de la dépressurisation) plutôt que de jouer sur la température, les transferts thermiques étant bien plus lents que la propagation d'une onde de pression. D'autres avantages de ces fluides, dans le cas de procédés en milieu supercritique, la séparation fluide/solide se fait par retour à la pression atmosphérique, pour laquelle le fluide est gazeux. Le séchage du solide obtenu, est réalisé simultanément à la cristallisation et conduit à un produit sans solvant résiduel.

Un aperçu global sur les problèmes de combustion (en général) en microgravité peut se trouver dans [Prud01]. Certaines situations rendues trop complexes par la présence de la gravité peuvent être reproduites dans des conditions idéales pour les problèmes tels que la

combustion de gouttes sphériques en atmosphère en repos à l'infini, la combustion de plaques ou le problème d'onde de déflagration.

Le comportement d'une poche fluide à l'état supercritique et plongée dans un environnement à haute température est étudié par d'Almeida & Prud'homme [Alm06]. Dans certains foyers de combustion, des gouttes liquides (de combustible ou de comburant) sont injectées dans une atmosphère très chaude et à pression supérieure à la pression critique du liquide. La température initiale de la goutte est inférieure à la température critique. Ces gouttes apparaissent donc comme des poches fluides en mouvement et en expansion sans interface de changement de phase (état supercritique). Cette situation est assez représentative des moteurs cryogéniques (fusée Ariane) ou des moteurs diesels.

La vaporisation et la combustion de ces gouttes à haute pression a été étudiée numériquement par P.Haldenwang *et al.* [Hal96] dans les conditions sous-critiques et supercritiques. Ils ont considéré une goutte isolée d'oxygène liquide (Lox) dans un environnement chaud et au repos rempli d'hydrogène. La goutte cryogénique chauffée par le gaz ambiant se vaporise pendant que sa température de surface augmente. Leur travail s'est principalement focalisé sur les conditions de température et pression ambiantes pour lesquelles l'interface disparaît durant l'évolution de la goutte, ce qui amènerait à dire que la surface de la goutte a effectivement atteint les conditions critiques.

Enfin, on pourrait aussi citer le stockage d'ergols dans les réservoirs des véhicules spatiaux. En effet, lors de l'utilisation de carburant, la chute de pression occasionnée par le pompage du carburant est généralement compensée par la repressurisation du réservoir à l'aide d'un gaz neutre (par exemple l'Hélium). En situation de microgravité, la localisation de l'interface gaz-ergol n'est pas déterminée, d'où l'idée de stockage d'ergol sous forme supercritique qui présente l'avantage d'un stockage monophasique à densité plus importante. L'évaporation d'une goutte sous petites perturbations acoustiques (instabilités hautes fréquences) a été étudiée dans les foyers de combustion de fusées [Pru04, Pru05]. Ils ont montré que la zone d'instabilité est plus grande pour une goutte de conductivité thermique finie et que, plus la fréquence de perturbation acoustique est grande, plus les évolutions thermiques internes à la goutte se produisent près de l'interface d'évaporation. Dans certains cas de ces combustions, les gouttes liquides (de combustible ou de comburant) sont injectées dans une atmosphère très chaude et à pression supérieure à la pression critique du liquide considéré. Ces gouttes apparaissent comme des poches fluides en mouvement et en expansion sans interface de changement de phase [Pré04].

1.6 Conclusion

Les fluides supercritiques sont donc à la fois denses et très compressibles, lorsqu'on s'approche du point critique. Ces fluides sont de plus en plus utilisés dans l'industrie et prisés grâce aux procédés moins coûteux et beaucoup plus propre que ceux utilisant des solvants et autres produits chimiques. Pour mieux comprendre ces fluides, il ne suffit pas de connaître leurs propriétés thermophysiques, mais il faut aussi connaître les réactions et le comportement exact de ces fluides soumis à un flux de chaleur ou à toute autre sollicitation, c'est l'objectif du *Chapitre* suivant.

CHAPITRE 2 : Quelques aspects sur les phénomènes d'instabilités

2.1 Instabilités d'interface

On considère deux fluides de densités différentes qui sont superposés dans un champ d'accélération constant, le fluide le plus dense est au-dessus du fluide le plus léger. Les fluides sont séparés par une interface qu'on perturbe artificiellement dans les analyses théorique et numérique. Le fluide le plus lourd pénètre peu à peu dans le fluide léger. Les défauts initiaux, c'est à dire l'écart à l'équilibre, s'amplifient. Cette instabilité est connue sous le nom d'instabilité de Rayleigh-Taylor où l'interface entre les deux couches est soumise à une accélération permanente. Cette instabilité suscite depuis longtemps de l'intérêt, elle tire son nom des travaux de Rayleigh en 1883 [Ray83], puis de Taylor en 1950 [Tay50]. Certains auteurs ont effectué des calculs bidimensionnels de ce phénomène, parmi eux : [Kul91], [You84, You89], [Bak80], et [Glim90]. Ces travaux emploient la méthode de suivi d'interface et se focalisent sur la croissance de l'échelle de longueur associée à la zone de mélange, due à l'interaction entre les bulles de fluide léger et lourd. Des études expérimentales étaient menées en parallèle [Zuf88], et des résultats de simulations tridimensionnelles ont été publiés. Dahlburg & Gardner [Dah90] se sont focalisés sur la croissance de l'instabilité issue d'une perturbation initiale à une longueur d'onde donnée.

La phénoménologie de cet écoulement induit par cette instabilité d'interface dépend de différents paramètres. Ces paramètres sont les rapports de densité entre les deux couches de fluide, la compressibilité, les viscosités, la diffusion des deux fluides, la présence ou non de tension superficielle entre les deux fluides et l'intensité du champ d'accélération.

Une instabilité est définie comme absolue si l'amplitude de perturbation, prise en un point lié à la matière, croît indéfiniment avec le temps. Cette classe comprend les types classiques d'instabilités des interfaces entre fluides de densités différentes.

Les instabilités peuvent être donc classées selon la géométrie et le mode de croissance :

- Instabilité de Taylor-Birkhoff, l'interface dans ce cas est cylindrique ou sphérique.
- Instabilité de Richtmyer-Meshkov [Ric60] [Mes69], l'interface est balayée par un front de choc, c'est-à-dire soumise à une accélération impulsionnelle.
- Instabilité de Rayleigh-Bénard qui représente un fluide contenu entre deux plaques horizontales à des températures différentes. C'est une instabilité gravitationnelle et le milieu est stratifié thermiquement.

On distingue ces instabilités de celles dites de cisaillement de Kelvin-Helmholtz, où le gradient générateur est un gradient de vitesse orthogonal à la direction de l'écoulement de base, comme dans le cas de couches limites, ou de l'écoulement de Couette. D'une façon générale, on peut parler de trois régimes de l'évolution temporelle des instabilités (le régime linéaire, le régime non linéaire et le régime turbulent).

2.2 Régimes d'écoulement

2.2.1 Régime linéaire

Ce régime est étudié analytiquement pour des fluides parfaits compressibles ou incompressibles, l'acquisition théorique et numérique est considérable, [Cha61] [Dra81] [Kul91]. Nous allons développer les idées de base de l'analyse de perturbation dans le cas linéaire sachant que tous les développements mathématiques peuvent se trouver dans [Cha61] [Dra81].

Le but de cette analyse est d'obtenir la relation de dispersion par une technique de linéarisation des équations aux perturbations en négligeant les termes non linéaires des quantités perturbées. Si les perturbations sont petites alors cette procédure est justifiée. L'avantage de la linéarisation est le principe de superposition qui n'est valable que pour les équations linéaires. Si le taux de croissance des perturbations est décrit par un ensemble d'équations linéaires, alors une perturbation quelconque peut être décomposée par une superposition de plusieurs composantes d'une série de Fourier et l'évolution de chaque mode peut être étudiée de façon indépendante. La méthode d'analyse de stabilité linéaire consiste à introduire des perturbations sinusoïdales d'un état de base dont la stabilité est recherchée.

Par exemple, le champ de vitesse d'un état de base ayant un écoulement parallèle à l'axe \mathbf{x} et variant suivant l'axe \mathbf{y} est $\vec{U} = [U(y), 0, 0]$. Nous superposons à ce champ une perturbation de la forme suivante :

$$u(x, y, z, t) = \hat{u}(y) \exp(ik_1x + ik_2z + \sigma t) \quad (2.1)$$

où $\hat{u}(y)$ est l'amplitude complexe de la perturbation. Il est clair que seule la partie réelle du membre droit de l'équation est prise en compte dans la recherche des quantités physiques. La raison pour laquelle la solution exponentielle en $(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{t})$ est admise provient du fait que les coefficients de l'équation différentielle sont indépendants de ces variables. L'écoulement est supposé ne pas avoir de limites dans les directions \mathbf{x} et \mathbf{z} , de telle sorte que les nombres d'onde k_1 et k_2 ne peuvent être que réels et que les variables dépendantes du problème restent finies lorsque $x, z \rightarrow \infty$; $\sigma = \sigma_r + i\sigma_i$ est complexe. Le comportement du système pour tous les nombres d'onde possibles $\hat{\mathbf{k}} = [k_1, 0, k_2]$ est examiné dans cette analyse. Si σ_r est positif, quelle que soit la valeur du nombre d'onde, alors le système est instable aux perturbations de ce nombre d'onde. Si un tel état instable ne peut être trouvé alors le système est stable. Nous pouvons dire en fait que :

$$\begin{cases} \sigma_r < 0 : \textit{stable} \\ \sigma_r > 0 : \textit{instable} \\ \sigma_r = 0 : \textit{stabilité neutre} \end{cases} \quad (2.2)$$

L'analyse de la méthode par examen des composantes de Fourier (équation (2.1)) est appelée la méthode des modes normaux. Une perturbation arbitraire peut être décomposée dans un ensemble complet des modes normaux. La stabilité de chacun des modes est examinée séparément et parce que le problème est linéaire, ces différents modes n'interagissent pas entre eux. Cette méthode entraîne la résolution d'un système aux valeurs propres.

La limite entre la stabilité et l'instabilité est appelée état de stabilité marginale, pour lequel $\sigma_r = 0$. Il peut y avoir deux types d'états marginaux, dépendant de la valeur de σ_i . Si $\sigma_i = 0$ dans l'état marginal, alors l'équation (2.1) montre que cet état est caractérisé par un état stationnaire. En revanche, si $\sigma_i \neq 0$, toujours dans l'état marginal, alors l'instabilité est

caractérisée par des oscillations d'amplitude constante. Cependant, l'état marginal possède une contrainte additionnelle dans le sens où il est à la limite des solutions stables et instables. Un petit changement des paramètres (comme le nombre de Reynolds) de l'état marginal peut entraîner le système dans un régime instable ($\sigma_r > 0$).

Dans la plupart des cas, le critère de stabilité peut être déterminé par $\sigma_r = 0$ sans pour autant démontrer qu'on est à la limite des états stables et instables. La transition d'une configuration stable à celle instable est appelée bifurcation dans le jargon mathématique.

2.2.2 Régime non linéaire

C'est un régime où seules les instabilités d'interface en géométrie plane ont été étudiées de manière approfondie. Il existe de rares études théoriques qui sont d'ailleurs limitées au cas typique d'une perturbation sinusoïdale entre deux fluides parfaits incompressibles. Dans le cas d'une déformation très importante de l'interface (régime fortement non-linéaire), il n'existe pas d'expression analytique donnée par la théorie. On sait seulement que, s'il existe un mode dominant, la configuration de l'instabilité de Rayleigh-Taylor évolue vers la formation de bulles de fluide léger pénétrant dans le fluide lourd et atteignant une vitesse limite proportionnelle à $\sqrt{g\lambda}$ (\mathbf{g} est l'accélération de gravité uniforme et λ la longueur d'onde initiale) et d'aiguilles de fluide lourd tombant quasiment en chute libre dans le fluide léger. Trygvason § Unverdi [1990] se sont penchés sur la croissance de l'instabilité issue d'une perturbation initiale à une longueur d'onde. Puis d'autres auteurs ([Glim90], [Haa91], [Ofer92]) se sont intéressés à l'interaction entre les différents modes. Par exemple, Glimm *et al.* [1990] ont étudié numériquement les interactions entre les bulles thermiques et leur effet sur le comportement statistique ainsi que l'évolution de l'enveloppe de la zone de mélange au niveau de l'interface. Fournier *et al.* [2002] ont étudié numériquement, par une méthode pseudo-spectrale avec décomposition de domaines et adaptation dynamique de maillage, l'instabilité de Rayleigh-Taylor en régime non linéaire. Ils ont déterminé l'influence de trois paramètres (nombres de Schmidt, d'Atwood et de Mach) sur l'évolution de l'écoulement de Rayleigh-Taylor, issu d'une perturbation à un seul mode, en variant ces paramètres un à un. Ils ont ensuite introduit 22 modes dans la perturbation initiale de la concentration et de la vorticité et ont conclu que ces quantités fluctuaient considérablement au cours du temps mettant en évidence le couplage entre ces modes.

2.2.3 Régime turbulent

La turbulence est une dernière phase de développement d'une instabilité. Toutes les configurations n'évoluent pas forcément vers ce régime, en particulier si la valeur du nombre de Reynolds de l'écoulement n'est pas suffisante par exemple. Cette phase se caractérise par sa sensibilité aux conditions initiales et par la coexistence de mouvement dont le spectre des échelles spatiales caractéristiques (composantes de Fourier) s'étale sur une large gamme de fréquences (cascade de Kolmogorov [Hin75]). Ce régime, dit turbulent, est caractérisé par des fortes variations en espace et en temps des différents champs, et souvent précédé d'une phase de transition turbulente qui se traduit par l'apparition de mouvements désordonnés, s'étendant progressivement sur un large spectre d'échelles. La physique du mélange à l'interface a été considérablement étudiée ([You84], [You01], [Cab06]). Dans le régime non-linéaire de cette instabilité, les mouvements de fluide dans cette zone de mélange deviennent très irréguliers. Il existe un mouvement rapide à grande échelle des particules fluide dans cette zone qui a tendance à être dominé par la coalescence des petites bulles en expansion. Ces mouvements de fluide irréguliers dans cette zone de mélange se définissent comme étant « turbulents » dans le sens où l'écoulement y est chaotique. Cabot & Cook [Cab06] ont très récemment montré que le rapport entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle n'est pas constant mais semble montrer une légère dépendance avec le nombre de Reynolds et qui pourrait avoir des grandes conséquences dans les modèles de propagation d'une flamme dans les simulations type supernova.

2.3 Les instabilités thermiques dans les fluides supercritiques

Un grand nombre de problèmes hydrodynamiques sont traités avec l'hypothèse que le fluide considéré est incompressible, i.e $\chi_T = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T = 0$ et par conséquent sa densité n'est fonction que de la température : c'est une des simplifications de l'approximation de Boussinesq [Ger76]. Pour la plupart des liquides « classiques », comme l'eau, l'huile..., la compressibilité est très faible et par conséquent, l'hypothèse précédente est valide.

Dans ce qui va suivre, nous allons développer les bases théoriques, sous forme synthétique, de deux problèmes d'instabilité dans le cas des fluides très compressibles proches

de leur point critique : instabilité de Rayleigh-Bénard (RB) et instabilité entre deux couches d'un même fluide initialement à deux températures différentes (donc deux densités différentes). Ce problème peut s'identifier aux instabilités de type Rayleigh-Taylor dans le cas de deux fluides miscibles et est issue d'une analyse physique des résultats des instabilités de RB.

2.3.1 Instabilités de Rayleigh-Bénard dans les fluides supercritiques

Les instabilités de Rayleigh-Bénard (RB) ont fait l'objet d'études très complètes pour des fluides incompressibles ou faiblement compressibles [Ger76], [Nor77] et [Lan89]. Le critère de stabilité (apparition de la convection) est déterminé par celui de Rayleigh qui dépend des mécanismes des forces dissipatives (diffusions visqueuse et thermique) et est donné par :

$$R_a = \frac{C_p g}{\lambda \nu} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P H^3 (T_{\text{inf}} - T_{\text{sup}}) \geq Ra_c \quad (2.3)$$

où T_{inf} et T_{sup} correspondent aux températures des parois inférieure et supérieure et H représente la hauteur de la couche considérée.

Pour des couches de fluide compressible de grandes dimensions (couches atmosphériques) où les stratifications en densité et pression sont importantes, le critère basé sur le gradient de température adiabatique (ou critère de Schwarzschild [Nor77]) remplace celui de Rayleigh usuel pour l'apparition de la convection [Nor77], [Lan89] et est donné par :

$$\frac{dT}{dz} > -\rho g \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_\rho \left(1 - \frac{C_v}{C_p} \right) = \frac{g T \beta_p}{C_p} = A_{GA} \quad (2.4)$$

où A_{GA} représente le gradient de température adiabatique.

Les équations de Boussinesq pour lesquelles les variations de densité sont négligées excepté dans le terme source de la gravité, sont également applicables pour les fluides compressibles, à condition d'introduire dans la définition du nombre de Rayleigh un terme qui tient compte des effets compressibles [Spi60, Spi65]. Comme la compressibilité diverge au point critique, on peut obtenir une stratification en densité identique à celle obtenue dans les

couches atmosphériques, mais cette fois-ci dans des cellules de dimensions millimétriques. Gitterman & Steinberg [Git71, Git78] ont développé un modèle basé sur une analyse asymptotique et ont trouvé un nombre de Rayleigh critique applicable aux fluides proches de leur point critique compressibles. Carlès & Ugurtas [Car99] ont un peu plus rigoureusement établi un critère comparable à celui du cas incompressible et qui est simplement donné par la comparaison d'un nombre de Rayleigh modifié ($Ra^{\text{modifié}} = Ra \left[1 - \frac{A_{GA} H}{\Delta T} \right]$ où \mathbf{H} est la hauteur de la couche sur laquelle est appliquée la différence de température ΔT) avec le nombre de Rayleigh critique établi dans le cas incompressible ($Ra_c=1707.8$).

La différence de température critique à partir de laquelle la convection démarre est alors donnée par :

$$(\delta T)_c = Ra_c \frac{\kappa \nu}{gL^3 \beta_P} + \frac{g T \beta_P H}{C_p} \quad (2.5)$$

Le second terme correspondant au gradient adiabatique ne varie pas beaucoup en fonction de la proximité du point critique [Elk03]. Le premier terme devient asymptotiquement nul lorsqu'on se rapproche du point critique alors qu'il devient prédominant loin du point critique. Par conséquent, si un FSC, confiné entre deux parois infinies, est soumis à un gradient de température adverse alors la stabilité convective sera caractérisée, loin du point critique, par le critère de Rayleigh et par celui de Schwarzschild au voisinage du point critique. Amiroudine *et al.* [Ami96, Ami01] ont tracé la courbe du $(\delta T)_c$ en fonction de la proximité du point critique pour différentes hauteurs de la cavité (voir *Figure 2.1*). Ils ont ainsi pu identifier les zones Rayleigh et Schwarzschild.

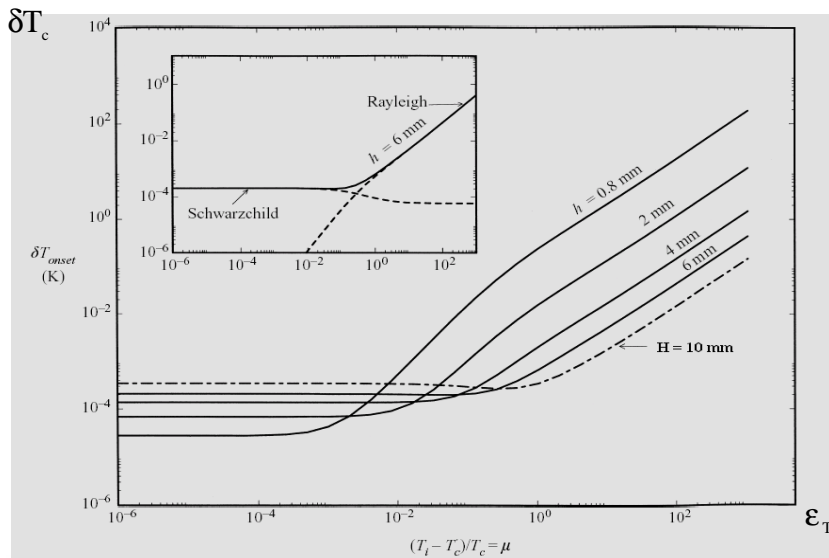


Figure 2.1 : Différence de température à partir de laquelle la convection démarre, donnée par l'équation (2.5) pour le CO_2 en fonction de la proximité du point critique. H correspond à la hauteur totale de la cavité et h à l'épaisseur de la couche de diffusion thermique. La diffusion étant quasi-absente, cette épaisseur est en fait quasi-constante [Ami01].

Ils ont considéré une cavité de rapport de forme 1, de longueur $L=10\text{mm}$, remplie de CO_2 supercritique et pour une proximité donnée du point critique. La paroi inférieure de la cavité est portée, de façon linéaire, à 10mK pendant une seconde. Initialement, le fluide est à 1K du point critique. La *Figure 2.2* donne le champ de température à $t=8.8\text{s}$ avec la caractéristique des plumes thermiques sur les deux parois chaude et froide avec au milieu un fluide homogène en température.

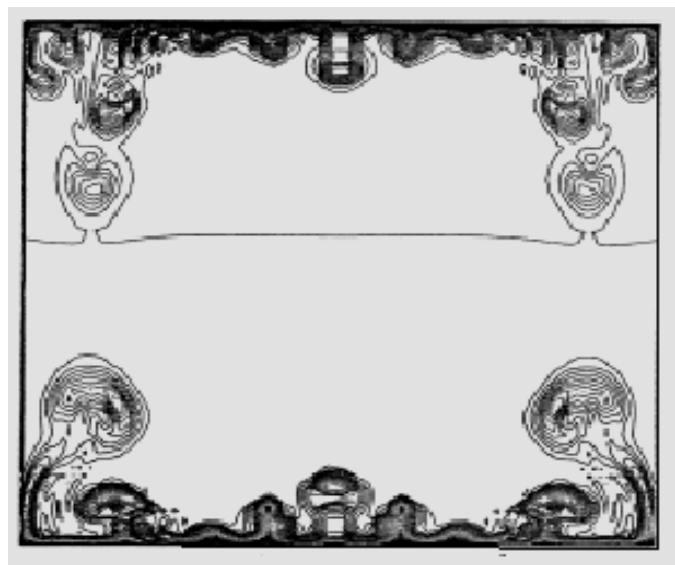


Figure 2.2 : Champ de température à $t=8.8\text{s}$ avec une différence de température entre les deux parois de $\Delta T=10\text{mK}$ à 1K du point critique [Ami01].

On remarque que la couche supérieure dont la température est fixée à la température initiale, devient instable elle aussi, ce qui est inexistant dans le cas d'un gaz parfait. Ce phénomène est connu sous le nom d'effet piston froid [Zap95, Car95, Zap99] et qui fut la base des études des instabilités dans la configuration de type Rayleigh-Taylor [Zap97, Ami05a, Ami05b] et qui sera décrite dans le prochain paragraphe. Au même titre que la couche limite chaude se dilate, il existe une couche limite froide due à l'existence d'une contraction par effet piston.

Après avoir correctement identifié les bases de l'apparition des instabilités de Rayleigh-Bénard dans le cas d'un fluide supercritique, Kogan & Meyer [Kog01] ont expérimentalement établi le diagramme de stabilité pour la configuration Rayleigh-Bénard en fonction de la proximité du point critique et du flux de chaleur imposé sur la paroi inférieure. Ils ont montré l'existence d'oscillations temporelles dans le champ de la température juste au moment du démarrage de la convection. Par la suite, plusieurs études numériques d'équipes indépendantes [Chi01, Ami03] ont caractérisé et expliqué ces oscillations avec différentes méthodes. Ce phénomène d'oscillation temporelle est expliqué par l'interaction mutuelle des plumes thermiques, provenant des couches limites chaudes et froides (ou effets piston chaud et froid) [Ami03].

2.3.2 Aspects théoriques et bibliographiques des instabilités de Rayleigh-Taylor

Dans le paragraphe précédent, nous avons constaté que la couche supérieure dont la température est fixée à la température initiale, devient instable (effet piston froid). Il nous a donc semblé intéressant d'effectuer une étude de la stabilité de deux couches superposées, chaude et froide d'un même fluide supercritique placé en configuration instable.

Si une couche de fluide se trouve à une densité supérieure par rapport à celle du dessous, on a une configuration instable, et une petite perturbation va entraîner un changement complet de régime. Dans le cas où cette différence de densité est due à une différence de température, l'instabilité peut être freinée par la force de frottement provoquée par la viscosité et/ou la conductivité thermique du fluide qui va annuler la différence entre les couches chaudes et froides. Dans le cas d'une très faible diffusion thermique (ce qui est le cas des fluides supercritiques), l'interface va être dominée par une instabilité convective de type

Rayleigh-Taylor puisque la diffusion thermique est négligeable et c'est l'objet de ce paragraphe.

Les premiers résultats [Zap97, Ami05a] ont montré qu'un fluide supercritique thermiquement inhomogène peut se comporter comme un système de fluides miscibles. En effet, la stabilité du front de diffusion thermique, auquel est associé un très fort gradient de densité, est régie par les mêmes lois d'échelle que celui d'un front entre deux fluides miscibles dans lequel la diffusion des espèces est remplacée par la diffusion thermique. Nous allons tout d'abord développer les aspects bibliographique et théorique du problème et les résultats seront détaillés dans les *Chapitres 5 et 6*.

L'instabilité d'un fluide lourd au dessus d'un fluide léger est généralement connue comme une instabilité de Rayleigh-Taylor (RT) [Cha61, Dra81]. Elle existe sous gravité et de façon équivalente, sous une accélération du système vers le fluide dense. Le travail de Duff *et al.* [Duf62] est intéressant puisque, se basant sur des théories existantes qui incluent les effets visqueux, ils n'ont pas correctement réussi à comparer le taux de croissance d'instabilité expérimental d'une mixture d'argon-bromine dans de l'air ou de l'hélium. En revanche, l'introduction des effets diffusifs a permis de le corriger aux erreurs expérimentales près. La théorie développée dans ce papier (même si elle a été appliquée pour des fluides incompressibles) a été utilisée par Renaud & Gauthier [Ren97] avec un code pseudo-spectral parallèle et compressible, afin de décrire un de leur exemple concernant les instabilités de RT. Cette étude a été récemment et rigoureusement appliquée dans le cas des fluides compressibles [Ser02].

Sans développer toute la partie théorique dont les détails peuvent se trouver dans [Dra81], nous donnons la méthodologie de l'analyse de stabilité linéaire avec les différentes relations de dispersion qui en découlent. On résout les équations de mouvement dans le cas le plus général de deux fluides immiscibles incluant la force due à la tension superficielle qui prend une valeur non nulle à l'interface. On perturbe les champs et on obtient donc un système linéaire tout en établissant l'expression de la force due à la tension superficielle à la frontière des deux milieux (équation de Laplace). L'analyse en modes normaux conduit à rechercher des solutions dont la dépendance spatiale dans le plan (\mathbf{x}, \mathbf{y}) et la dépendance temporelle sont de la forme : $\exp(ik_x x + ik_y y + \sigma t)$, où \mathbf{k}_x et \mathbf{k}_y sont les nombres d'onde suivant les directions \mathbf{x} et \mathbf{y} respectivement et σ représente le taux de croissance des instabilités [Cha61, Dra81].

Le système linéaire avec ses conditions aux limites est résolu et on trouve les relations de dispersion suivantes en fonction des configurations ci-dessous [Cha61]:

- Pour une interface idéale et sans tension superficielle, le résultat exact du taux de croissance de l'instabilité est le suivant :

$$\sigma = \sqrt{A_t g k} \quad (2.6)$$

où $A_t = \frac{\rho_L - \rho_1}{\rho_L + \rho_1}$ est le nombre d'Atwood, $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ est le nombre d'onde,

g est l'accélération de pesanteur, ρ_L et ρ_1 sont respectivement les densités des couches lourde et légère. Ce résultat n'est pas physique puisque lorsque $k \rightarrow \infty$, le taux de croissance tend lui aussi vers l'infini. Il faut donc améliorer le modèle de façon à obtenir une décroissance du taux de croissance aux petites échelles.

- Lorsque l'on prend en compte la tension superficielle T et que l'on néglige les effets dus à la viscosité alors :

$$\sigma^2 = g k \left[\frac{\rho_L - \rho_1}{\rho_L + \rho_1} - \frac{k^2 T}{g(\rho_L + \rho_1)} \right] \quad (2.7)$$

et le nombre d'onde de coupure est donné par: $k_c = \left[\frac{g(\rho_L - \rho_1)}{T} \right]^{1/2}$.

- Si on prend en compte les effets visqueux (sans la tension de surface : cas des fluides miscibles) alors :

$$\sigma = \sqrt{A_t g k + \nu^2 k^4} - \nu k^2 \quad (2.8)$$

(le premier cas se déduit de ce dernier avec $\nu=0$). Enfin lorsqu'on prend en compte en plus de la viscosité ν , la diffusion moléculaire D , alors le modèle heuristique (tel décrit dans [Duf62]) donne :

$$\sigma = \sqrt{A_t g k + \nu^2 k^4} - (\nu + D) k^2 \quad (2.9)$$

L'équation (2.9) est écrite dans le cas où la diminution de l'instabilité due à l'épaississement du gradient de densité n'est pas prise en compte. Le nombre d'onde de coupure est donc donné par :

$$k_c = \left[\frac{A_t g}{D(D+2\nu)} \right]^{1/3} \quad (2.10)$$

Toutes ces expressions du taux de croissance peuvent être résumées sur la *Figure 2.3* donnant les allures de ces taux de croissance en fonction du nombre d'onde.

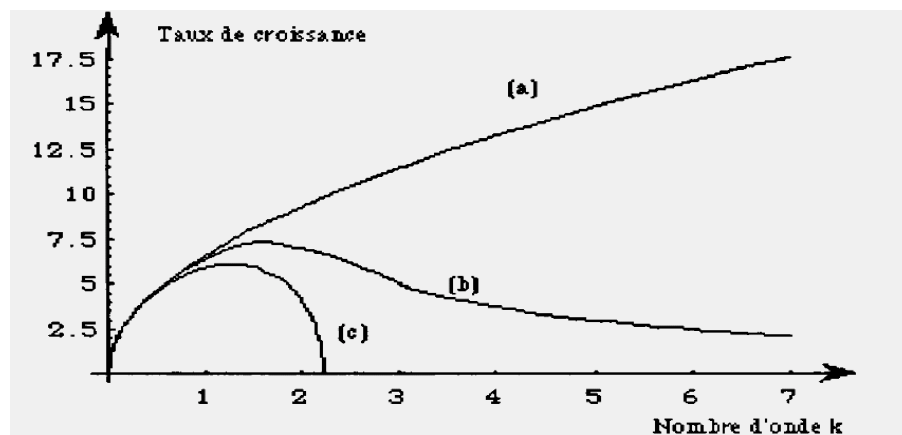


Figure 2.3 : Courbe de dispersion d'une instabilité de Rayleigh-Taylor (a) Relation correspondant au cas sans viscosité et sans tension superficielle, (b) situation avec viscosité mais sans tension superficielle, (c) cas général, avec viscosité et tension superficielle.

Une grande partie du travail de H.J. Kull [Kul91], basée sur la théorie des écoulements potentiels, a été d'approcher les instabilités d'interface. Il a considéré le problème de stabilité d'une couche de fluide visqueuse dans l'approximation à grande longueur d'onde. Cette discussion incluait aussi bien les instabilités de couches de cisaillement que les instabilités de Rayleigh-Taylor incluant les effets visqueux. Son but était d'illustrer les effets de cisaillement, de gravité et de viscosité dans un seul modèle. Il a aussi traité le cas des fluides compressibles (gaz parfaits). Le critère de stabilité pour les instabilités convectives est déduit d'un principe basé sur l'énergie qui peut expliquer les phénomènes de stabilisation et déstabilisation par la compressibilité.

D.D. Joseph [Jos90] s'est intéressé sur l'existence d'une tension interfaciale entre deux fluides miscibles. La présence d'une interface brusque dans le cas d'une faible diffusion dans des bulles ascendantes ou des gouttes tombantes a été explorée expérimentalement.

La forme de ces interfaces est quasiment identique à la forme des bulles et des gouttes des liquides immiscibles avec tension de surface. La description usuelle des problèmes d'interface pour les fluides miscibles avec des conditions d'interface classiques (mais à tension de surface nulle) perd des informations sur la diffusion lente d'un côté et des gradients de contrainte de l'autre (les contraintes sont induites par les gradients de concentration et de densité). Petitjeans & Kurowski [Pet97] ont récemment repris cette idée, dans le cas des fluides miscibles, en montrant des comportements qualitativement similaires à ce que l'on obtient habituellement entre fluides non miscibles.

En effet, en raison de la lenteur de la diffusion moléculaire, les gradients de densité non négligeables entre les deux espèces, peuvent induire une tension de surface équivalente et qui expliquerait ces similitudes.

CHAPITRE 3 : Modélisation mathématique de la configuration de type Rayleigh-Taylor

Dans ce *Chapitre*, nous allons développer les équations de Navier-Stokes couplées avec l'équation d'énergie et une équation d'état linéarisée. Les premiers calculs numériques [Ami05a, Ami05b] ont permis la résolution de ces équations en filtrant les ondes acoustiques (méthode dite de « filtrage acoustique »). Dans les travaux ultérieurs [Bout06], le problème a été résolu sans filtrer ces équations puisque la méthode des volumes finis est naturellement filtrante (formulation intégrale des équations [*Chapitre 4*]). L'objectif de ce *Chapitre* est de présenter et de comparer ces deux méthodes.

3.1 Position du problème (cas sans stratification initiale)

Considérons une cavité rectangulaire (*Figure 3.1*) de hauteur H' et de longueur L' contenant un fluide supercritique (He^3) soumis à un champ de pesanteur $\vec{g}' = (0, -g')$. A l'instant initial, le fluide est maintenu, dans la partie supérieure de la cavité de hauteur $H' - h'$, à une température $T_2' = (1 + \varepsilon_T)T_c'$ très proche de T_c' ($\varepsilon_T \ll 1$) et à une densité supposée $\rho_2' = \rho_c'$. Dans la partie inférieure de hauteur h' , on impose une densité $\rho_1' = (1 - \varepsilon_\rho)\rho_2'$ où ε_ρ est imposé : le fluide inférieur est donc moins dense que celui qui est au-dessus ($\rho_1' < \rho_2'$); dans ces conditions la température T_1' est déterminée par l'équation d'état (voir ci-après l'hypothèse 1).

Les grandeurs géométriques du problème sont :

- la largeur de la cavité L'
- les deux hauteurs H' et h' représentant les deux couches de fluide, d'où notre choix de L' comme longueur caractéristique.
- les deux rapports de forme : $\Gamma_1 = \frac{h'}{L'}$; $\Gamma_2 = \frac{H'}{L'}$.

Les quatre paramètres qui sont donc imposés dans ce problème pour un cas donné sont les suivants :

$$\Gamma_1 = \frac{h'}{L'} ; \quad \Gamma_2 = \frac{H'}{L'} \quad (\text{facteurs de forme géométrique})$$

ainsi que :

$$\varepsilon_T = \frac{T_2' - T_c'}{T_c'} ; \quad \varepsilon_\rho = \frac{\rho_2' - \rho_1'}{\rho_c'} \quad (\text{facteurs de forme physique})$$

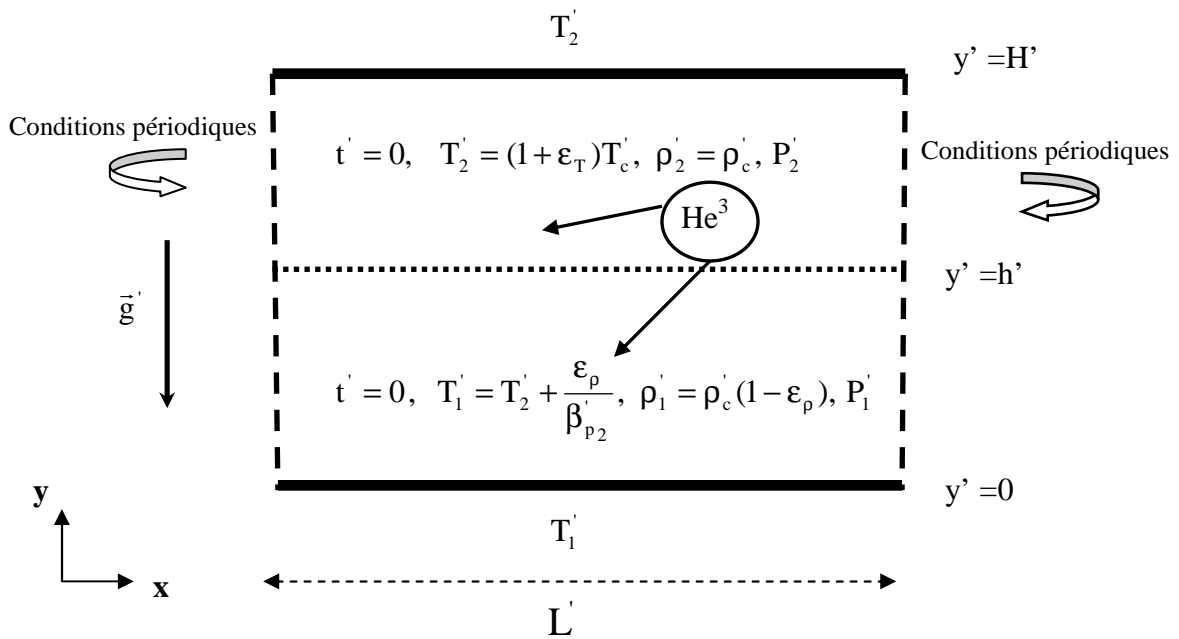


Figure 3.1: Le modèle géométrique.

Les propriétés physiques qui interviennent dans le problème sont :

- P_c', ρ_c', T_c' : pression, densité et température critiques du fluide considérée He^3 . Quant aux autres propriétés physiques, elles seront définies à l'état 2 (voir ci-après l'hypothèse 1).

Remarque : Nous avons choisi l'Hélium3 comme fluide car le code numérique a été initialement exécuté dans le cadre d'une collaboration avec l'équipe du Pr H.Meyer qui nous a fourni toutes les propriétés thermophysiques de ce fluide [Kog00], [Mey02], [Ami03].

- β_{p_2}' : le coefficient d'expansion thermique à la pression P_2'
- χ_{T_2}' : la compressibilité isotherme à la température T_2'
- C_{p_2}' : la capacité calorifique à pression constante
- λ_{T_2}' : la conductivité thermique

Hypothèse 1 : Régularisation

On considère une hypothèse de régularisation qui permet d’avoir les mêmes propriétés physiques dans les deux couches (inférieure et supérieure) puisque ces propriétés ne dépendent que de la température, et que la différence de température entre ces deux couches est très faible ($T_1' - T_2' \ll 1$), on peut alors supposer que :

$$\chi_{T_1'} \cong \chi_{T_2'}, \quad \lambda_{T_1'} \cong \lambda_{T_2'} \quad (\text{voir Figure 3.2})$$

De la même façon, on peut supposer que le coefficient d’expansion thermique ainsi que la capacité à pression constante dépendent très faiblement de la pression : $\beta_{p_1} \cong \beta_{p_2}, C_{p_1}' \cong C_{p_2}'$

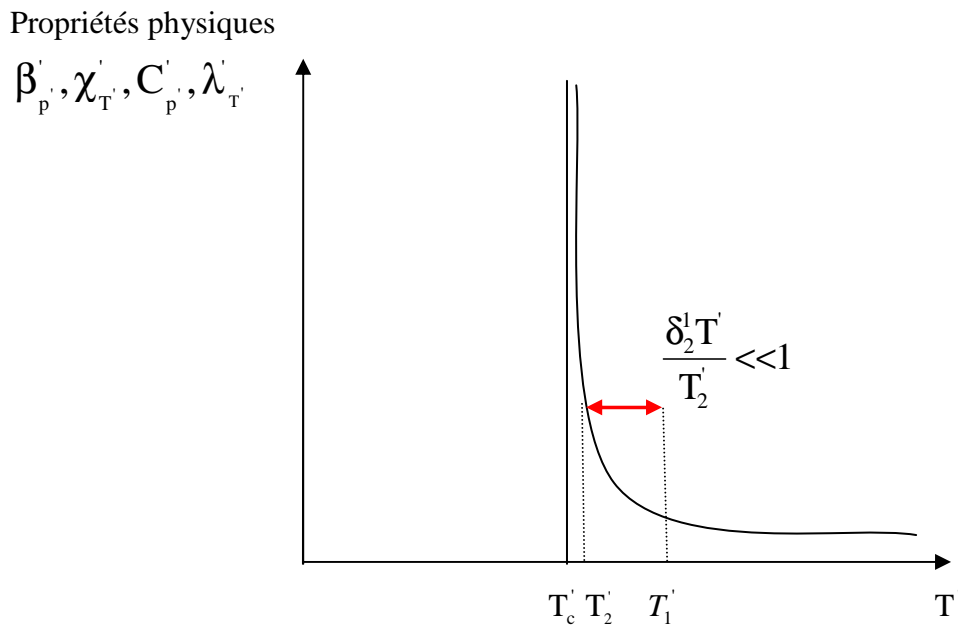


Figure 3.2 : Allure qualitative des propriétés thermodynamiques au voisinage du point critique (p_c', ρ_c', T_c').

Afin d’éviter l’utilisation d’une équation d’état non parfaitement déterminée, nous avons préféré partir de l’état physique 2 puisque les propriétés physiques du fluide sont bien connues expérimentalement ([Kog00], voir *Annexe 1*). L’équation d’état considérée dans ce problème sera alors linéaire et perturbée par rapport au point (p_2', ρ_2', T_2') qui représente l’état thermodynamique à $t'=0$ de la couche supérieure de notre domaine d’étude.

$$\rho'(p', T') = \rho_2' + \left(\frac{\partial \rho'}{\partial P'} \right)_{T'=T_2'} (P' - P_2') + \left(\frac{\partial \rho'}{\partial T'} \right)_{p'=p_2'} (T' - T_2') \quad (3.1)$$

Les propriétés physiques ($\beta_p', \chi_{T'}'$) sont supposées constantes et prises à l'état 2 (P_2', T_2'). On les définit comme :

$$\chi_{T_2'} \equiv \frac{1}{\rho_c'} \left(\frac{\partial \rho'}{\partial P'} \right)_{T'=T_2'} \quad \text{et} \quad \beta_{p_2'} \equiv -\frac{1}{\rho_c'} \left(\frac{\partial \rho'}{\partial T'} \right)_{P'=P_2'}$$

L'équation d'état linéarisée peut alors s'écrire : $\rho' = \rho_2' + \rho_c' \chi_{T_2'}' (P' - P_2') - \rho_c' \beta_{p_2'}' (T' - T_2')$

On définit $\delta_2^1 T'$ la différence de température entre les deux couches de notre domaine d'étude et à l'état initial et dans le cas où la cellule est isobare (Hypothèse 2), cette différence vaut :

$$\delta_2^1 T' = T_1' - T_2' = \frac{\varepsilon_p}{\beta_{p_2}'}$$

Hypothèse 2 :

La cavité est à une pression initiale constante (cavité isobare), à $t'=0$, on a : $P_1' = P_2'$. On a choisi de leur donner la valeur de la pression critique, donc l'équilibre thermodynamique n'est donc pas vérifié à cet instant initial puisque à $t' = 0$ les valeurs des pressions P_1' et P_2' sont inconnues (voir *Figure 3.3*).

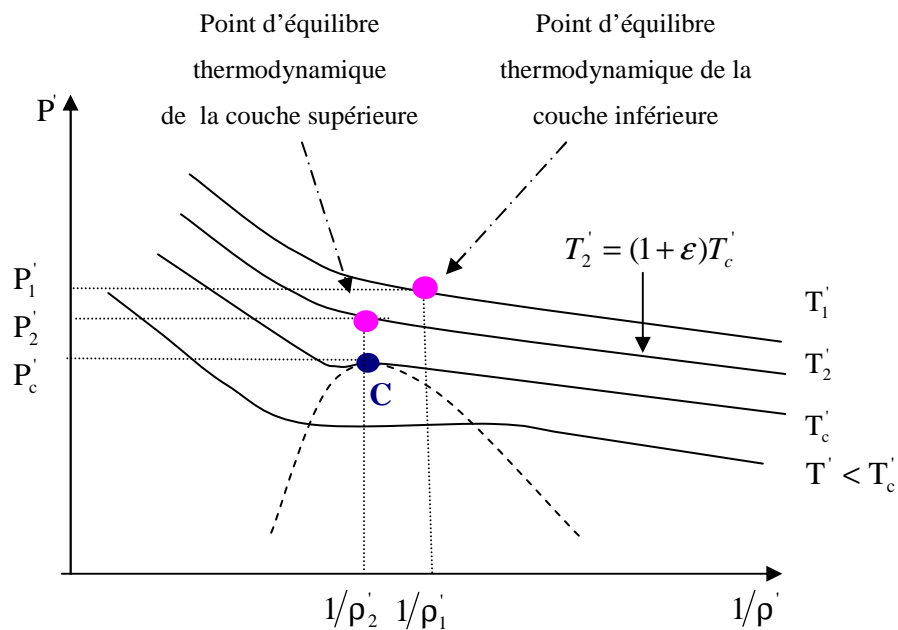


Figure 3.3 : Diagramme d'état qualitatif ($P', 1/\rho'$) ; présentation de l'état thermodynamique du domaine d'étude à $t'=0$ (non à l'échelle). On remarque en fait que $P_1' \neq P_2'$.

3.2 Les équations dimensionnelles du problème

On considère que le fluide est compressible et obéit à une équation d'état (linéarisée dans notre cas, voir §3.1), qu'il est à la fois visqueux, newtonien et conducteur de la chaleur. Les équations décrivant l'évolution bidimensionnelle de la configuration donnée dans le paragraphe précédent sont :

- Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t'} + \text{div}(\rho' \vec{V}') = 0 \quad (3.2)$$

- Equation de la quantité de mouvement :

$$\rho' \left[\frac{\partial \vec{V}'}{\partial t'} + (\vec{V}' \cdot \nabla') \vec{V}' \right] = -\vec{\nabla} P' + \mu' \left(\Delta \vec{V}' + \frac{1}{3} \nabla' (\nabla' \cdot \vec{V}') \right) + \rho' \vec{g}' \quad (3.3)$$

- Equation d'énergie :

$$\rho' C_p' \left(\frac{\partial T'}{\partial t'} + \vec{V}' \cdot \vec{\nabla} T' \right) = T' \beta_{p_2}' \frac{dP'}{dt'} + \nabla [\lambda' \nabla T'] + \mu' \Phi' \quad (3.4)$$

avec $\Phi' = V'_{i,j} V'_{j,i} + V'_{i,j} V'_{i,j} - \frac{2}{3} V'_{i,i} V'_{j,j}$ correspondant à la dissipation visqueuse.

- Equation d'état :

$$\rho' = \rho_2' + \rho_c' \chi_{T_2}' (P' - P_2') - \rho_c' \beta_{p_2}' (T' - T_2') \quad (3.5)$$

Dans les équations ci-dessous, ρ' est la densité du fluide, \vec{V}' le champ de vecteur vitesse, T' le champ de température et P' la pression.

3.3 Equations adimensionnelles

Dans ce paragraphe, nous allons développer les équations adimensionnelles dont les paramètres caractéristiques ont été basés sur les études précédentes [Ami95, Ami05a] tout en tenant compte du filtrage acoustique.

Les champs adimensionnels s'écrivent de la façon suivante (le choix du temps dépendra du problème étudié) :

$$\rho = \frac{\rho'}{\rho'_c} \quad P = \frac{P'}{\rho'_c R'_0 T'_c} \quad T = \frac{T'}{T'_c}, \quad x = \frac{x'}{L}$$

$$\beta_{P_2} = \beta'_{P_2} T'_c \quad \chi_{T_2} = \chi'_{T_2} (\rho'_c R'_0 T'_c) \quad \vec{V} = \frac{\vec{V}'}{C'_0}$$

Les quantités indicées « 0 » sont prises pour le cas de gaz parfait : $C'_0 = \sqrt{\gamma_0 R'_0 T'_c}$ est la vitesse du son prise à la température T'_c , $\gamma_0 = \frac{C'_{p0}}{C'_{v0}}$ est le rapport des chaleurs spécifiques et R'_0 est la constante des gaz parfaits.

Les propriétés physiques (μ' , C'_p , λ' , χ'_{T_2} et β'_{P_2}) ont été définies dans le *Chapitre 1* et dont les expressions en fonction de ε_T pour l'Hélium3 sont définies en *Annexe 1*.

Dans la mesure où l'on souhaite filtrer les ondes acoustiques, il est judicieux de se placer sur une échelle de temps plus grande que l'échelle du temps acoustique. L'échelle de temps caractéristique qui nous intéresse est l'échelle de temps de l'effet piston tel décrit dans le *1^{er} Chapitre*. Mais on peut aussi choisir l'échelle de temps caractéristique de la diffusion de la quantité de mouvement (la viscosité cinématique ne varie pas à l'approche du point critique, ce qui en fait une bonne référence), alors que l'échelle de temps de la diffusion de la chaleur tend vers l'infini comme décrit dans le *1^{er} Chapitre* et ne peut constituer une échelle de temps caractéristique.

Si $\frac{V'_0}{L}$ représente la vitesse caractéristique de la diffusion de la quantité de mouvement, le

temps caractéristique correspondant sera alors : $t'_{\text{ref}}{}^{\text{vis}} = \frac{L^2}{V'_0}$.

L'échelle de temps de l'effet piston [Ami95] peut aussi être prise pour temps caractéristique, même si elle n'a pas été utilisée dans ce travail. L'ordre de grandeur de cette échelle de temps de l'effet piston a été calculée par une analyse asymptotique par [Zap90] :

$$t_{\text{ref}}^{\text{EP}} = \frac{\varepsilon_T^{3/2}}{\text{Pr}_0} t_{\text{d0}}' \quad \text{avec} \quad t_{\text{d0}}' = \frac{L'^2}{\kappa_0'} \quad \text{le temps de diffusion de la chaleur et} \quad \text{Pr}_0 = \frac{\nu_0'}{\kappa_0'} \quad \text{le nombre de}$$

Prandtl. Les quantités indicées « 0 » correspondent aux quantités du gaz parfait.

Afin de développer les équations adimensionnelles filtrées et à faible nombre de « Mach » lié à la propriété du fluide, il est primordial de procéder avec une structure temporelle multi-échelle, c'est-à-dire que vitesse et temps caractéristiques ne sont pas

explicitement liées : $V_{\text{ref}}' = C_0'$ et $t_{\text{ref}}^{\text{vis}} = \frac{L'^2}{\nu_0'}$.

Les équations adimensionnelles s'écrivent alors :

- Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{M} \nabla(\rho \vec{V}) = 0 \quad (3.6)$$

- Equation de la quantité de mouvement :

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \frac{1}{M} (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} \right] = -\frac{\gamma_0^{-1}}{M} \vec{V} p + [\Delta \vec{V} + \frac{1}{3} \vec{V} (\vec{V} \cdot \nabla)] - \frac{M}{\text{Fr}} \rho \vec{j} \quad (3.7)$$

- Equation d'énergie :

$$\rho \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{M} \vec{V} \cdot \nabla T \right) = \frac{\beta_{P_2} \text{Ec}}{\gamma_0} T \frac{dP}{dt} + \frac{1}{\text{Pr}} \vec{V} \cdot [\vec{V} \nabla T] + \text{Ec} \phi \quad (3.8)$$

- Equation d'état :

$$\rho = \rho_2 + \chi_{T_2} (P - P_2) - \beta_{P_2} (T - T_2) \quad (3.9)$$

avec les nombres adimensionnels caractéristiques suivants :

$$\text{Fr} = \frac{(\nu_0' / L')^2}{L' g'} \quad (\text{Nombre de Froude}), \quad \text{Pr} = \frac{\nu_0'}{\kappa_0'} \quad (\text{Nombre de Prandtl})$$

$$M = \frac{(\nu_0' / L')}{C_0'} \quad (\text{Nombre de Mach}), \quad \text{Ec} = \frac{C_0'^2}{C_P T_C'} \quad (\text{Nombre d'Eckert})$$

Le système d'équations (3.6-3.9) contient 6 nombres adimensionnels (Fr , Pr , M , Ec , χ_{T_2} et β_{P_2}). Ces nombres sont constants puisqu'ils sont définis dans le cas du gaz parfait. Seul le nombre d'Eckert varie en fonction de la proximité du point critique (C'_p diverge au point critique). Il est à noter que l'adimensionalisation ci-dessus nous sert simplement à établir les équations dans l'approximation à faible nombre de « Mach » (voir paragraphe 3.4) mais les équations sont résolues en dimensionnel.

Remarque : Pour une proximité du point critique donnée, ces nombres sont constants. Ce ne sont pas des paramètres de contrôle. L'adimensionalisation nous sert simplement à établir les équations dans l'approximation à faible nombre de « Mach ».

3.4 Approximation à faible nombre de « Mach » :

Nous introduisons un filtrage acoustique à faible nombre de « Mach » dans notre cas étudié, car les phénomènes physiques se déroulent aux échelles de temps caractéristiques plus grandes que celle de l'acoustique (effet piston par exemple). Ceci permet de réduire les coûts du calcul en utilisant un pas de temps plus grand. Autrement dit, la résolution des équations sans filtrage acoustique nous oblige à diminuer le pas du temps dans les simulations numériques. Nous allons établir les approximations des équations (3.6-3.9) à l'aide des développements en fonction du petit paramètre qui est le nombre de « Mach ». La forme précise de ce petit paramètre est arbitraire. L'important est que la vitesse de propagation de la quantité de mouvement du gaz parfait pris en première approximation soit faible comparée à la vitesse du son.

On peut choisir d'établir mathématiquement les équations de Navier-Stokes filtrées en utilisant un développement asymptotique pour tous les champs [Pao82, Che86] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho = \rho^{(0)} + M^2 \rho^{(1)} + o(M^2) \\ P = P^{(0)} + M^2 P^{(1)} + o(M^2) \\ T = T^{(0)} + M^2 T^{(1)} + o(M^2) \\ \vec{V} = M[\vec{V}^{(0)} + M^2 \vec{V}^{(1)} + o(M^2)] \end{array} \right. \quad (3.10)$$

Ces développements sont introduits dans les équations (3.6-3.9), et on obtient à l'ordre

$$\frac{1}{\gamma_0 M^2} : \quad \vec{\nabla} P^{(0)} = \vec{0} \quad (3.11)$$

L'équation précédente est valide si on a les conditions suivantes vérifiées:

$$M^2 \ll 1 \quad \text{et} \quad \frac{M^2}{Fr} \ll 1 \quad (3.12)$$

L'ordre de grandeur de la vitesse du son pour l'Hélium3, dans les conditions standards est : $C'_0 = \sqrt{\gamma'_0 r'_0 T'_c} \approx 106,5 \text{ m/s}$. Si on considère une cavité de longueur caractéristique $L' = 1 \text{ mm}$ et connaissant la viscosité cinématique de l'Hélium3 dans les conditions standards ($\nu'_0 = 40,3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$), on a :

$$M^2 = \frac{(\nu'_0 / L')^2}{C_0^2} \approx 1,4310^{-13} \ll 1 \quad \text{et} \quad \frac{M^2}{Fr} = \frac{g' L'}{C_0'^2} \approx 8,810^{-7} \ll 1.$$

Les deux conditions précédentes sont bien vérifiées dans notre cas. La première de ces inégalités signifie que la vitesse de propagation de la vitesse de la quantité de mouvement est très petite devant celle de la propagation de l'onde acoustique (calculée à partir de l'équation des gaz parfaits), et la deuxième inégalité signifie que la vitesse de propagation du son (C'_0) est beaucoup plus rapide que la vitesse de propagation de l'onde de gravité ($\sqrt{g' L'}$).

L'équation (3.11) implique la constance à l'ordre $\frac{1}{\gamma_0 M^2}$, vis-à-vis des variables d'espace, de la pression $P^{(0)}$:

$$P^{(0)} = P^{(0)}(t) \quad (3.13)$$

A l'ordre suivant, on obtient les équations suivantes (on omet les exposants « 0 » par souci de simplification) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{V}) = 0 \quad (3.14)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla}) \vec{V} \right] = -\gamma_0^{-1} \vec{\nabla} P^{(1)} + \frac{1}{Re} [\Delta \vec{V} + \frac{1}{3} \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{V})] - \frac{1}{Fr} \rho \vec{j} \quad (3.15)$$

$$\rho\left(\frac{\partial T}{\partial t} + \bar{V}\nabla T\right) = \frac{R}{C_p}\beta_p T \frac{dP}{dt} + \frac{1}{Pr Re} \bar{V} \cdot [\bar{V}T] \quad (3.16)$$

$$\rho = \rho_2 + \chi_{T_2} (P - P_2) - \beta_{P_2} (T - T_2) \quad (3.17)$$

La quantité P (ou $P^{(0)}$) intervenant dans l'équation d'état et l'équation d'énergie, est une pression thermodynamique, tandis que la quantité $P^{(1)}$ est une pression dynamique car elle est liée à la vitesse du fluide dans l'équation de quantité de mouvement.

La fonction de dissipation Φ n'apparaît plus dans l'équation (3.16) puisque :

$$\frac{\gamma_0 R_0}{C_p} M^2 = 3.05 \times 10^{-17} \ll 1, \quad (M^2 \ll 1 \text{ et } C_p \text{ qui diverge au point critique})$$

Fermeture du problème :

Les équations précédentes (3.14-3.17) ajoutent une inconnue supplémentaire P (ou $P^{(0)}$). Afin de fermer le problème, il faut une équation supplémentaire traduisant l'état initial qui est celle de la conservation de la masse et qui s'écrit :

$$\int_V \rho dV = \int_V \rho_0 dV, \quad \forall t \quad (3.18)$$

où ρ_0 est la masse volumique à $t=0$ et V est le volume du fluide correspondant. L'équation (3.18) combinée à celle de l'équation d'état (3.17) entraîne l'expression de $P^{(0)}$:

$$P^{(0)}(t) = \frac{\int \left(\frac{\beta_{P_2}}{\chi_{T_2}} (T - T_0) + P_0 \right) dV}{\int dV} \quad (3.19)$$

3.5 Equations non filtrées :

La méthode numérique que l'on a utilisée dans cette étude et qui va être décrite dans le prochain *Chapitre* est la méthode des volumes finis. Cette méthode utilise la formulation faible des équations (méthode intégrale) qui lui permet de filtrer les équations naturellement. Nous avons tenté d'utiliser cette propriété avec un adimensionnement adéquat (échelles de vitesse et temps acoustiques). Les variables adimensionnelles sont définies par :

$$\rho = \frac{\rho'}{\rho_c}, \quad P = \frac{P'}{\rho_c' C'^2}, \quad T = \frac{T'}{T_c}, \quad \bar{x} = \frac{\bar{x}'}{H'}, \quad \vec{V} = \frac{\vec{V}'}{C'}, \quad t = \frac{t'}{t_a}$$

où $t_a = \frac{H'}{C'}$ est le temps acoustique et C' est la vitesse du son déterminée à partir de l'équation

$$\text{de Mayer généralisée: } C' = \sqrt{\frac{P_c'}{\rho_c'} \left(\frac{P_c' \alpha_{p_2}^2}{\rho_c' C_v' T_c'} + \frac{1}{\chi_{T_2}^*} \right)} \quad \text{avec } \alpha_{p_2} = \frac{T_c'}{P_c'} \left(\frac{\partial P'}{\partial T'} \right)_{p_2} \quad \text{et } \chi_{T_2}^* = \chi_{T_2}' P_c'$$

est la compressibilité isotherme adimensionnelle. Les propriétés thermophysiques ci-dessous correspondent aux valeurs expérimentales, comme détaillé dans l'*annexe 1*.

Les équations adimensionnelles (issues de cette 2^{ème} adimensionalisation) peuvent alors s'écrire:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \\ \rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} \right] = -\vec{V} P + \frac{1}{\text{Re}} \left[\Delta \vec{V} + \frac{1}{3} \vec{V} (\nabla \cdot \vec{V}) \right] - \frac{1}{\text{Fr}^2} \rho \vec{j} \\ \rho \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla T \right) = \beta_{p_2} \text{Ec} T \frac{dP}{dt} + \frac{1}{\text{Re Pr}} \vec{V} \cdot [\nabla T] + \frac{\text{Ec}}{\text{Re}} \Phi \\ \rho = \rho_2 + \chi_{T_2} (P - P_2) - \beta_{p_2} (T - T_2) \end{array} \right. \quad (3.20)$$

où Φ est la dissipation visqueuse adimensionnelle.

Les différents nouveaux paramètres qui apparaissent dans les équations ci-dessous sont les

$$\text{suivants : } \text{Fr} = \frac{C'}{\sqrt{H' g}} \quad (\text{Nombre de Froude}), \quad \text{Pr} = \frac{\nu'}{\kappa'} \quad (\text{Nombre de Prandtl})$$

$$\text{Re} = \frac{H' C'}{\nu'} \quad (\text{Nombre de Reynolds}), \quad \text{Ec} = \frac{C'^2}{C_p' T_c'} \quad (\text{Nombre d'Eckert})$$

$$\beta_{p_2} = \beta_{p_2}' T_c' \quad (\text{Coefficient d'expansion thermique})$$

$$\chi_{T_2} = \chi_{T_2}' \rho_c' C'^2 \quad (\text{Compressibilité isotherme})$$

Tous les paramètres adimensionnels ci-dessous sont définis en fonction des propriétés physiques (voir *annexe 1*) et dépendent seulement d'un seul paramètre de contrôle ε_T qui

correspond à la proximité du point critique. Le *tableau 3.1* donne les valeurs numériques des différents paramètres et montre leur comportement singulier à l'approche du point critique, c'est-à-dire lorsque $\varepsilon_T \rightarrow 0$: (i) cette propriété singulière n'est pas identique pour tous ces paramètres car les propriétés thermophysiques ont des exposants critiques différents, (ii) à partir des valeurs de ce tableau, le terme prédominant dans l'équation d'énergie est le 1^{er} terme à droite de l'égalité et constitue la base de l'effet thermoacoustique ou effet piston.

$\varepsilon_T \rightarrow 0$	$Fr \rightarrow 0$	$Re \rightarrow 0$	$Ec \rightarrow 0$	$Pr \rightarrow \infty$	$\chi_{T_2} \rightarrow \infty$	$\beta_{p_2} \rightarrow \infty$	$\gamma \rightarrow \infty$	$\beta_{p_2} Ec \rightarrow 0$
0.001	711.23	$1.748001e^{+6}$	$0.2 e^{-3}$	313.92	1401.06	2654.15	1401	0.52
0.005	777.94	$1.911938e^{+6}$	$1.6e^{-3}$	73.45	246.91	392.66	246.91	0.62
0.01	809.86	$1.990379e^{+6}$	$3.89e^{-3}$	37.22	117.29	172.92	117.28	0.67
0.03	866.36	$2.129257e^{+6}$	$1.57e^{-2}$	12.16	36.31	47.384	36.31	0.74
0.08	931.2862	$2.288825e^{+6}$	$5.34 e^{-2}$	4.48	13.06	15.033	13.05	0.8

Tableau 3.1 - Propriétés thermodynamiques de l'He³ en fonction de la distance ε_T au point critique pour une cellule de hauteur $H=1$ mm.

3.6 Cas avec stratification initiale :

3.6.1 Intérêt de la stratification

La stratification et l'effet de la gravité, sont deux paramètres qui jouent un rôle très important pour l'étude de la stabilité des fluides très compressibles. Le problème de la relaxation de la densité sous l'effet de la gravité est fondamentalement intéressant pour la compréhension des expériences terrestres des fluides proches de leur point critique [Gar98]. Un fluide très compressible s'effondre sous son propre poids sous l'effet de la gravité, pour former de grands gradients de densité, comme le font l'atmosphère ou les océans sur de grandes échelles, et cela restreint la précision des mesures expérimentales des propriétés de ces fluides, ainsi que la précision des paramètres critiques [Mol79, Hoh72]. Toute mesure précise d'une quantité thermodynamique est donc de plus en plus difficile à mesurer, car même sur une petite échelle d'espace, le fluide supercritique n'est pas partout dans le même état thermodynamique.

Le mécanisme le plus important pour un fluide supercritique sous l'effet de la gravité terrestre, est dû aux inhomogénéités de densités. Plus le fluide s'approche de son point critique, plus la compressibilité isotherme diverge. Ainsi, une petite variation de pression, engendrera un gradient de densité non négligeable. En d'autres termes, la stratification du fluide due à la variation en température est totalement compensée par l'influence de la variation de pression sur la densité. Les divergences des coefficients de dilatation isobare et de la compressibilité isotherme, font que les gradients de densité sont fortement influencés par la pression due à des petits gradients de température. À la température critique, seule une tranche horizontale du fluide contenu dans la cellule sera à la densité critique.

Pour compenser ce gradient de densité induit, on peut penser introduire un gradient de température tel que $-\rho g \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_p$, la densité du fluide sera indépendante de la hauteur (y), même très proche du point critique, puisque $\left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_p$ ne diverge pas proche du point critique, mais tend vers une constante finie. Un gradient de température de l'ordre de 0.1 K/m dans une cellule remplie de Xénon, permet d'atteindre une densité constante [Mol79]. D'autres tentatives et idées décrites dans [Mol79] permettent de se débarrasser des gradients de densités importants, par exemple en utilisant des cellules de hauteur plus petite, ou amener le système à un état de non équilibre où les gradients n'ont pas encore eu le temps de s'établir.

D'une manière générale, les limites fondamentales et intrinsèques liées à la gravité sont dues au fait que, suffisamment proche du point critique, les propriétés du fluide varient de manière significative sur les hauteurs qui sont de l'ordre de la longueur de corrélation. La stratification reste d'ordre 1 jusqu'à une certaine proximité du point critique, mais en s'approchant du point critique elle devient de plus en plus importante. Des variations de densité d'ordre de 10% dans une cellule de l'ordre de 1cm de hauteur (ou 7% dans une cellule de 1mm) ont été observées [Mol79]. Ce qui se produit pour l'atmosphère à l'échelle du kilomètre devient donc sensible à l'échelle du laboratoire pour les fluides proches de leur point critique, et ce problème s'amplifie avec la proximité du point critique.

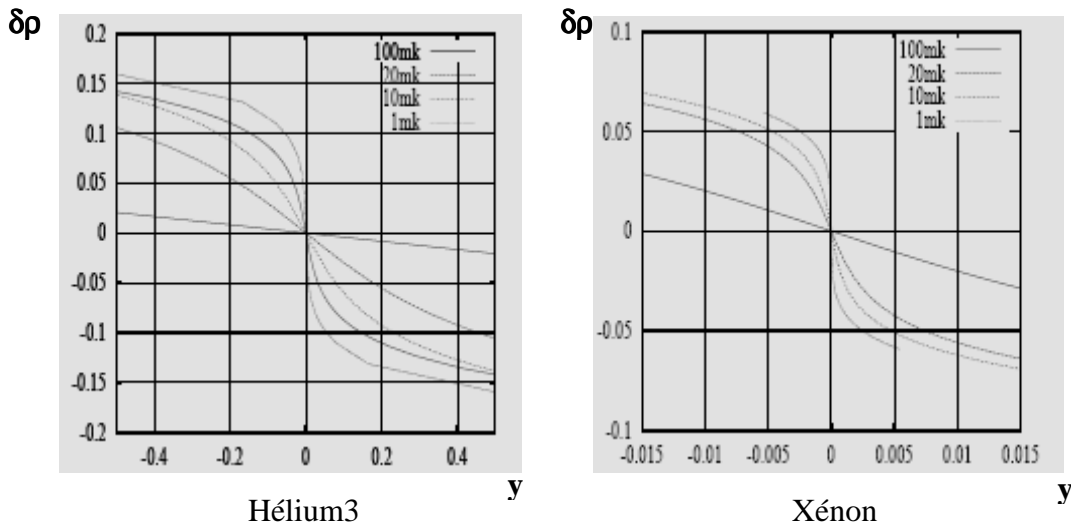


Figure 3.4: Différence de densité en fonction de la hauteur de la cellule, à divers écarts de la température critique pour les deux fluides hélium3 et Xénon [Mol79].

La figure 3.4 présente les variations de la densité, pour l'Hélium3 et le Xénon en fonction de la hauteur, pour un écart donné de température. Loin de la température critique, le profil est presque linéaire par rapport à la hauteur de la cellule, et il devient fortement non linéaire en s'approchant de cette température. Au voisinage de la température critique, la compressibilité du fluide est fonction de manière non négligeable de la densité et de la température.

Pour la température $T_c + 1 \text{ mK}$, la pente $\frac{d\rho}{dy}$ diverge à la hauteur $y=0$ où la densité vaut ρ_c .

Les amplitudes des gradients de densité ainsi réalisés dépendent principalement de la nature du fluide, de la hauteur totale de la cellule et de la distance au point critique.

3.6.2 Equations stratifiées

La stratification dont on a parlé dans le paragraphe précédent est gouvernée par un bilan hydrostatique entre le gradient de pression et la force de gravité, soit sous forme adimensionnelle :

$$\frac{dP}{dy} + \frac{\rho}{Fr^2} = 0 \quad (3.21)$$

où y est la coordonnée verticale, positive vers le haut.

L'équation (3.21) peut se mettre sous la forme suivante : $\frac{d\rho}{\rho} = -\frac{\chi_{T_2}}{Fr^2} dy$ et la résolution de cette dernière entraîne :

$$\rho_i = C_i \exp\left(-\frac{\chi_{T_2}}{Fr^2} y\right) \quad (3.22)$$

L'indice « i » correspond aux deux couches inférieure et supérieure (voir *Figure 3.1*), C_i correspond à la constante à déterminer.

Les deux conditions qui nous permettront de déterminer ces constantes sont les suivantes :

- la densité moyenne dans notre cavité est égale à la densité critique :

$$\rho_c = \frac{1}{H} \left[\int_0^h \rho_1(y) dy + \int_h^H \rho_2(y) dy \right] \quad (3.23)$$

- la différence de densité, à l'interface, entre les deux couches, est ϵ_ρ :

$$\rho_2(h^+) - \rho_1(h^-) = \epsilon_\rho \quad (3.24)$$

On en déduit les expressions des deux constantes C_1 et C_2 :

$$C_1 = \frac{-k - \epsilon_\rho \exp(kh)(\exp(-k) - \exp(-kh))}{\exp(-k) - 1} \quad \text{et} \quad C_2 = C_1 + \epsilon_\rho \exp(kh)$$

Avec $k = \frac{\chi_{T_2}}{Fr^2}$.

Afin de déterminer le champ de température, on écrit l'équation d'état dans les deux couches :

$$\begin{cases} P_1(\rho_1) = \frac{1}{\chi_{T_2}} [\rho_1 - \rho_0 + \beta_{p_2} (T_1 - T_0)] + P_0 \\ P_2(\rho_2) = \frac{1}{\chi_{T_2}} [\rho_2 - \rho_0 + \beta_{p_2} (T_2 - T_0)] + P_0 \end{cases} \quad (3.25)$$

L'indice « 0 » correspond ici à l'état initial.

On impose la continuité des pressions à l'interface ($y=h$) :

$$P_1(h^-) = P_2(h^+) \quad (3.26)$$

Par conséquent, on peut obtenir l'expression de la température T_1 dans le domaine inférieur, ce qui permet de fermer le problème :

$$T_1 = \frac{e^{-\frac{h}{y^*}}}{\beta_{p_2}} (C_2 - C_1) + T_2 \quad (3.27)$$

Les champs de densité et pression s'écrivent finalement sous leur forme simplifiée :

$$\begin{cases} \rho_1(y) = C_1 e^{-\frac{y}{y^*}} \\ \rho_2(y) = C_2 e^{-\frac{y}{y^*}} \end{cases} \quad (3.28)$$

$$\begin{cases} P_1(y) = \frac{1}{\chi_{T_2}} \left[C_1 e^{-\frac{y}{y^*}} - \rho_0 + \beta_{p_2} (T_1 - T_2) \right] + P_2 \\ P_2(y) = \frac{1}{\chi_{T_2}} \left[C_2 e^{-\frac{y}{y^*}} - \rho_0 \right] + P_2 \end{cases} \quad (3.29)$$

$$\text{où } y^* = \frac{Fr^2}{\chi_{T_2}} = \frac{1}{\chi'_{T_2} \rho'_c g' H'}, \quad C_1 = \frac{-\frac{1}{y^*} - \epsilon_\rho e^{\frac{h}{y^*}} (e^{-\frac{1}{y^*}} - e^{-\frac{h}{y^*}})}{\frac{1}{e^{-\frac{1}{y^*}} - 1}} \quad \text{et } C_2 = C_1 + \epsilon_\rho e^{\frac{h}{y^*}}.$$

Le paramètre y^* est un paramètre primordial dans l'interprétation des effets de stratification. Pour une valeur fixée de la densité critique ρ'_c , lorsque la compressibilité χ'_{T_2} ou la hauteur de la couche de fluide est importante, la stratification devient importante ou sinon elle a un effet négligeable. Ce paramètre nous servira dans l'interprétation des résultats du *Chapitre 6*.

En résumé, la stratification initiale affecte les champs de densité et de pression dans la direction verticale. En revanche, le champ de température reste constant dans chaque domaine.

3.7 Conclusion

Ce *Chapitre* nous a permis de poser les modèles mathématiques afin de les résoudre par la méthode numérique des volumes finis qui fait l'objet du prochain *Chapitre*. Nous avons utilisé l'ancienne méthode avec l'ancienne adimensionalisation [Ami05a] pour laquelle un filtrage acoustique a été élaboré. Il s'est avéré par la suite [Bout06] que ce filtrage ne s'avère pas nécessaire puisque la méthode des volumes finis est par nature filtrante (équations intégrales, par conséquent on utilise une formulation faible). Les nouveaux paramètres adimensionnels, même s'ils sont tous dépendants de la proximité du point critique, reflètent correctement le phénomène physique étudié.

CHAPITRE 4 : Méthode numérique des Volumes Finis

Dans ce *Chapitre*, nous allons développer la méthode numérique des volumes finis qui a été utilisée dans cette thèse.

Dans l'étude de l'hydrodynamique des fluides supercritiques, les propriétés thermophysiques deviennent soit très grandes (par exemple la compressibilité isotherme, le coefficient d'expansion thermique) ou très petites (par exemple la diffusivité thermique) qui entraînent des zones de forts gradients. La méthode numérique des volumes finis est bien adaptée à ce type de problème puisque l'on résout des équations intégrales (formulation faible des équations) qui, non seulement évite les problèmes de divergence dus à ces forts gradients, mais en plus filtrent naturellement les ondes acoustiques afin d'avoir un pas de temps plus grand et donc de réduire les coûts de calcul.

Nous allons présenter la discrétisation des équations de Navier-Stokes, développer le maillage utilisé dans cette étude ainsi que la discrétisation du terme de l'évolution temporelle de la pression dans l'équation de la conservation de l'enthalpie dans le cas où on ne filtre pas les ondes acoustiques.

4.1 Introduction

L'étude numérique des phénomènes de convection thermo-acoustique (accélération du transfert de chaleur pour un fluide normalement compressible), a été réalisée par Larkin [Lar67] puis Spradley *et al.* [Spr73, Spr75]. Dans le cas d'un gaz dont la variation importante des propriétés thermophysiques était prise en compte par la loi de Sutherland, Chenoweth & Paolucci [Che86] ont pu aborder le problème de la convection naturelle dans une cavité différentiellement chauffée, de rapport d'aspect variable, soumise à d'importantes différences de température horizontales. Ils ont identifié différents régimes convectifs, stationnaires ou oscillatoires, hors domaine de validité de l'approximation de Boussinesq.

Au début des années 90, avec la nouvelle investigation liée à la découverte de l'accélération critique, et parallèlement à l'accroissement de la puissance de supercalculateur, la simulation numérique directe des équations de Navier-Stokes d'un fluide proche de son point critique a connu un regain d'intérêt. Ainsi, le mécanisme de l'Effet Piston a pu être mis en évidence dans le cas monodimensionnel [Zap90, Zap94]. La communauté scientifique du point critique commence à s'interroger sur le devenir de l'Effet Piston sous gravité [Bon94]. Une simulation bidimensionnelle a été entreprise [Bra91, Bra93] avec des codes commerciaux pour des applications industrielles, et dans le même temps, les nouveaux résultats apportés par l'analyse asymptotique [Zap92] demandaient à être consolidés. En 1995, les premiers résultats [Ami95] montrent un outil numérique (méthode des volumes finis) capable d'aborder les problèmes de transfert de chaleur et de masse au sein des fluides supercritiques. Une étude systématique a permis de valider l'approche adoptée [Ami95, Ami97].

4.2 Méthode des Volumes Finis

La méthode numérique des Volumes Finis consiste à discrétiser le domaine géométrique de calcul en sous-domaines ou volumes de contrôle dont les faces suivent les lignes de coordonnées. Son principe est très simple, initialement développé dans le cas des écoulements compressibles par Godunov (1959) et Glimm (1965), puis répandu dans la communauté scientifique des mécaniciens par Patankar & Spalding [Pat72] dans les années 1970. Il repose sur le théorème de la divergence qui consiste à exprimer la conservation des flux d'une variable dans son volume de contrôle (V) délimité par sa surface (S), et contenant un point de discrétisation de l'inconnue ϕ et sur ce volume de contrôle les équations de transport sont intégrées. Cette formulation intégrale, ou formulation faible s'apparente par certains aspects à la formulation variationnelle de la méthode des éléments finis, mais aussi à celle des différences finies (de par sa discrétisation par rapport aux points voisins). Elle repose sur le théorème de la divergence de Gauss, pour une variable ϕ on a :

$$\int_{\vartheta} \text{div} \phi \, dV = \oint_{\partial \vartheta} \phi_S \cdot dS \quad (4.1)$$

où $\partial \vartheta$ désigne la frontière du domaine ϑ .

Il en résulte que pour chaque volume de contrôle, les hypothèses de discrétisation des formes conservatives s'appliqueront non pas sur l'inconnue elle-même, mais sur une interpolation à la frontière du domaine d'intégration. La discrétisation des équations en Volumes Finis utilise généralement l'arrangement du maillage décalé, les propriétés du champ thermodynamique telles que la température, la pression ou la densité sont calculées sur une grille (au centre de chaque volume de contrôle), alors qu'une autre grille est utilisée pour chacune des composantes de la vitesse (sur les faces du volume de contrôle, voir *figure 4.1*)

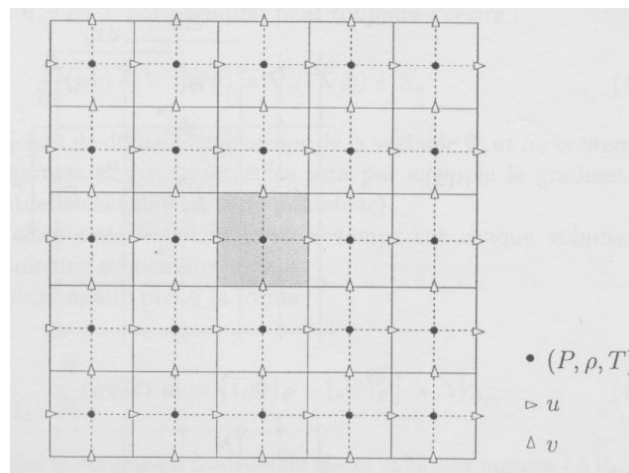
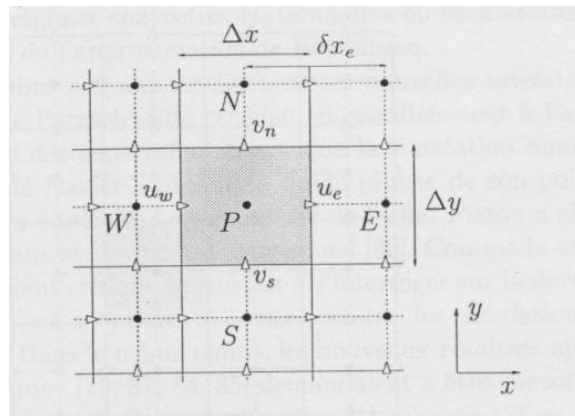


Figure 4.1 : Maillage cartésien décalé en situation bidimensionnelle, et localisation des inconnues.

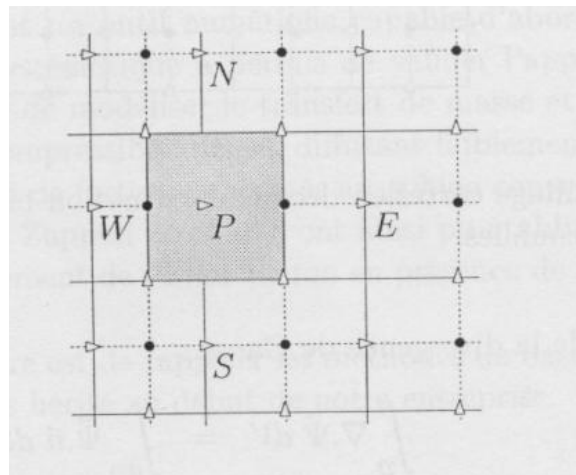
Cette technique du maillage décalé a pour avantage l'accessibilité directe des composantes de la vitesse sans interpolation aux faces des volumes de contrôle des champs scalaires pour le calcul des flux de convection. Elle évite aussi un champ de pression oscillatoire dans un maillage collocatif [Pat72], et donc une solution non-physique. Des méthodes récentes ont cependant été proposées sur des maillages collocatifs par Rhie & Chow [Rhi83] qui éliminent les problèmes d'oscillations néfastes au moyen d'interpolation appropriées [Thi90].

Nous désignerons les notations habituelles de la méthode des volumes finis, à savoir que pour chaque volume de contrôle, le point P désignera le point de discrétisation de la variable, le point E (East) le point correspondant à la cellule qui se trouve directement à l'Est de la cellule du point P et de même pour W (West), N (North) et S (South). Les lettres minuscules (e, w, n, s) correspondent aux faces de la cellule du point P.

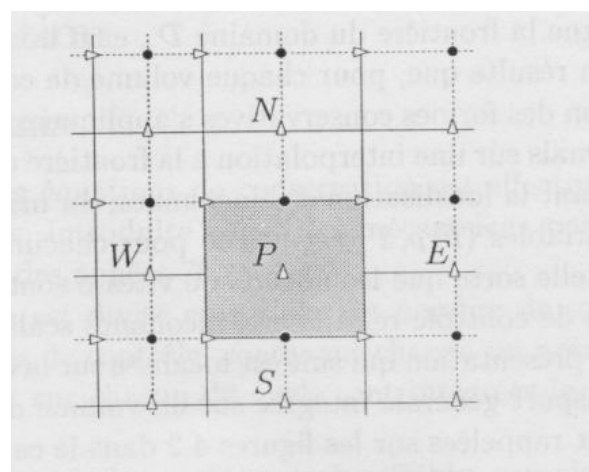
L'arrangement relatif aux différentes variables est schématisé sur la *Figure 4.2*.



(a)



(b)



(c)

Figure 4.2 : Volumes de contrôle pour (a) les scalaires, (b) vitesse u , et (c) vitesse v

Le champ ϕ ($=u, v, T, P$) satisfait à l'équation de transport générique suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho \vec{v}\phi) = \nabla(\Gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (4.2)$$

où Γ est le coefficient de diffusion anisotrope de la variable ϕ , S_ϕ est le terme source et $\vec{v}(u, v)$ est le champ de vecteur vitesse.

En intégrant le premier terme de l'équation (4.2) dans le temps sur le volume de contrôle V_{ϕ_P} (sous domaine élémentaire), on obtient :

$$\int_{t} \int_{V_{\phi_P}} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dV dt = \left\{ (\rho\phi)_P - (\rho\phi)_P^0 \right\} \times V_{\phi_P} \quad (4.3)$$

où V_{ϕ_P} désigne le volume de contrôle de ϕ_P et V_{ϕ_P} sa mesure ($V_{\phi_P} = \Delta x \Delta y$ dans le cas 2D, voir *Figure 4.2*), et l'exposant 0 indique que la quantité est considérée au pas de temps précédent.

Grâce au théorème de la divergence de Gauss, et dans le cas bidimensionnel, l'intégration spatio-temporelle du terme convectif s'écrit [Pat72] :

$$\int_{t} \int_{V_{\phi_P}} \nabla \cdot (\rho \vec{v}\phi) dV dt = \left\{ (F_e \phi_e - F_w \phi_w) + (F_n \phi_n - F_s \phi_s) \right\} \times \Delta t \quad (4.4)$$

où $F_e = (\rho u)_e \Delta y$ représente le coefficient convectif (connu) à la face Est du volume de contrôle (Δy est la longueur de cette face, voir *Fig. 4.2*), $F_w, F_n,$ et F_s représentent les flux convectifs des autres faces (ouest, nord et sud). Ces coefficients sont déterminés par interpolation et permettent de calculer le flux total intégré sur la frontière du volume de contrôle.

Par ailleurs, l'intégration temporelle de ce terme est effectuée par le schéma implicite d'Euler qui est robuste et n'est pas soumis au critère de stabilité d'un schéma explicite [Pat80, Pey83, Hir88].

Dans l'équation (4.4), l'inconnue ϕ n'est pas encore exprimée sur son domaine de définition, les nœuds de discrétisation. L'interpolation assurant cette opération dépendra du choix du schéma de discrétisation spatiale.

Le terme diffusif de l'équation de transport s'écrira de la même manière :

$$\int_{t} \int_{V_{\phi_P}} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV dt = \left\{ \left(\Gamma_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \Gamma_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right) \times \Delta y + \left(\Gamma_n \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \Gamma_s \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right) \times \Delta x \right\} \times \Delta t \quad (4.5)$$

On introduit la variable J définie aux frontières du volume de contrôle, par exemple à l'Est par :

$$J_e = F_e \phi_e - \Gamma_e \Delta y \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e, \quad (4.6)$$

L'équation (4.2) discrétisée pourra s'écrire dans le cas bidimensionnel cartésien :

$$\left(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0 \right) \times \frac{V_{\phi_P}}{\Delta t} + J_e - J_w + J_n - J_s = S \quad (4.7)$$

S désigne l'ensemble des termes sources discrétisés ($S = S_{\phi} \Delta x \Delta y$).

Dans le cas des équations de Navier-Stokes, on doit aussi résoudre l'équation de continuité.

L'intégration de cette équation sur le volume de contrôle de ϕ conduit à :

$$\left(\rho_P - \rho_P^0 \right) \times \frac{V_{\phi_P}}{\Delta t} + F_e - F_w + F_n - F_s = 0 \quad (4.8)$$

Si on effectue une combinaison de ces deux dernières équations [(4.7)- ϕ_P x (4.8)], on obtient

l'équation suivante pour (ϕ_P) :

$$\rho_P^0 \frac{V_{\phi_P}}{\Delta t} \left(\phi_P - \phi_P^0 \right) + (J_e - F_e \phi_P) - (J_w - F_w \phi_P) + (J_n - F_n \phi_P) - (J_s - F_s \phi_P) = S \quad (4.9)$$

On peut écrire l'équation précédente sous la forme compacte suivante :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (4.10)$$

Il reste à déterminer les coefficients a_P, a_E, a_W, a_N, a_S et b.

4.3 Schémas de discrétisation

L'expression des coefficients du système linéaire (4.10) dépend du schéma de discrétisation utilisé. En posant la variable par exemple à la face Est $De = \frac{\Gamma_e \Delta y}{\delta x_e}$ avec $\delta x_e = x_{\phi_E} - x_{\phi_P}$ (voir Fig. 4.2.a) et $P = \frac{F}{D}$ qui désigne un nombre de Péclet de maille, on peut alors exprimer les coefficients de l'équation (4.10) sous la forme générale suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} a_E = D_e A(|P_e|) + [-F_e, 0] \quad ; \quad a_W = D_w A(|P_w|) + [F_w, 0] \\ a_N = D_n A(|P_n|) + [-F_n, 0] \quad ; \quad a_S = D_s A(|P_s|) + [F_s, 0] \\ a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 \quad ; \quad a_P^0 = \rho_P^0 \frac{V_{\phi_P}}{\Delta t} \quad ; \quad b = S + a_P^0 \phi_P^0 \end{array} \right. \quad (4.11)$$

où l'expression entre crochets représente le maximum entre les quantités et où $A(|P|)$ est une fonction caractéristique du schéma choisi, dont l'expression est donnée pour quelques uns d'entre eux sur le tableau 4.1 [Pat80].

Schéma	$A(P)$
Différences centrées	$1 - 0.5 P $
Amont 1^{er} ordre	1
Exponentiel	$\frac{ P }{\exp(P) - 1}$
Hybride	$[0.1 - 0.5 P]$
Power Law	$[0, (1 - 0.1 P ^5)]$

Tableau 4.1 : La fonction $A(|P|)$ pour les différents schémas.

Nous allons brièvement développer ces relations qui sont primordiales dans la discrétisation des équations et le lecteur intéressé trouvera plus de détails dans [Pat80].

- Dans le cas de différences centrées, on écrira par exemple :

$$\phi_e = \frac{1}{2}(\phi_E + \phi_P) \quad (4.12)$$

et :

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_e = \frac{\phi_E - \phi_W}{\delta x_e} \quad (4.13)$$

Ceci conduit à :

$$a_E = D_e - \frac{F_e}{2} \quad (4.14)$$

et donc à l'expression de $A(|P|)$ qui est reportée sur le *Tableau 4.1*.

- De même pour le schéma Upwind (Amont 1^{er} ordre) :

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_E & \text{si } F_e < 0 \\ \phi_P & \text{si } F_e > 0 \end{cases} \quad (4.15)$$

Par conséquent :

$$a_E = D_e + [0, -F_e] \quad (4.16)$$

- Le schéma exponentiel a une définition plus raffinée, et mérite d'être rappelé en détail.

Considérons le problème monodimensionnel de convection-diffusion stationnaire en l'absence de terme source. L'équation de transport de la variable ϕ s'écrira :

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx}\left(\Gamma \frac{d\phi}{dx}\right) \quad (4.17)$$

avec :

$$\phi(x=0) = \phi_0 \quad \text{et} \quad \phi(x=L) = \phi_L \quad (4.18)$$

La solution de cette équation est telle que :

$$\frac{\phi - \phi_0}{\phi_L - \phi_0} = \frac{\exp(P_x/L - 1)}{\exp(P) - 1} \quad (4.19)$$

où :

$$P = \frac{\rho u L}{\Gamma} \quad \text{et} \quad P_x = \frac{\rho u \delta x}{\Gamma} \quad (4.20)$$

On introduit l'expression suivante :

$$J = \rho u \phi - \Gamma \frac{d\phi}{dx} \quad (4.21)$$

Et si on intègre l'équation (4.17) sur un volume de contrôle, on a :

$$J_e - J_w = 0 \quad (4.22)$$

En utilisant la solution dérivée en (4.19) appliquée entre les nœuds P et E, avec :

$$P_e = \frac{(\rho u)_e \delta x_e}{\Gamma_e} = \frac{F_e}{D_e} \quad (4.23)$$

On obtient l'expression de J_e :

$$J_e = F_e \left(\phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{\exp(P_e) - 1} \right) \quad (4.24)$$

La substitution de cette expression et de celle de J_w (obtenue de la même manière), dans l'équation (4.22), on a finalement :

$$F_e \left(\phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{\exp(P_e) - 1} \right) - F_w \left(\phi_W + \frac{\phi_W - \phi_P}{\exp(P_w) - 1} \right) = 0 \quad (4.25)$$

et sous forme standard :

$$a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_w \phi_w \quad (4.26)$$

$$\text{avec } \begin{cases} a_E = \frac{F_e}{\exp(F_e/D_e) - 1} = D_e A(|P_e|) + [-F_e, 0] \\ a_W = \frac{F_w \exp(F_w/D_w)}{\exp(F_w/D_w) - 1} = D_w A(|P_w|) + [F_w, 0] \\ a_P = a_E + a_W + (F_e - F_w) \end{cases} \quad (4.27)$$

Si de plus on avait combiné l'équation de continuité discrétisée avec l'équation (4.22), on aurait :

$$(J_e - F_e \phi_P) - (J_w - F_w \phi_P) = 0 \quad (4.28)$$

et

$$a_P = a_E + a_W \quad (4.29)$$

Le schéma exponentiel discrétise l'ensemble des termes convectifs et diffusifs, contrairement aux schémas habituels tels que les schémas décentré et amont. Cette discrétisation concerne l'expression des coefficients \mathbf{J} aux faces des volumes de contrôle. Ceux-ci sont interpolés entre les deux nœuds que sépare la face de telle sorte que l'équation stationnaire 1D de convection-diffusion soit vérifiée entre ces deux points, et ce, indépendamment du problème que l'on résout.

Les deux schémas hybride [Spa72] et loi de puissance (PLDS, Power Law Differencing Scheme, [Pat85] qui est celui qu'on a utilisé dans cette étude), sont dérivés directement du schéma exponentiel. Ils reposent tous deux sur l'approximation des coefficients où apparaît l'exponentielle, qui est coûteuse en temps de calcul. En fonction du nombre de Péclet, le schéma hybride effectue une approximation linéaire par morceaux de la fonction $A(|P|)$ et le schéma Power Law une approximation polynomiale [Pat80].

4.4 Conditions aux limites

Les conditions aux limites interviennent sur l'expression des coefficients de l'équation discrétisée dans le cas où un volume de contrôle coïncide avec la frontière du domaine.

Une méthode pratique du point de vue numérique de la programmation est d'ajouter à \mathbf{a}_p et \mathbf{b} un terme générique prenant en compte séparément la contribution des conditions aux limites. On écrira :

$$\begin{cases} \mathbf{a}_p = \mathbf{a}_p + \tilde{\mathbf{a}}_p \\ \mathbf{b} = \mathbf{b} + \tilde{\mathbf{b}} \end{cases} \quad (4.30)$$

Les termes $\tilde{\mathbf{a}}_p$ et $\tilde{\mathbf{b}}$ sont nuls pour tous les points de discrétisation dont le volume de contrôle ne possède pas de limite commune avec la frontière du domaine de calcul. Ces deux expressions prennent différentes formes selon le type de conditions aux limites. Par exemple, si à la limite Ouest du domaine, on impose une condition de Dirichlet ($\phi = \phi_0$) et si on utilise le schéma amont du premier ordre pour l'approximation du terme diffusif, alors :

$$\phi_w = \phi_0 \Rightarrow \Gamma_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = D_w (\phi_p - \phi_0) \quad (4.31)$$

$$\text{D'où :} \quad J_w = F_w \phi_0 - D_w (\phi_p - \phi_0) \quad (4.32)$$

$$\text{Et par conséquent :} \quad \begin{cases} \tilde{\mathbf{a}}_p = F_w + D_w \\ \tilde{\mathbf{b}} = (F_w + D_w) \times \phi_0 \end{cases} \quad (4.33)$$

Puisque ϕ_w est hors du domaine, on impose $a_w = 0$.

Pour une condition de type Neumann à la limite Est par exemple, on écrira de la même manière :

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = m_1 \Rightarrow \frac{\phi_e - \phi_p}{\delta x} = m_1 \quad (4.34)$$

On a alors :

$$\begin{cases} \phi_e = \phi_p + \delta \mathbf{x} \times \mathbf{m}_1 \\ \mathbf{J}_e = \mathbf{F}_e(\phi_p + \delta \mathbf{x} \times \mathbf{m}_1) - \Gamma_e \mathbf{m}_1 \end{cases} \quad (4.35)$$

avec :

$$\begin{cases} \tilde{\mathbf{a}}_p = 0 \\ \tilde{\mathbf{b}} = -(\mathbf{F}_e + \mathbf{D}_e) \times \delta \mathbf{x} \times \mathbf{m}_1 \\ (\mathbf{a}_E = 0) \end{cases} \quad (4.36)$$

4.5 Couplage vitesse pression

L'équation du mouvement discrétisée peut être exprimée sous la forme (4.10) après la linéarisation de son terme convectif, le terme \mathbf{b} contiendra un gradient de pression discrétisé. Si le champ de pression est connu, on peut alors escompter qu'une procédure itérative permette d'accéder au champ de vitesse exact. Mais la pression est inconnue, et on ne dispose pas d'une équation évidente pour sa détermination.

La méthode utilisée pour résoudre ce problème repose sur l'idée que, lorsque le champ de pression correct est injecté dans l'équation du mouvement, le champ de vitesse résultant doit satisfaire l'équation de continuité. Cette méthode a été mise au point par Patankar & Spalding [Pat72] dans les années 70 : c'est l'algorithme SIMPLE (Semi-Implicite Method for Pressure Linked Equations).

Nous rappelons ici le détail dans le cas monodimensionnel, dans la mesure où nous y ferons explicitement référence par la suite, comme à SIMPLER (SIMPLE-Revised) [Pat80], que nous décrivons également.

Si on extrait le gradient de pression du terme source, dans le cas d'une grille décalée (*Figure 4.1*), les équations du mouvement discrétisées pour les deux nœuds de vitesse bordant le volume de contrôle d'un nœud de pression P_p , peuvent s'écrire :

$$\begin{cases} \mathbf{a}_w \mathbf{u}_w = \sum \mathbf{a}_{nb_w} \mathbf{u}_{nb_w} + \mathbf{b}_w + (P_w - P_p) \\ \mathbf{a}_e \mathbf{u}_e = \sum \mathbf{a}_{nb_e} \mathbf{u}_{nb_e} + \mathbf{b}_e + (P_p - P_E) \end{cases} \quad (4.37)$$

où $\sum a_{nb} u_{nb}$ désigne la somme des $a_i u_i$ immédiatement voisins du nœud de vitesse considéré (w ou e). On pose :

$$\begin{cases} P = P^* + P' \\ u = u^* + u' \end{cases} \quad (4.38)$$

où les champs P^* et u^* sont les prédictions de P et u , P' et u' leurs corrections.

Connaissant le champ P^* (valeur prédite), le champ u^* est donné par :

$$a_w u_w^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + b_w + (P_w^* - P_P^*) \quad (4.39)$$

Donc :

$$a_w u_w' = \sum a_{nb} u_{nb}' + (P_w' - P_P') \quad (4.40)$$

où 'nb' (neighbour) désigne les points voisins.

Si on néglige $\sum a_{nb} u_{nb}'$ dans l'équation (4.40), on obtient alors l'équation de correction de vitesse :

$$u_w' = d_w (P_w' - P_P') \quad \text{avec} \quad d_w = \frac{1}{a_{w_u}} \quad (4.41)$$

Par conséquent, d'après l'équation (4.38) :

$$u_w = u_w^* + d_w (P_w' - P_P') \quad (4.42)$$

$$u_e = u_e^* + d_e (P_P' - P_E') \quad (4.43)$$

Pour l'équation de continuité intégrée sur un volume de contrôle, elle s'écrit:

$$\left(\rho_P - \rho_P^0 \right) \frac{V_u}{\Delta t} + (\rho u)_e - (\rho u)_w = 0 \quad (4.44)$$

En se basant sur les équations (4.42), on peut en déduire l'équation de correction de pression :

$$a_p P'_p = a_E P'_E + a_W P'_W + b \quad (4.45)$$

avec :

$$\begin{cases} a_E = \rho_e d_e & , & a_W = \rho_w d_w \\ a_p = a_E + a_W \\ b = (\rho_P^0 - \rho_P) \frac{V_u}{\Delta t} + (\rho u^*)_w - (\rho u^*)_e \end{cases} \quad (4.46)$$

L'équation précédente permettra de remonter au champ de vitesse. On itèrera avec $P^*=P$ jusqu'à convergence, les autres variables (ρ, T, \dots) étant actualisées à chaque itération.

En abandonnant les termes $\sum a_{nb} u'_{nb}$ lors de la dérivation de l'équation de correction de pression dans SIMPLE, on impose implicitement à P' un rôle exagéré vis-à-vis de la pression P , étant donnée que c'est P' seule qui doit assurer la correction de vitesse permettant de satisfaire l'équation de continuité [Pat80]. En 1972, Patankar [Pat72] a mis au point l'algorithme SIMPLER [Pat72] où l'équation de correction de pression sert uniquement à corriger la vitesse, et non la pression, qui est obtenue d'une nouvelle manière.

Soit u^* la prédiction de vitesse, égale à la dernière vitesse connue. On définit \hat{u} :

$$\hat{u}_e = \frac{\sum a_{nb} u_{nb}^* + b}{a_e} \quad (4.47)$$

ce qui entraîne par analogie à l'équation (4.45) :

$$\begin{cases} u_e = \hat{u}_e + d_e (P_p - P_E) \\ u_w = \hat{u}_w + d_w (P_w - P_p) \end{cases} \quad (4.48)$$

L'équation de continuité (4.44) conduit alors à l'équation de pression :

$$a_p P_p = a_E P_E + a_W P_w + b \quad (4.49)$$

avec :

$$\begin{cases} a_E = \rho_e d_e & , & a_W = \rho_w d_w \\ a_P = a_E + a_W \\ b = (\rho_P^0 - \rho_P) \frac{V_u}{\Delta t} + (\rho \hat{u})_w - (\rho \hat{u})_e \end{cases} \quad (4.50)$$

Connaissant le champ prédit P^* , on obtient la prédiction de la vitesse :

$$a_e u_e^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + b + (P_P^* - P_E^*) \quad (4.51)$$

En conservant l'équation de correction de vitesse de SIMPLE, on écrit alors :

$$u_e = u_e^* + d_e (P_P' - P_E') \quad (4.52)$$

ce qui donne la correction de pression (équation 4.45) :

$$a_P P_P' = a_E P_E' + a_W P_W' + b \quad (4.53)$$

avec :

$$b = (\rho_P^0 - \rho_P) \frac{V_u}{\Delta t} + (\rho u^*)_w - (\rho u^*)_e \quad (4.54)$$

On en déduit la vitesse mais on ne corrige pas la pression. Cette démarche représente l'algorithme SIMPLE Révisé et a été utilisé dans cette étude.

4.6 Le maillage

En raison de la faible valeur du coefficient de diffusivité thermique des fluides critiques, même dans une cavité de quelques millimètres, le maillage a été raffiné dans les régions du domaine où les phénomènes diffusifs occupaient un rôle important (parois ou interface, voir *Chapitres 5 et 6*).

Les épaisseurs de diffusion se sont avérées parfois si fines qu'on a utilisé une répartition des nœuds de discrétisation en loi de puissance.

Si on raffine à proximité de 0 et L et au voisinage de l'interface dans notre configuration type Rayleigh-Taylor, le maillage monodimensionnel des nœuds du champ φ ,

selon une série géométrique de raison p , les lois de maillage correspondants (dans le cas où l'interface se situe à mi-hauteur de la cavité) seront les suivants :

$$\begin{cases} x(i) = \frac{L}{2} \times \left(\frac{i-1}{n_{xm}-1} \right)^P, & i = 1, \dots, n_{xm} \\ x(i) = L - \frac{L}{2} \times \left(\frac{n_x - i}{n_x - n_{xm}} \right)^P, & i = n_{xm} + 1, \dots, n_x \end{cases} \quad (4.55)$$

Dans le cas d'un maillage décalé (qui est utilisé dans cette étude), le nombre de points de discrétisation de la vitesse horizontale u étant n_x qui est impair alors n_{xm} est la partie entière de sa moitié plus 1 ($n_{xm} = \bar{E}(n_x/2) + 1$). Les nœuds des variables scalaires (P, ρ, T) (de 1 à $n_x - 1$) sont alors positionnés au milieu de chaque couple de points voisins de u . L'inhomogénéité du maillage nécessite des interpolations adéquates lors de l'expression, notamment, de certaines grandeurs aux interfaces entre les volumes de contrôle.

4.7 Solveur

La discrétisation des équations de transport nous a conduites à des systèmes linéaires de la forme (4.10). Dans le cas monodimensionnel, leurs matrices étant tridiagonales, on les inverse de façon exacte au moyen de l'algorithme de Thomas TDMA (Tri Diagonal Matrix Algorithm [Pat80, Pey83]). En situation bidimensionnelle, on a besoin d'une méthode itérative en raison des dimensions trop importantes des matrices. De plus, une méthode robuste est nécessaire vu que le raffinement important du maillage dans certaines régions génère des déséquilibres importants entre les coefficients des matrices. Cet algorithme TDMA a été utilisé de façon itérative dans le cas 2D et a donné des résultats satisfaisants même s'il est coûteux en temps de calcul. D'autres alternatives, certainement moins coûteuses en temps de calcul peuvent être mises en place comme le Bi-CGSTAB ou l'algorithme Multi-Grille [Fer99].

Remarque : La norme du résidu $\|R\|$ dans le cas bidimensionnel (tel calculé dans ce travail) peut s'écrire de la façon suivante:

$$\|R\| = \left[\sum (a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b_P - a_P \phi_P)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.56)$$

4.8 Filtrage acoustique

Dans le *Chapitre 3*, nous avons établi les équations dans les cas où on filtre les ondes acoustiques et où on ne filtre pas ces ondes. Comme pour les fluides compressibles (équation d'état de gaz parfait [Pao82]), le filtrage acoustique s'est avéré utile afin de réduire le pas de temps lorsque la description des phénomènes acoustiques n'est pas nécessaire. Dans ce cas, dans les équations (3.14-3.17), la pression ($P^{(0)}$, pression thermodynamique) qui intervient dans les équations d'état et d'énergie est une pression spatialement homogène. En revanche, la 2^{ème} composante ($P^{(1)}$, pression dynamique) de la pression qui intervient dans l'équation du mouvement est une pression qui varie en fonction du temps et de l'espace. Par conséquent, l'intégration temporelle de $\frac{dP}{dt}$ dans l'équation d'énergie n'est pas difficile.

En revanche, dans le cas où on ne filtre pas les ondes acoustiques (la méthode des volumes finis, par sa formulation intégrale des équations, filtre naturellement les équations 3.20), la dérivée temporelle particulière de la pression s'écrit : $\frac{dP}{dt} = \frac{\partial P}{\partial t} + \underline{\underline{\vec{V} \cdot \vec{\nabla} P}}$.

Donc, l'équation d'énergie s'écrit alors :

$$\rho \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T \right) = \beta_{p_2} Ec T \left(\frac{\partial P}{\partial t} + \underline{\underline{\vec{V} \cdot \vec{\nabla} P}} \right) + \frac{1}{Re Pr} \vec{\nabla} \cdot [\vec{\nabla} T] + \frac{Ec}{Re} \Phi \quad (4.57)$$

Par conséquent, il faudra discrétiser le terme convectif de la dérivée particulière temporelle de cette pression sachant que la vitesse et la pression ne sont pas définies sur le même maillage (maillage décalé).

4.9 Conclusion

Nous avons présenté dans ce *Chapitre* la méthode des volumes finis avec l'algorithme SIMPLER et le schéma de loi de puissance qui ont été utilisés dans cette étude. Le système linéaire obtenu est résolu par l'algorithme TDMA. Le maillage utilisé est non uniforme sur les bords ainsi qu'à l'interface (dans notre configuration type Rayleigh-Taylor).

Grâce à sa formulation variationnelle, la méthode des volumes finis se prête bien aux phénomènes physiques au sein des fluides supercritiques : la forte compressibilité ou la faible

diffusion de la chaleur entraînent des zones de forts gradients. De plus, il ne semble pas nécessaire de filtrer les ondes puisque grâce à l'intégration des équations, la méthode des volumes finis filtre naturellement ces ondes.

Dans les deux *Chapitres* suivants, nous allons appliquer la méthode qui vient d'être décrite aux instabilités apparaissant aux « interfaces » de deux couches d'un même fluide supercritique. Dans le *Chapitre 5*, nous allons développer les résultats avec le filtrage acoustique et dans le *Chapitre* suivant le cas sans filtrage acoustique en incluant l'effet de la stratification dans la stabilité d'un tel système.

CHAPITRE 5 : Résultats dans le cas sans stratification et avec filtrage acoustique

Ce *Chapitre* a pour objectifs de développer les résultats avec la méthode de filtrage acoustique dans le cas dimensionnel dans la configuration de type Rayleigh-Taylor. Cette première étude ne prend pas en compte la stratification initiale.

Afin de valider le code numérique [Ami95] détaillé dans le *Chapitre 4*, nous avons considéré le cas du problème de stabilité de Rayleigh-Bénard incompressible dans l'approximation de Boussinesq. Nous ne détaillerons pas ce cas test dans ce *Chapitre*, le lecteur intéressé pourra se référer à l'*annexe 2*.

5.1 Validation du code : instabilités de Rayleigh-Bénard en fluide incompressible

Lorsqu'une couche de fluide est chauffée par le bas et soumise à la pesanteur, les particules fluides plus chaudes et donc les moins denses, ont tendance à monter mues par la poussée d'Archimède. Ce mouvement est amplifié par le fait que le fluide rencontre en montant, des zones de plus en plus denses. Cette situation est potentiellement instable, si la différence de température entre le bas et le haut est suffisamment importante. Le mouvement s'installe dans la couche de fluide. Il s'agit de l'instabilité de *Rayleigh-Bénard* bien décrite dans le *Chapitre 2*.

Dans cette première étude, nous avons tenté de vérifier avec la littérature, les courbes de seuil en fonction du rapport d'aspect dans le cas stationnaire des fluides incompressibles, dans l'approximation de Boussinesq : la variation de densité avec la température est supposée linéaire dans le domaine de température considéré. L'équation d'état du fluide est donc (pour un faible écart de température δT) : $\rho = \rho_0(1 - \beta_p \delta T)$, où β_p est le coefficient d'expansion thermique supposé constant et ρ_0 est la densité initiale.

Nous avons utilisé la méthode numérique des volumes finis (telle décrite dans le *Chapitre 4*) afin de résoudre les équations de Navier-Stokes couplées avec celle de l'énergie dans l'approximation de Boussinesq. Afin de modéliser cette situation de manière schématique, on a étudié la stabilité d'un fluide compris entre deux plaques de rapport de forme $\Gamma = \frac{L}{d}$ (L est la largeur de la cavité et d est la distance entre les deux parois, voir *Figure 5.1*) et soumis à une différence de température initiale correspondant à une surchauffe par le bas (la paroi inférieure est plus chaude que la paroi supérieure). La température de la paroi supérieure est T_2 et la température de la paroi inférieure est T_1 .

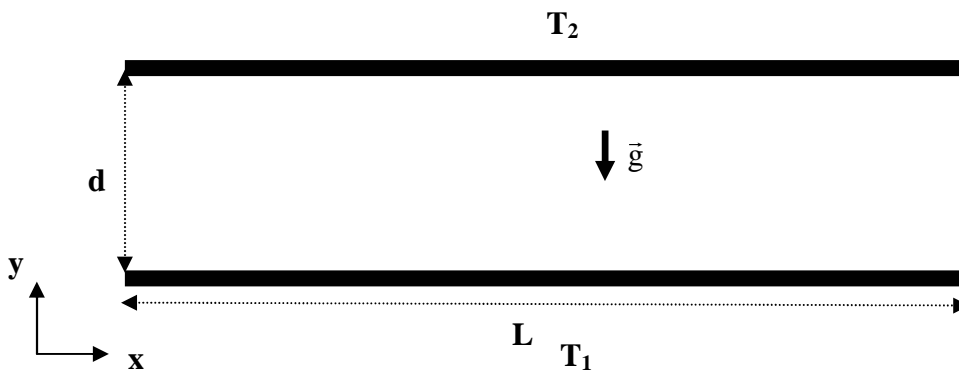


Figure 5.1: Fluide confiné entre deux parois infinies et soumis à une différence de température $\Delta T = T_1 - T_2$ (chauffage par le bas).

Après plusieurs tests sur l'influence du maillage, nous présentons les résultats dans le cas d'un maillage uniforme de (200×132) et pour un rapport de forme de $\Gamma = 2$ (cavité rectangulaire fermée). Nous avons choisi un maillage uniforme afin de capter les phénomènes physiques dans tout le volume et ce maillage est assez fin pour obtenir des résultats assez précis. Les résultats sur l'effet de maillage et ceux en fonction du rapport de forme se trouvent en *annexe 2*.

La courbe de bifurcation stationnaire présentée sur la *Figure 5.2* montre l'évolution du module de la vitesse adimensionnelle au centre de la cavité en fonction du nombre de Rayleigh dans une cavité rectangulaire. Pour $Ra < Ra_c$, le fluide est en équilibre hydrostatique, le champ de température est purement diffusif, la vitesse est nulle en tout point, alors que pour $Ra > Ra_c$, il y a formation de rouleaux de convection.

La valeur du Rayleigh critique (**Rac**) pour une cavité de rapport de forme $\Gamma=2$ est calculée numériquement grâce à sa forme parabolique et comparée à la valeur issue de la littérature $Rac \cong 2220$ [Zie82]. La valeur numérique que nous avons trouvée du Rayleigh critique est de l'ordre de 2200, avec un écart relatif de l'ordre de 1% (voir *annexe 2*).

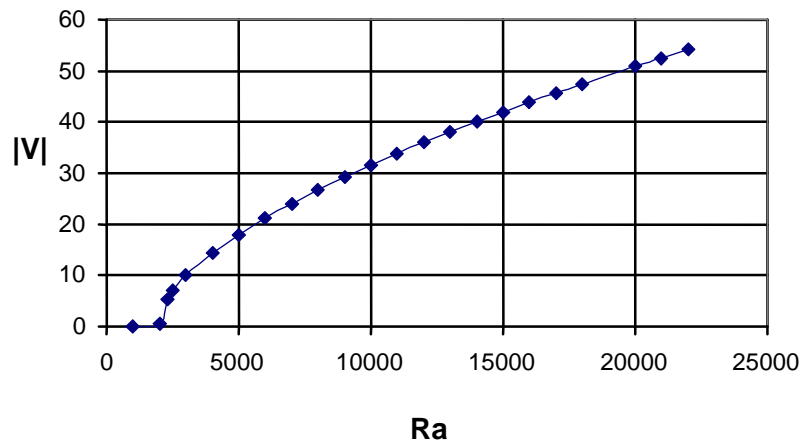


Figure 5.2 : Variation du module de la vitesse adimensionnelle au centre de la cavité en fonction du nombre de Rayleigh pour une cavité de rapport de forme de 2.

Nous avons représenté sur la *Figure 5.3* $|V|=f(Ra-Rac)$ en échelle log-log, et on voit apparaître une droite de pente $1/2$, caractéristique d'une telle bifurcation puisque la vitesse croît comme la racine carrée de l'écart au point de bifurcation.

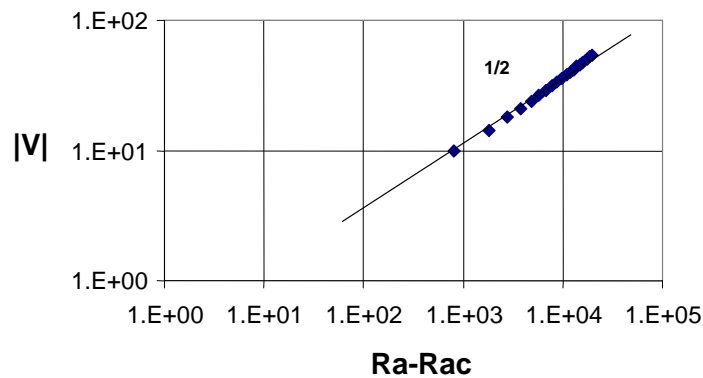


Figure 5.3 : Pente de variation de la vitesse en fonction de $(Ra-Rac)$ en échelle logarithmique.

Sur la *Figure 5.4*, nous avons représenté le champ de température superposé à l'écoulement pour un nombre de $(Ra=6000)$, un nombre de Prandtl $(Pr=0,7)$ et pour un rapport de forme $(\Gamma=2)$. On voit bien les deux rouleaux de convection caractéristiques de

l'instabilité Rayleigh-Bénard pour ce rapport de forme. L'étude détaillée en fonction du rapport de forme est décrite dans l'annexe 2.

Les résultats de cette première étude des instabilités de Rayleigh-Bénard en fluide incompressible dans l'approximation de Boussinesq ont permis de tester le code numérique avec les résultats de la littérature [Zie82] pour différents rapports de forme et différents nombres de Rayleigh. Le nombre de Rayleigh critique pour un rapport de forme de 2 correspond bien à celui trouvé par la littérature. Les conditions de validation dans le cas incompressible ont donc été réunies pour notre code. Nous allons l'appliquer pour les fluides compressibles à proximité de leur point critique.

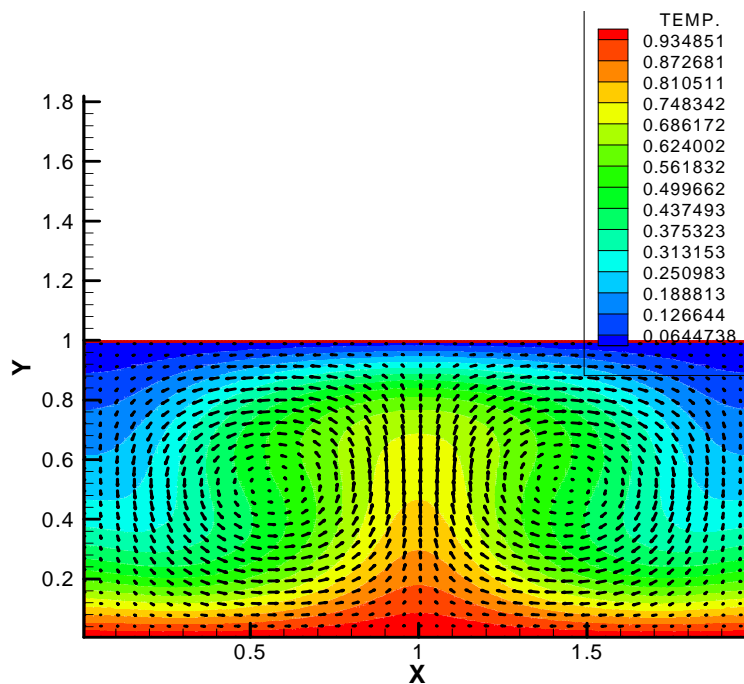


Figure 5.4 : Contour de température adimensionnel superposé au champ des vecteurs vitesses pour un maillage 200*132, Ra=6000, Pr=0.7, $\Gamma=2$.

5.2 Etude de la stabilité de deux couches d'un fluide supercritique placée en configuration instable avec filtrage acoustique

5.2.1 Contexte de l'étude

Dans le *Chapitre 2*, nous avons développé les différentes lois de dispersion dans le cas de la configuration de Rayleigh-Taylor. Nous allons rappeler brièvement le contexte de cette étude (configuration géométrique) et la raison pour laquelle notre configuration de deux

couches d'un même fluide pur supercritique est analogue à celle de Rayleigh-Taylor, classiquement définie dans le cas de deux fluides distincts incompressibles.

La couche de diffusion de la paroi supérieure qui est plus lourde que le fluide situé au dessous d'elle donne naissance à des gouttes (voir *Figure 2.2*, page 34) par une instabilité gravitationnelle évocatrice d'un mécanisme de Rayleigh-Taylor, et la tension de surface étant à priori nulle (fluide supercritique pur monophasique), nous nous sommes orientés vers une instabilité de front de diffusion, semblable à celle que l'on connaît dans les fluides miscibles [Duf62, Kur95]. Cette instabilité de front de diffusion est due au fait que, dans notre cas, la diffusion thermique est très faible. L'analogie est par conséquent évidente : il suffit de remplacer le coefficient de diffusion moléculaire dans les relations de dispersion de [Duf62, Kur95] par le coefficient de diffusion thermique et de comparer ainsi les taux de croissance des instabilités.

Nous avons considéré une situation dans laquelle la moitié supérieure d'une cavité isobare d'extension infinie, contenant un fluide supercritique au repos, est initialement à une température inférieure à la température de la moitié inférieure (*Figure 5.5*). Les parois supérieure et inférieure sont à la température initiale du fluide et des conditions périodiques sont imposées aux parois latérales. Notre objectif est d'étudier numériquement la stabilité de l'interface de diffusion thermique présent entre les deux moitiés de la cavité par l'analyse de la dynamique de croissance des fluctuations qui sont simulées par l'introduction d'une perturbation initiale, sinusoïdale et de faible amplitude (voir § 5.2.2). La stratification est supposée négligeable pour les proximités du point critique considérées dans cette étude.

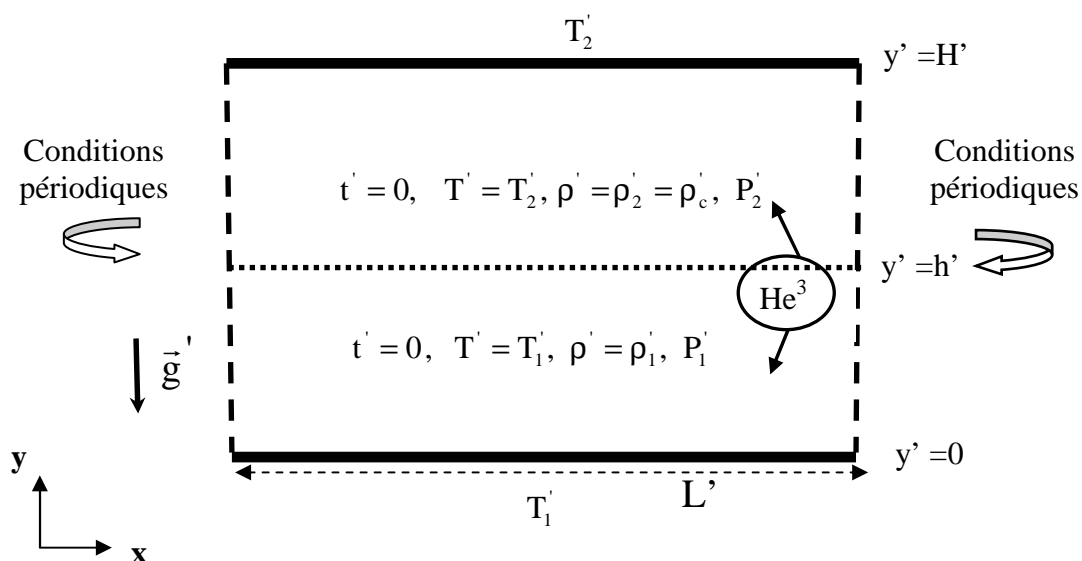


Figure 5.5: Le modèle géométrique pour la configuration type Rayleigh-Taylor.

5.2.2 Analyse de stabilité linéaire

A $t'=0$, une perturbation de la vitesse verticale est introduite sous la forme suivante :

$$V'(0 \leq x' \leq L, y' = y'_{\text{interface}}) = A' \sin\left(\frac{2\pi}{\tilde{\lambda}'}\right),$$

où A' est l'amplitude de la perturbation et $\tilde{\lambda}' = L'$ est la longueur d'onde correspondante. La dynamique de la croissance des fluctuations, c'est-à-dire l'évaluation du taux de croissance des instabilités σ' en fonction du nombre d'onde $k' = \frac{2\pi}{\tilde{\lambda}'}$, est effectuée numériquement par une analyse linéaire ($A'\sigma'k' \leq 1$) en considérant le profil plateau de l'évolution temporelle de ce taux de croissance σ' qui est :

$$\sigma' = \frac{\ln(V'_1 / V'_2)}{t'_1 - t'_2},$$

où V'_1 et V'_2 sont les composantes verticales de la vitesse aux temps $t' = t'_1$ et $t' = t'_2$ respectivement (voir *Figure 5.6*).

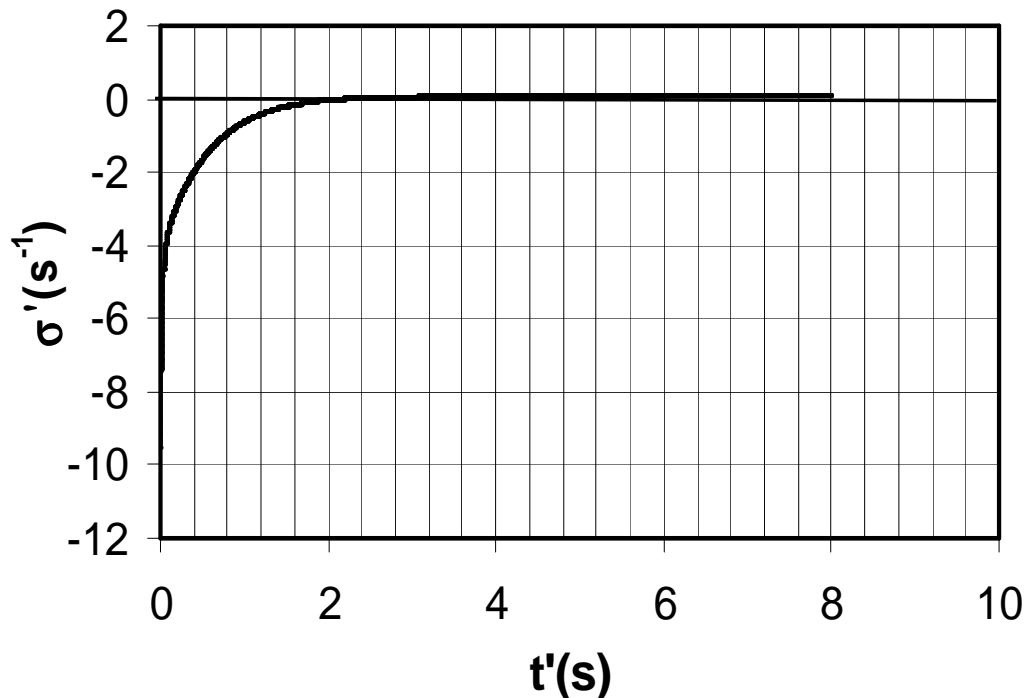


Figure 5.6 : Allure qualitative du taux de croissance en fonction du temps

Le nombre d'onde de coupure est donc déterminé et comparé aux valeurs théoriques évaluées par Duff *et al.* [Duf62] et Kurowski *et al.* [Kur95] qui ont considéré l'évolution du front de diffusion dans les fluides miscibles incompressibles. Kurowski *et al.* [Kur95] ont analysé la stabilité de ce front entre deux fluides miscibles par une analyse asymptotique des équations de Navier-Stokes linéaires couplée avec celle de la concentration.

Ils ont trouvé que, dans le cas où les effets de diffusion (D) et ceux de viscosité (ν) jouent un rôle dans la stabilité du front, l'échelle de longueur caractéristique du nombre d'onde est de l'ordre de $\lambda_c = \left(\frac{16\nu D}{3gA_t} \right)^{1/3}$ où $A_t = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1 + \rho_2}$. Le *Tableau 5.1* montre la comparaison du nombre d'onde de coupure entre les différents résultats analytiques décrits précédemment et ceux issus de nos simulations pour différentes valeurs de ε_T et de la différence de densité ε_ρ . Les différentes valeurs semblent être en bon accord même si pour les valeurs plus faibles de ε_ρ et pour ε_T suffisamment grand, l'erreur entre les deux approches est de l'ordre de 20%.

$\varepsilon_T = \frac{T_2' - T_c'}{T_c'}$	$\varepsilon_\rho = \frac{\rho_2' - \rho_1'}{\rho_c'}$	$\tilde{\lambda}_c^{\text{numérique}}$ (mm)	$\tilde{\lambda}_c^{\text{Duff}}$ (mm)	$\tilde{\lambda}_c^{\text{Kurowski}}$ (mm)
0.08	10^{-4}	1.01	0.71	0.71
0.08	10^{-3}	0.12	0.154	0.165
0.02	10^{-3}	0.203	0.205	0.227
0.02	10^{-2}	0.11	0.0954	0.105
0.002	10^{-3}	0.1005	0.0979	0.107

Tableau 5.1: Longueurs d'onde de coupure des calculs numériques issus de nos simulations et analytiques [Duf62], [Kur95] en fonction de ε_T et ε_ρ .

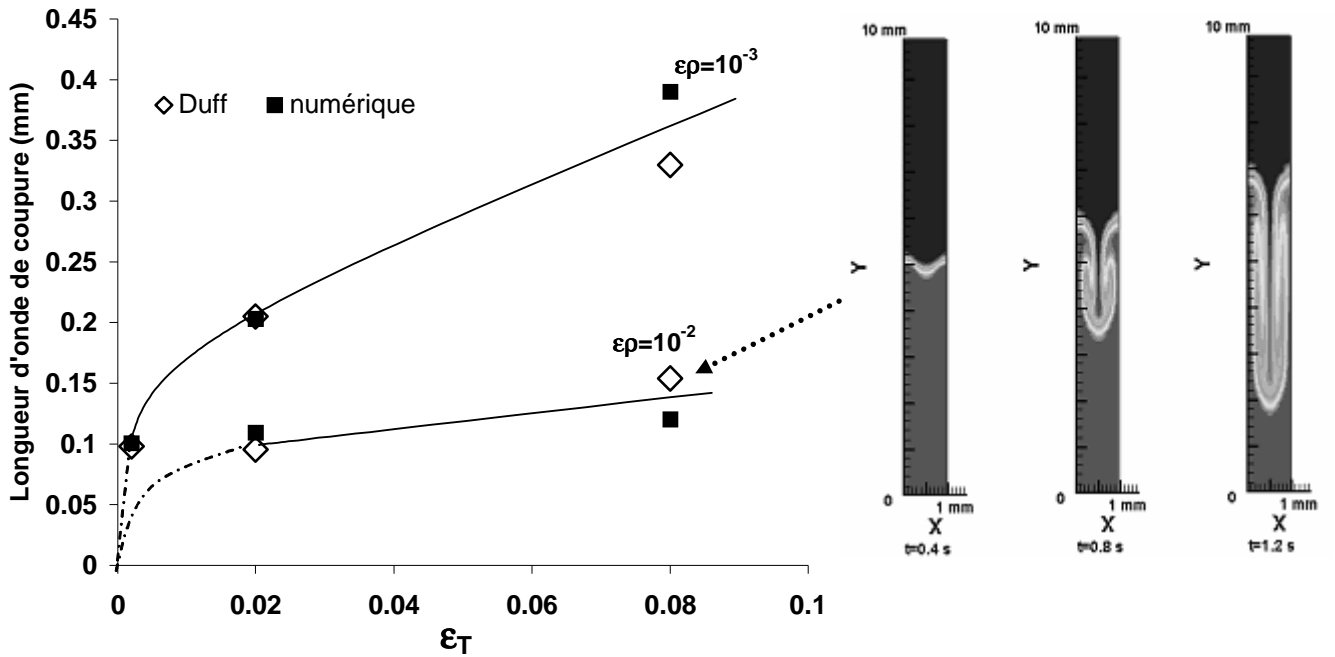


Figure 5.7: Evolution de la longueur d'onde de coupure en fonction de ε_T pour deux valeurs de $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ et 10^{-3} . Le champ de température en fonction du temps (dans le régime non-linéaire) pour une longueur d'onde $\tilde{\lambda} = 1$ mm et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ montre bien l'évolution d'une instabilité de type Rayleigh-Taylor.

La Figure 5.7 montre la comparaison des longueurs d'onde de coupure (celles obtenues numériquement et celles déduites de [Duf62]) en fonction de la proximité du point critique pour deux valeurs de différence de densité normalisée ($\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ et 10^{-3}). L'analogie avec le cas de deux fluides miscibles incompressibles est bien vérifiée. La différence un peu plus importante pour $\varepsilon_T = 0.08$ vient du fait que lorsque l'on s'éloigne du point critique, la différence de température entre la couche du bas et celle du haut devient plus importante et de ce fait l'hypothèse de la linéarisation de l'équation d'état est de moins en moins vérifiée. Mais globalement, l'analogie semble être bien vérifiée.

L'analyse de stabilité linéaire de la configuration de RT avec deux fluides visqueux compressibles en présence de la diffusion a été récemment résolue par une méthode numérique pseudo-spectrale en Fourier-Chebyshev avec une technique de décomposition dynamique [Ser02]. Mais il est toujours possible d'approximer la relation de dispersion par la relation de Duff *et al.* [Duf62] établie dans le Chapitre 2, équation (2.9) et valable pour deux fluides incompressibles.

Nous avons considéré dans la majorité de nos cas une amplitude de perturbation de la vitesse à l'interface de l'ordre de $A'=10^{-4}$ m/s, et le filtrage acoustique est pris en compte pour cette partie de notre étude dont les détails peuvent se trouver dans le *Chapitre 3*. Le maillage que l'on a considéré dans cette étude est un maillage non uniforme (61x61) et identique pour tous les cas considérés. Nous avons préalablement vérifié l'indépendance des résultats vis-à-vis du maillage dans le cas d'une proximité donnée du point critique et en fonction du rapport de forme. Il est à noter que ce maillage correspond à un maillage correct en termes de précision et coût de calcul. L'exemple de ce maillage non uniforme est illustré sur la *Figure 5.8*.

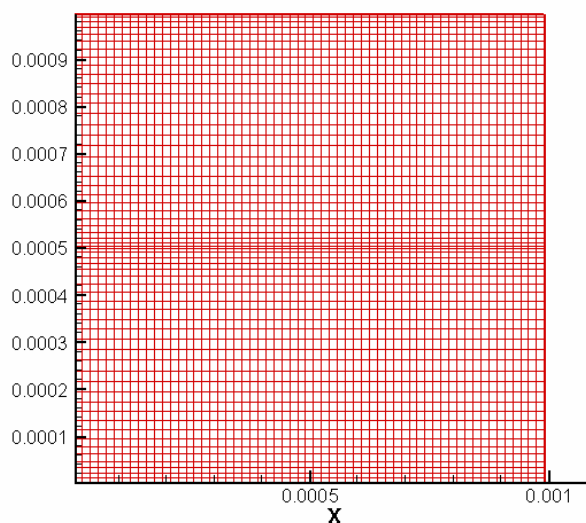


Figure 5.8 : Vue du maillage (61x61).

Dans tous les résultats qui vont suivre, nous avons vérifié que la solution avait bien convergé (la convergence la plus faible était dans le cas de l'équation de la correction de la pression, son résidu était en moyenne égal à 10^{-6}).

Nous considérons une cavité de hauteur $H'=1\text{mm}$ et de longueur $\tilde{\lambda}'=L'$ variable et une proximité du point critique $\varepsilon_T = 8 \times 10^{-2}$. On se place dans le cas où $h'=0.5$ (« l'interface » se situe au milieu de la cavité) et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$.

Les *Figures 5.9* et *5.10* montrent les champs de température, et de module de vitesse U pour deux instants ($t'=0.4\text{s}$ et $t'=16\text{s}$). On constate qu'aux premiers instants ($t'=0.4\text{s}$), le transfert diffusif du champ de température se fait au niveau de l'interface, et lorsque le temps augmente ($t'=16\text{s}$), la diffusion a envahi toute la cavité sans apparition de la convection. La configuration reste donc stable. Les champs du module de vitesse horizontale U sont présentés sur la *Figure 5.10*. On voit un écoulement caractéristique d'une cavité de

couches limites distinctes (chaude et froide). Pour ce qui est du champ de vitesse, son amplitude est beaucoup plus grande que le cas précédent, de l'ordre de 5 mm/s.

Dans ces deux exemples qu'on vient de décrire, les paramètres de contrôle (ε_ρ , ε_T) sont restés identiques et pourtant les conséquences sur les résultats semblent être opposées (le premier est stable et le second instable). En revanche, dans le deuxième cas, la hauteur de la couche du bas était petite ($h'=0.25$) comparée à celle du premier. A la première intuition, on s'attend que le dernier cas soit plus stable. Mais il y a un dernier paramètre qu'il ne faut pas oublier dans l'interprétation de nos résultats, c'est la longueur d'onde. Le taux de croissance des instabilités est intimement lié au nombre d'onde qui est à 2π près l'inverse de la longueur d'onde. Et dans le second cas, la longueur d'onde est deux fois plus grande que celle du premier cas et nous verrons cet aspect un peu plus loin dans ce *Chapitre*.

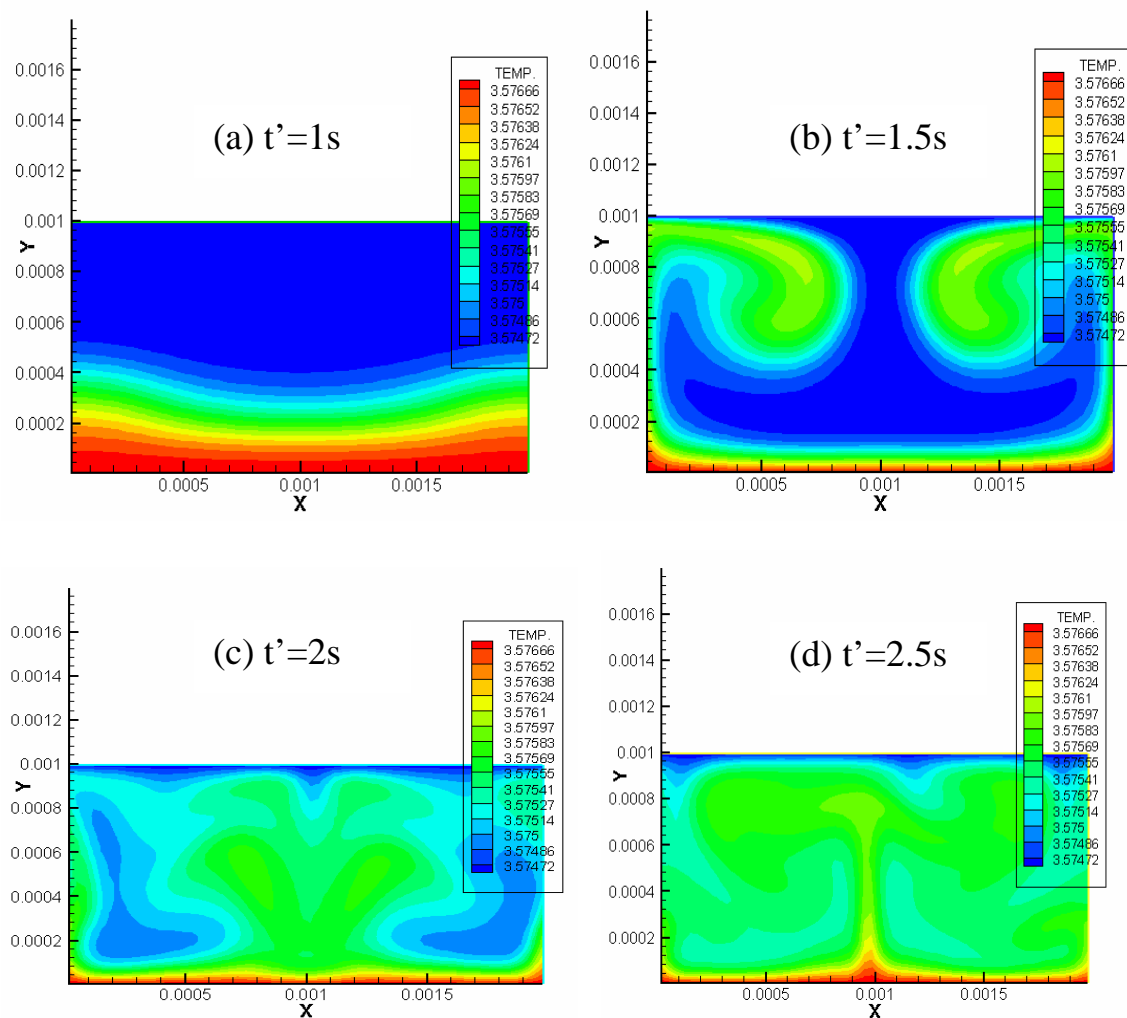


Figure 5.11 : Evolution du champ de température (en K) à différents instants et pour $h'=0.25\text{mm}$, $H'=1\text{mm}$,

$$\lambda' = 2\text{mm} \quad \varepsilon_\rho = 10^{-2}, \varepsilon_T = 8 \times 10^{-2}.$$

Un dernier exemple du champ de température dans le cas où $\varepsilon_T = 8 \times 10^{-2}$ pour deux valeurs de $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$ à $t'=4s$ et pour une longueur d'onde de $\tilde{\lambda}'=2mm$ $h'=0.25mm$, $H'=1mm$.

La *Figure 5.12* illustre pour ce cas deux cas de figure : avec et sans gravité ($g'=0$). On voit très clairement que dans le cas d'une forte différence de densité initiale ($\varepsilon_\rho = 10^{-2}$) et en incluant l'effet de la gravité, la configuration est instable comme on pouvait s'y attendre. En revanche, elle est complètement stable (et presque similaire au cas sans effet de gravité) dans le cas d'une faible différence de densité.

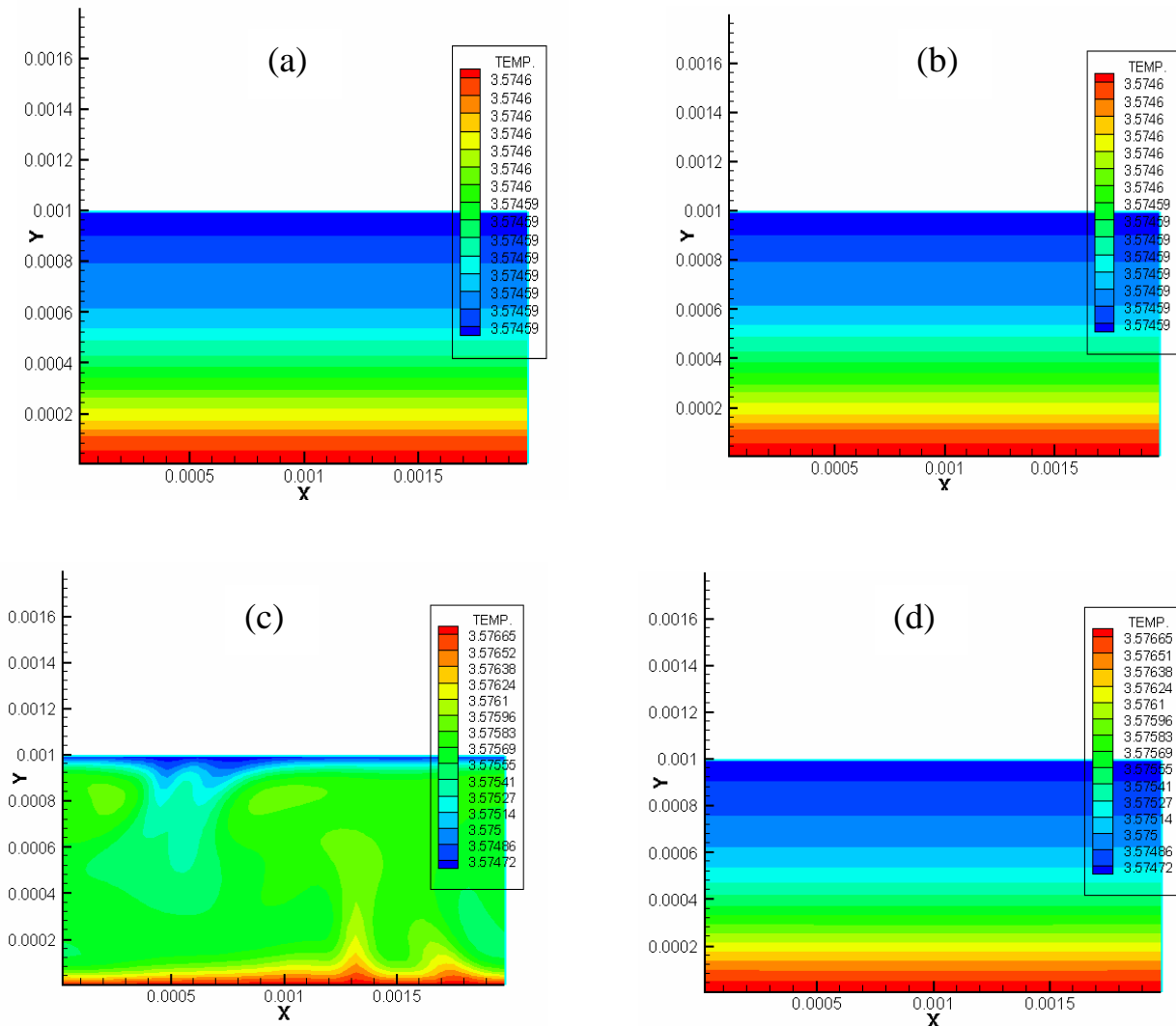


Figure 5.12 : Effet de la gravité sur les champs de température pour $\varepsilon_T = 8 \times 10^{-2}$, $\tilde{\lambda}'=2mm$ à $t'=4s$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$ [cas (a) et (b)] et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ [cas (c) et (d)], cas (b) et (d) sans gravité et les cas (a) et (c) avec gravité.

Remarque : le champ de densité n'est pas représenté puisqu'il est homothétique au champ de température et donc les interprétations se feront à l'aide du champ de température.

5.2.3 Effet de la taille de la couche inférieure sur la stabilité de la configuration de type Rayleigh-Taylor

Si on considère une différence de température telle que dans la configuration Rayleigh-Bénard, on soit stable, qu'advierait-il de notre configuration type Rayleigh-Taylor (serait-elle stable, instable) si on diminuait la hauteur h' ? L'étude de la stabilité d'une couche de fluide supercritique chauffée par le bas (Rayleigh-Bénard) a été étudiée dans le *Chapitre 2* et la différence de température à partir de laquelle cette couche devient instable est donnée par la relation (2.5). La différence de densité correspondante est déterminée par l'équation d'état, c'est-à-dire $(\delta\rho)'_c = \rho'_c \beta'_p (\delta T)'_c$.

La *Figure 5.13* montre l'évolution du taux de croissance σ' en fonction du nombre d'onde k' pour le cas le plus intéressant, $\varepsilon_T = 0.08$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$ et qui correspond à

$$\delta T' = \frac{\delta\rho'}{\rho'_c \beta'_p} = 5.34 \mu\text{K}. \text{ Cette valeur est inférieure à celle de } (\delta T)'_c \text{ dans la configuration}$$

Rayleigh-Bénard dont la valeur est de l'ordre de $15 \mu\text{K}$. Par conséquent, la valeur de $\delta T'$ dans notre configuration Rayleigh-Taylor est telle que dans celle de Rayleigh-Bénard, elle est stable. Les différentes courbes (*Figure 5.13*) représentent l'évolution de la courbe de dispersion $\sigma' = f(k')$ pour différentes valeurs des hauteurs des deux couches. Nous considérons le régime linéaire, et nous calculons les valeurs de σ' à partir du plateau trouvé sur la courbe de $\sigma' = g(t')$ (*Figure 5.6*). Lorsque l'épaisseur de la couche inférieure diminue, la configuration Rayleigh-Taylor devient stable ($\sigma' < 0$) et semble tendre vers celle de RB qui est stable pour les valeurs de ε_T et ε_ρ considérées ici (on détaillera ce caractère stabilisateur plus loin). On a aussi montré que, pour de faibles différences de densité que l'on a considérées et dans le régime linéaire, le symétrique (augmentation de l'épaisseur de la couche inférieure) n'avait pas d'effet sur la courbe du taux de croissance. L'analyse de la stabilité de notre configuration dépend en fait de deux paramètres : les hauteurs des deux couches et la différence de densité (ou température) entre les deux couches.

En fait, la stabilité de chaque configuration va dépendre de la longueur caractéristique de la couche de diffusion thermique évaluée pour l'amplitude maximale du taux de croissance de l'instabilité (σ') qui est l'inverse du temps caractéristique correspondant.

En d'autres termes, lorsque $\delta'_{\text{diff}} = \sqrt{\frac{\kappa'}{\sigma'_{\text{max}}}}$ est de l'ordre ou inférieure à l'épaisseur

de la couche inférieure, le cas sera instable. L'évaluation de cette épaisseur de couche de diffusion thermique nous donne $\delta'_{\text{diff}} \cong 0.2\text{mm}$ et peut expliquer pourquoi le cas ($h'=0.5\text{mm}$) est instable, le cas ($h'=0.25\text{mm}$) légèrement instable et le cas ($h'=0.01\text{mm}$) complètement stable.

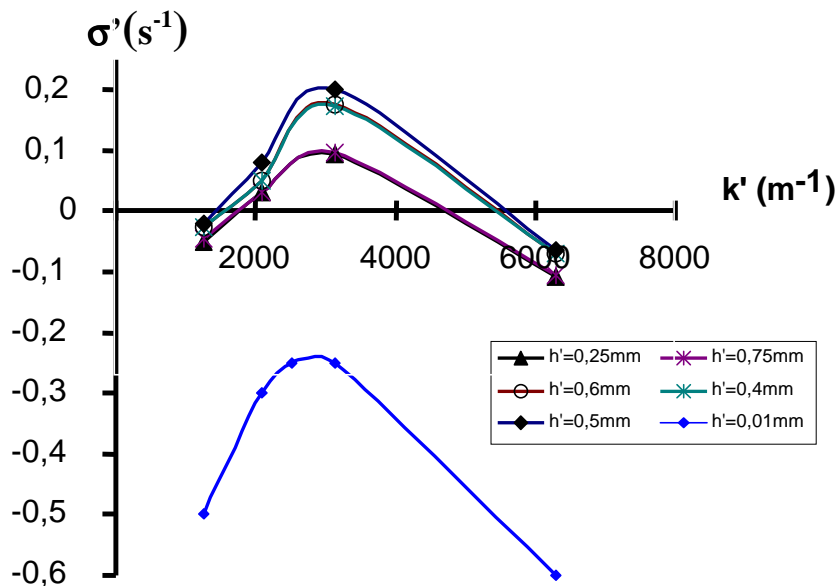


Figure 5.13 : Taux de croissance d'instabilité en fonction du nombre d'onde pour différentes hauteurs et pour le cas $\varepsilon_T = 0.08$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$.

Sur la Figure 5.14, on voit l'effet de la différence de densité ε_ρ sur la stabilité de notre configuration. Plus cette différence de densité est faible et plus le taux de croissance est petit, et par conséquent la configuration devient plus stable ($\sigma' < 0$). Pour les valeurs de ε_ρ aussi basses que 10^{-5} correspondant à $\Delta T' \cong 0.5 \mu\text{K}$ qui est 30 fois inférieure à celle de la configuration Rayleigh-Bénard [RB] [Ami01], dont la valeur est approximativement de $(\delta T')_c \cong 15 \mu\text{K}$, les calculs montrent que, dans cette situation où la discontinuité initiale des champs de densité et de température est à mi-hauteur de la cavité, la configuration Rayleigh-Taylor [RT] est stable.

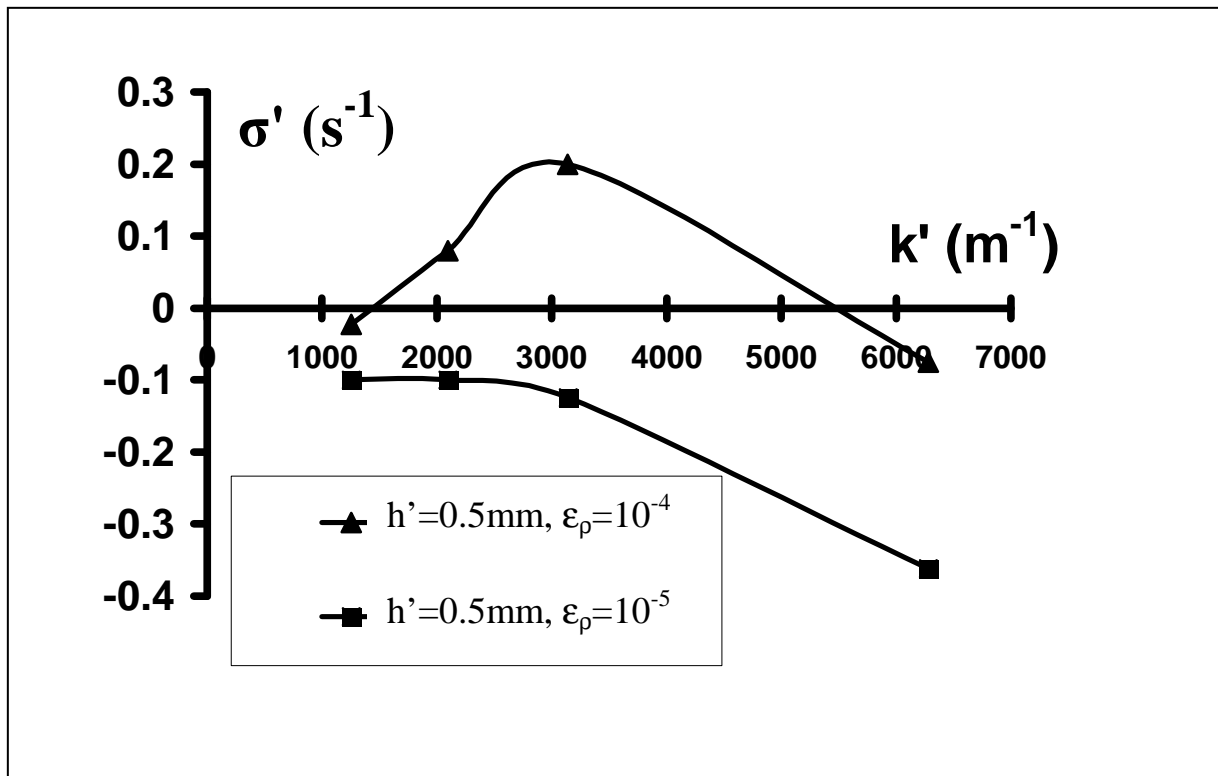


Figure 5.14 : Taux de croissance d'instabilité en fonction du nombre d'onde pour deux valeurs de $\epsilon_\rho = 10^{-4}$, $\epsilon_\rho = 10^{-5}$ et $\epsilon_T = 0.08$ dans le cas $h'=0.5\text{mm}$, $H'=1\text{mm}$.

La Figure 5.15 illustre la dépendance théorique de la différence de densité ϵ_ρ (courbe inférieure RT évaluée dans le Chapitre 2, équation (2.9)) en fonction de la longueur caractéristique $\left(\delta'_{\text{diff}} = \sqrt{\frac{\kappa'}{\sigma'_{\text{max}}}} \right)$ dans la configuration RT pour le cas ($h'=0.01\text{mm}$).

La ligne verticale correspond à l'épaisseur de la couche inférieure (h' dans la Figure 5.5). La courbe du haut concerne la différence de densité critique en fonction de la longueur caractéristique [$H' = \delta'_{\text{diff}}$ dans l'équation 2.5 et $(\delta\rho')_c = \rho'_c \beta'_p (\delta\Gamma)_c$] dans la configuration RB. Enfin les deux champs de température montrent deux situations à 2 instants donnés. Le premier donne une configuration stable à ($t'=10\text{s}$) correspondant à une épaisseur de diffusion ($\delta'_{\text{diff}} > h'$) alors que le second donne une situation complètement instable même à des temps très courts ($t'=0.4\text{s}$).

On pourra aussi noter l'apparition de deux couches limites thermiques en haut et en bas de la cavité. Cette figure montre aussi que tous les points de la configuration RT sont dans une configuration RB stable, car ces points se trouvent en dessous de la différence de densité

critique dans le cas RB. Pour la courbe RT, la ligne verticale (correspondant à l'épaisseur de la couche inférieure) définit la limite des configurations RT stable ($\delta'_{diff} > h'$) et instable ($\delta'_{diff} < h'$). Lorsque ε_ρ tend vers zéro et que δ'_{diff} augmente, les deux courbes RT et RB se rejoignent, ceci montre bien le passage continu de la configuration RT à la configuration RB.

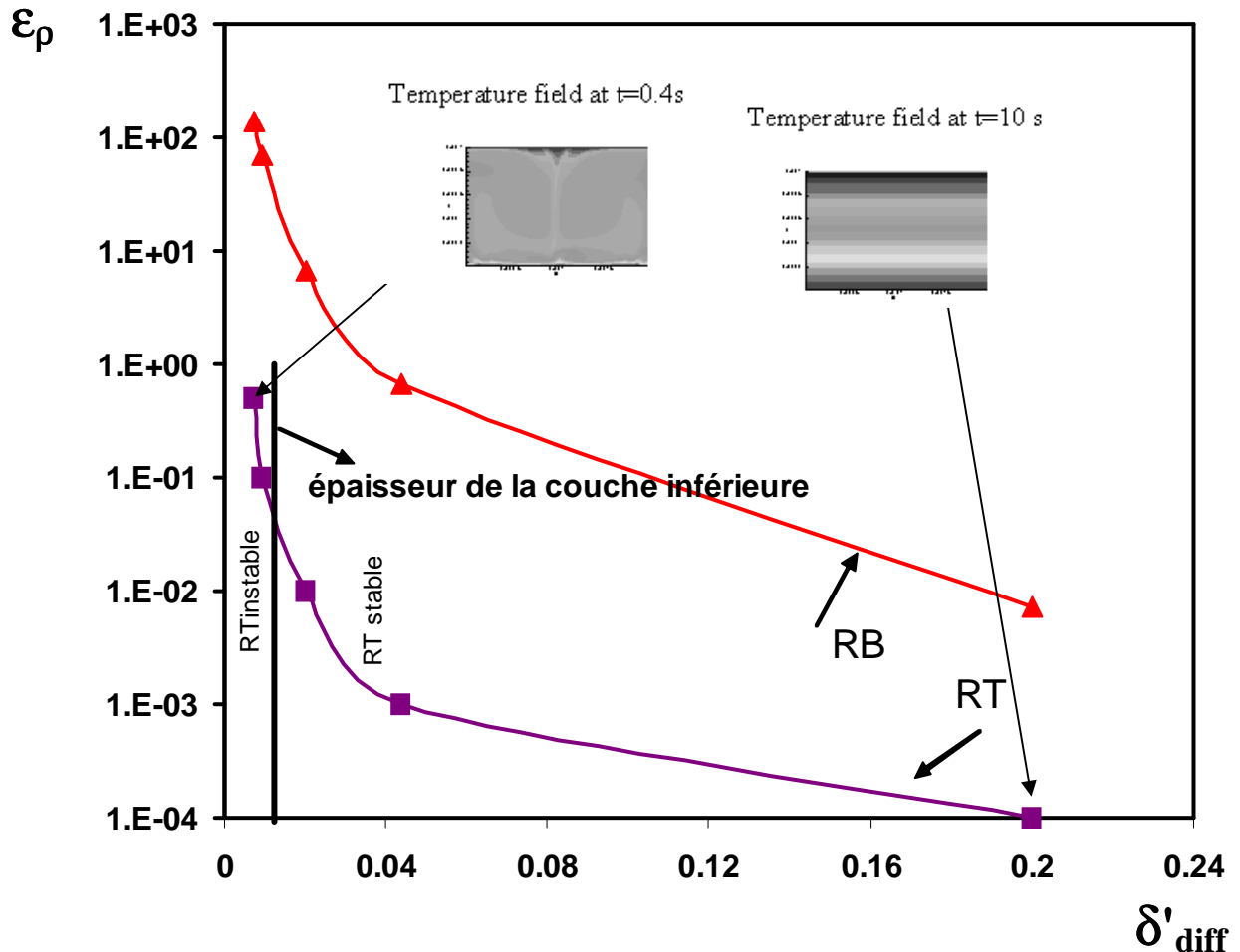


Figure 5.15: Différence de densité ε_ρ en fonction de la longueur caractéristique (calculée à partir du taux de croissance maximal) pour $h'=0.01$ mm, $H'=1$ mm.

5.3 Conclusion

Une simulation numérique de la stabilité de deux couches, placées en configuration instable, d'un même fluide supercritique a été effectuée dans cette étude. Nous avons montré

que cette configuration est analogue à celle de l'instabilité de Rayleigh-Taylor dans le cas de deux fluides miscibles à condition de remplacer, dans les lois de dispersion, le coefficient de diffusion massique entre les deux fluides par le coefficient de diffusion thermique. Dans le cas où la différence de densité relative entre les deux couches est telle que dans le cas RB on est stable, on a aussi montré, dans le régime linéaire, qu'en diminuant l'épaisseur de la couche inférieure, on stabilisait de plus en plus notre configuration de type Rayleigh-Taylor. En fait, lorsque cette épaisseur devient inférieure à l'épaisseur de la couche de diffusion thermique calculée à partir du taux de croissance maximal, le mécanisme de RT devient stable. On a aussi montré que, pour de faibles différences de densité que l'on a considérées et dans le régime linéaire, le symétrique (augmentation de l'épaisseur de la couche inférieure) n'avait pas d'effet sur la courbe du taux de croissance. L'analyse de la stabilité de notre configuration dépend en fait de deux paramètres : la hauteur de la couche inférieure et la différence de densité (ou température) entre les deux couches. Enfin, lorsque la différence de densité devient petite et lorsque l'épaisseur de la couche de diffusion calculée à partir du taux de croissance maximal devient très importante, la configuration Rayleigh-Taylor semble tendre vers celle de Rayleigh-Bénard.

CHAPITRE 6 : Résultats dans le cas sans filtrage acoustique et avec stratification

Dans le *Chapitre* précédent, les résultats ont été fournis avec la résolution des équations hydrodynamiques avec filtrage acoustique et ce dans l'approximation à faible nombre de « Mach » [Ami97, Ami05a, Ami05b]. Nous présentons dans ce *Chapitre* les résultats relatifs au cas avec filtrage acoustique et avec stratification initiale et les équations sont résolues sous forme adimensionnelle.

6.1 Contexte de l'étude

On rappelle que l'approximation qui a été utilisée dans le *Chapitre* précédent permet de filtrer les ondes acoustiques et de se placer ainsi sur une échelle de temps caractéristique grande par rapport à cette échelle de temps acoustique. Cette approximation est toujours utilisée pour obtenir la stabilité numérique dans les fluides fortement compressibles [Pao82, Fro92] et d'augmenter, par conséquent, le pas de temps. Dans tous nos résultats du *Chapitre* précédent, le point critique n'était pas suffisamment approché et notre premier but dans ce *Chapitre* est de pouvoir s'approcher assez près du point critique sans pour autant franchir la limite du modèle continu (valable pour une épaisseur de couche de diffusion thermique inférieure à 10 fois la longueur de corrélation). Le cas sans filtrage acoustique (qui avait été étudié auparavant dans le cas d'une équation d'état de van der Waals [Ami95] mais avec un pas de temps très petit qui limitait les calculs) a fonctionné dans notre cas (avec une équation d'état linéarisée). Tous les calculs actuels [Ami05a, Jou99, Acc05] ont été effectués avec l'approximation à faible nombre de Mach et nous allons montrer, grâce aux résultats présentés ici, que cette approximation n'est pas nécessaire avec les équations détaillées dans le *Chapitre* 3. La méthode numérique des volumes finis (voir *Chapitre* 4) est une méthode à discrétisation intégrale des équations (formulation variationnelle) et par conséquent, elle filtre naturellement les équations.

Le second point, dans les objectifs de ce *Chapitre*, est que lorsque l'on s'approche suffisamment du point critique, la stratification initiale n'est plus négligeable comme décrit dans le *Chapitre* 3 et les résultats relatifs à cet effet dans la stabilité de notre configuration type Rayleigh-Taylor sont présentés dans ce *Chapitre*. La stratification reste d'ordre 1 jusqu'à

une certaine proximité du point critique, mais en s'approchant du point critique elle devient de plus en plus importante. Des variations de densité d'ordre de 10% dans une cellule de l'ordre de 1cm de hauteur (ou 7% dans une cellule de 1mm) ont été observées à une proximité donnée du point critique [Mol79]. Ce qui se produit pour l'atmosphère à l'échelle du kilomètre devient donc sensible à l'échelle du laboratoire pour les fluides proches de leur point critique, et ce problème s'amplifie avec la proximité du point critique.

6.2 Diagramme de stabilité dans la configuration type Rayleigh-Taylor

Nous considérons la même configuration géométrique que celle du *Chapitre* précédent (voir *Figure 5.5*) remplie d'hélium3 supercritique qui comporte deux échelles caractéristiques $L = \tilde{\lambda}$ où $\tilde{\lambda}$ est la longueur d'onde adimensionnelle de la perturbation (voir § 5.2.2) et h correspondant à la hauteur de la couche inférieure. Les parois inférieure et supérieure sont des murs avec des conditions de non glissement et sont maintenues à des températures fixes T_1 et T_2 . Les deux couches du bas et du haut sont initialement maintenues à des densités ρ_2 et ρ_1 évaluées à partir des équations (3.28). Des conditions périodiques sont imposées sur les parois latérales et donc la stabilité de ce système de deux couches est étudiée pour chaque longueur d'onde. On rappelle que toutes ces quantités sont sans dimension. La même démarche que le précédent *Chapitre* est menée afin de déterminer le taux de croissance en fonction du nombre d'onde.

Le *Tableau 6.1* donne un premier résultat de comparaison de la longueur d'onde de coupure entre les deux méthodes (avec et sans filtrage acoustique) pour $\varepsilon_T = 0.08$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$. On voit que les résultats sont très proches avec ceux de Duff *et al.* [Duf62] et que ceux sans filtrage acoustique semblent un peu plus se rapprocher des résultats de Duff *et al.* que ceux avec prise en compte du filtrage acoustique.

ε_T	ε_ρ	$\tilde{\lambda}_c$ avec filtrage acoustique (mm)	$\tilde{\lambda}_c$ sans filtrage acoustique (mm)	$\tilde{\lambda}_c^{\text{Duff}}$ (mm)
0.08	10^{-3}	0.39	0.34	0.33

Tableau 6.1: Valeurs numériques de la longueur d'onde de coupure (avec et sans filtrage acoustique) comparées à la valeur analytique de Duff *et al.* [Duf62] pour des valeurs fixées de ε_T et ε_ρ , et une cellule de hauteur $H'=1\text{mm}$.

La *Figure 6.1* montre une comparaison des profils des grandeurs de l'écoulement (dans le cas dimensionnel avec et sans filtrage) pour $h'=0.5\text{mm}$, $H'=1\text{mm}$, $\varepsilon_T = 810^{-2}$, $\varepsilon_p = 10^{-3}$ et $\tilde{\lambda}'=2\text{mm}$. Les deux résultats (avec et sans filtrage), sont en parfait accord : les profils de température, de densité et des vitesses sont bien confondus, ce qui conforte bien l'idée que la méthode numérique des volumes finis est une méthode filtrante.

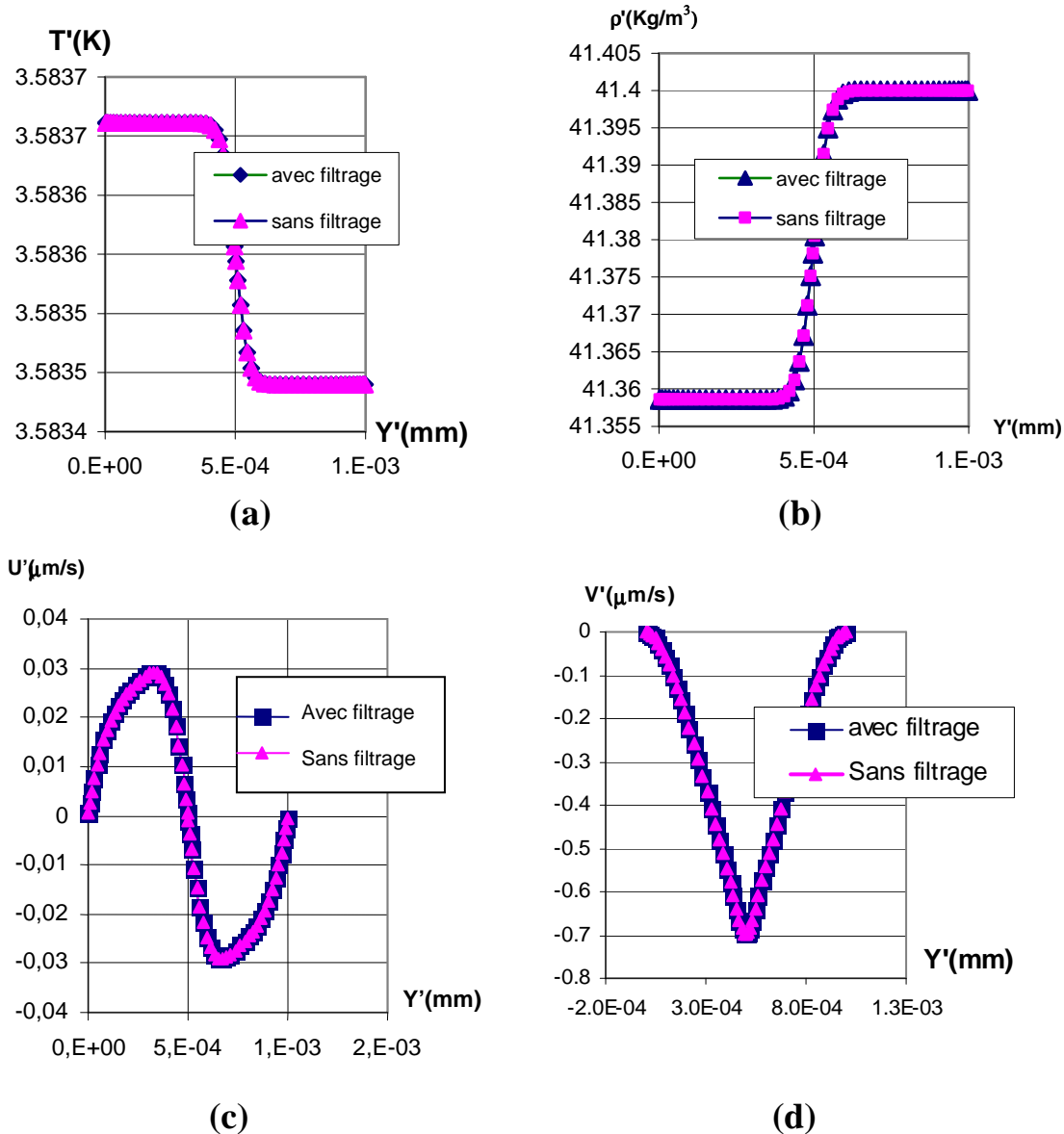


Figure 6.1 : Comparaison des profils des grandeurs de l'écoulement dans le cas dimensionnel (avec et sans filtrage $h'=0.5\text{mm}$, $H'=1\text{mm}$, $\varepsilon_T = 810^{-2}$ et $\varepsilon_p = 10^{-3}$ et $\tilde{\lambda}'=2\text{mm}$ à $t'=0.1\text{s}$ (a) Température (K), (b) Densité (kg/m³), (c) Vitesse horizontale (microm/s) et (d) Vitesse verticale (microm/s).

Toujours dans la continuité des résultats présentés dans le *Chapitre 5*, nous avons tenté de représenter le diagramme de stabilité de la configuration type Rayleigh-Taylor. La *Figure 6.2* illustre ce dernier point par la représentation de l'épaisseur relative de la couche de diffusion $\frac{\delta}{h}$ en fonction de ε_T et ce pour différentes valeurs de h et de ε_ρ . On rappelle que l'épaisseur de la couche de diffusion δ' est estimée à partir du taux de croissance maximal et du coefficient de diffusion thermique $\delta' = \sqrt{\frac{\kappa'}{\sigma'_{\max}}}$. Lorsque l'épaisseur de cette couche de diffusion devient plus grande que l'épaisseur de la couche inférieure (ou lorsque $\frac{\delta}{h} > 1$) alors la configuration est stable sinon elle reste instable. La limite de stabilité est clairement identifiée par la ligne horizontale : le cas stable apparaît pour des valeurs faibles de l'épaisseur de la couche inférieure et de la différence de densité entre les deux couches.

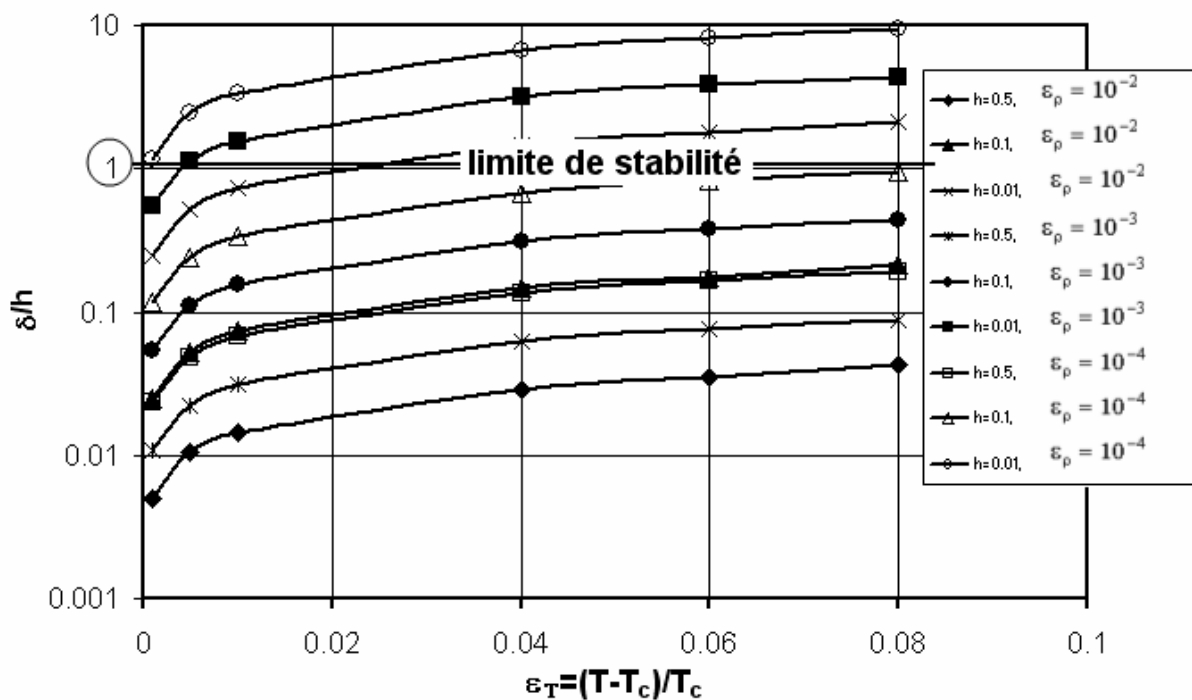


Figure 6.2: Diagramme de stabilité de $\frac{\delta}{h}$ en fonction de ε_T pour différentes valeurs de ε_ρ et de h .

La *Figure 6.3* présente des résultats d'une branche de la courbe du taux de croissance en fonction du nombre d'onde, très proche du point critique ($\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$) et pour différentes valeurs de ε_ρ . Pour les petites valeurs de différence de densité ($\varepsilon_\rho = 10^{-4}$), l'interface entre

les deux couches est stable ($\sigma' < 0$), et pour les grandes valeurs de ce paramètre de contrôle ($\varepsilon_\rho = 10^{-3}, 10^{-2}$), le système est instable. Dans ces cas, la stratification est prise en compte et on va voir dans le paragraphe suivant l'effet de cette stratification dans la stabilité de notre configuration. Par ailleurs, la figure 6.3 montre les champs de température pour deux différences de densité initiale ($\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$) et dans le cas d'une même longueur d'onde $\tilde{\lambda}' = 5$ mm et approximativement au même temps $t' \cong 1.5$ s. On voit que dans le cas $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$, l'interface est instable, ce qui n'est pas le cas pour $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ où pour ce temps assez petit, l'instabilité n'a pas encore démarré (ce cas doit être instable puisque pour $\tilde{\lambda}' = 5$ mm ou $k' = 1.25$ mm $^{-1}$, $\sigma' > 0$).

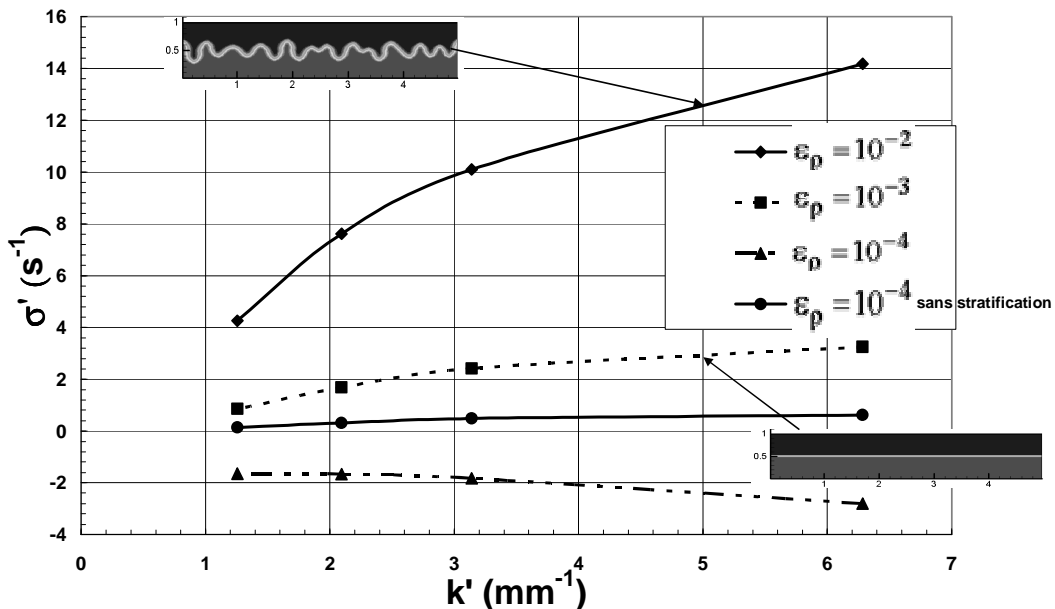


Figure 6.3: Taux de croissance en fonction du nombre d'onde pour $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$ et différentes valeurs de ε_ρ avec $h=0.5$.

6.3 Effet de la stratification initiale

L'effet de la stratification initiale peut se voir déjà sur la Figure 6.3 dans le cas $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$ avec et sans cette stratification initiale. On peut remarquer que le cas avec stratification initiale est stable comparé à celui sans stratification qui est instable. Nous allons essayer de comprendre cette stabilisation en fonction des différents paramètres de contrôle.

La *Figure 6.4* montre le diagramme de stabilité (σ' , k') pour deux valeurs extrêmes de ε_T ($\varepsilon_T = 8 \times 10^{-2}$ et $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$) dans le cas de deux configurations (avec et sans stratification initiale). Pour des valeurs importantes de ε_T (donc compressibilité faible) et si l'on considère une cellule de 1mm, cela implique que le paramètre y^* (voir équation (3.28)) est grand. Par conséquent, la stratification a un effet négligeable sur la stabilité de ce système de deux couches, ce qui n'est pas le cas pour des valeurs faibles de ε_T (compressibilité importante avec la même hauteur de la cellule et qui entraîne des valeurs petites de y^*). Pour un nombre d'onde de l'ordre de $k' = 6.3 \text{ mm}^{-1}$, le cas avec stratification est approximativement 10% plus stable que celui où la stratification n'est pas prise en compte pour la proximité de point critique $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$. Le cas sans stratification de la *Figure 6.3* pour $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$ est instable comme on l'a vu précédemment et ceci est confirmé par la *Figure 6.2* (qui est instable par extrapolation) et où les calculs effectués pour le taux de croissance, basé sur sa valeur maximale, n'ont pas pris en compte la stratification initiale. On peut donc dire que la stratification a tendance à rendre le système plus stable. Ceci est assez clair dans le cas $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$. On va se focaliser sur ce cas et essayer d'expliquer en prenant en compte la stratification initiale, pourquoi le système devient-t-il stable ?

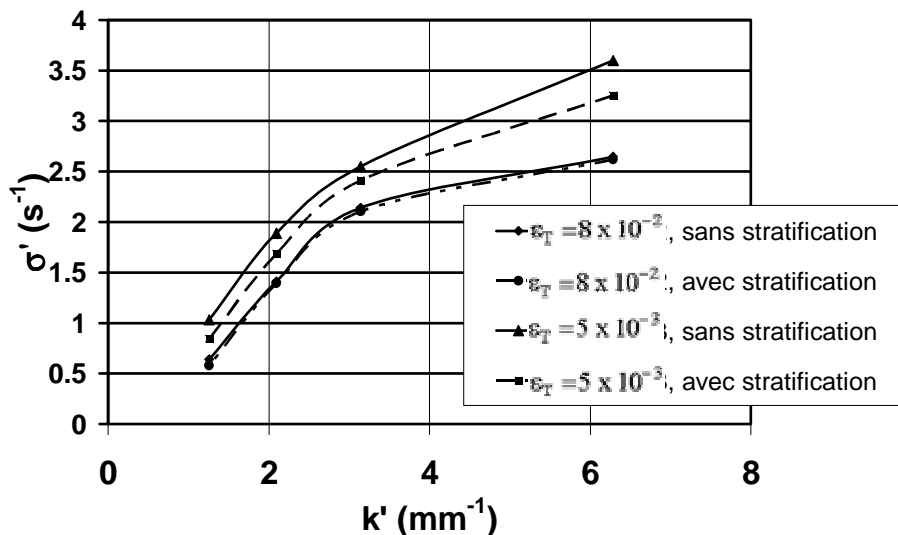


Figure 6.4: Taux de croissance en fonction du nombre d'onde pour $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ et pour deux valeurs de ε_T avec et sans stratification.

La *Figure 6.5* montre le champ de densité en fonction de la distance vertical pour le cas qui nous intéresse : $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$. Dans la mesure où la différence de densité entre les deux couches est assez faible et que la proximité du point critique est assez proche, la densité proche de la paroi inférieure devient plus importante que celle qui est proche de la paroi supérieure. La configuration est par conséquent globalement stable même si à l'interface, il existe une différence de densité telle que localement à cet endroit, on est instable. En fait, cette différence de densité n'est pas suffisante pour déstabiliser l'ensemble piloté par la grande différence de densité qui existe entre les deux parois.

On peut aussi estimer, à partir de la relation approchée de Duff *et al.* [Duf62], le nombre d'Atwood (ou la différence de densité entre les parois et non à l'interface) à partir duquel on devient stable correspondant à un taux de croissance nul : $At = \frac{k^3 \kappa}{g} [\kappa + 2\nu]$. On peut donc, pour une proximité donnée du point critique, déterminer la différence de densité entre les deux parois qu'il faut pour stabiliser ce système de deux couches de fluide.

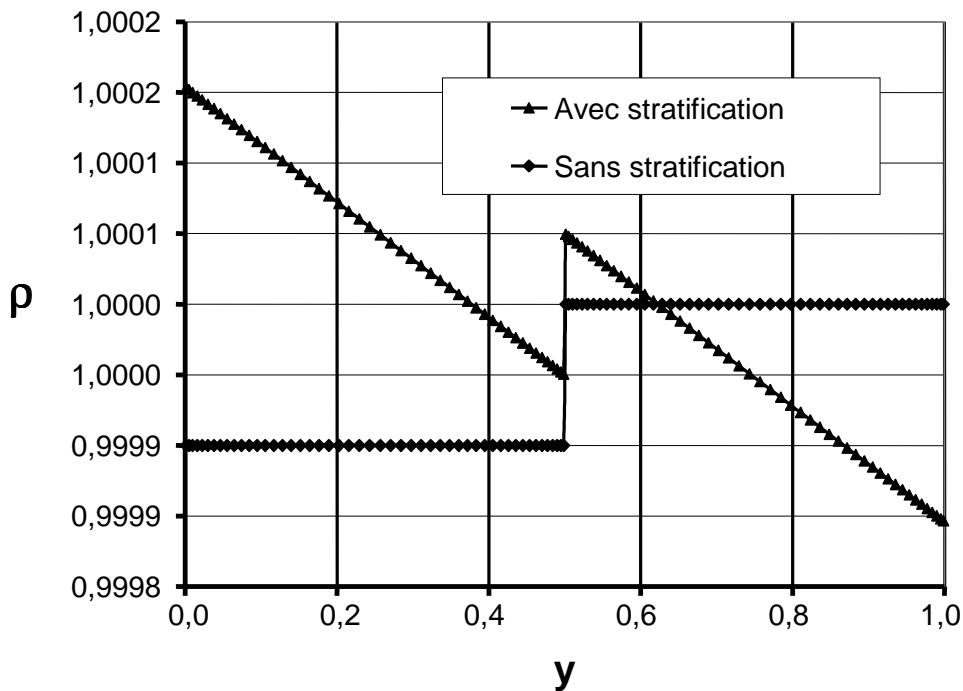


Figure 6.5: Champ de densité adimensionnel en fonction de la distance verticale y à l'état initial pour $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$ avec et sans stratification.

La *Figure 6.6* montre le profil de densité en fonction de la direction verticale pour une différence de densité ε_ρ donnée à l'état initial entre les deux couches et pour différentes valeurs de la proximité du point critique ε_T à $t'=0.1s$. Lorsque l'on s'approche du point critique, c'est-à-dire pour $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$ donc $y^* \rightarrow 0$, la stratification devient importante dans les deux couches et le profil de densité à l'interface devient abrupte (à $y=0.5$ dans le cas de la *Figure 6.6*). Dans le cas contraire, lorsqu'on s'éloigne du point critique ($\varepsilon_T = 8 \times 10^{-2}$), la stratification devient négligeable ($y^* \gg 1$) et le profil de densité à l'interface plus diffusif. L'effet de stratification à ces premiers instants ($t'=0.1s$) peut être illustré sur la *Figure 6.7* où on montre, pour le cas le plus proche du point critique $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$ et avec une différence de densité de $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$, les deux cas : avec et sans stratification. En plus, du fait que la différence de densité entre les parois diminue, le cas sans stratification semble donner des défauts sur les limites puisqu'à $t'=0$, les équations de l'hydrostatique ne sont pas satisfaites.

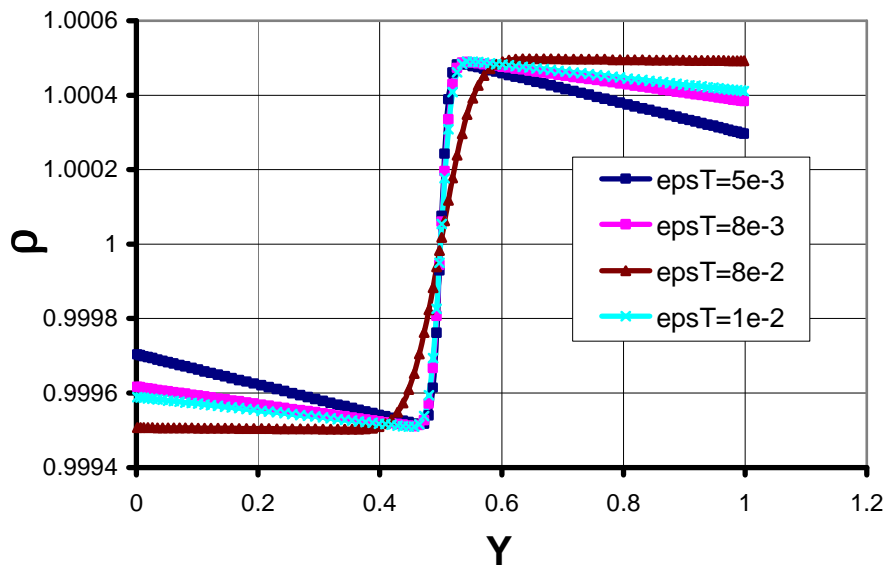


Figure 6.6: Profil adimensionnel de densité en fonction de y pour différentes valeurs de ε_T avec une valeur fixe de $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ à $t'=0.1s$ et $h'=0.5mm$ ($H'=1mm$).

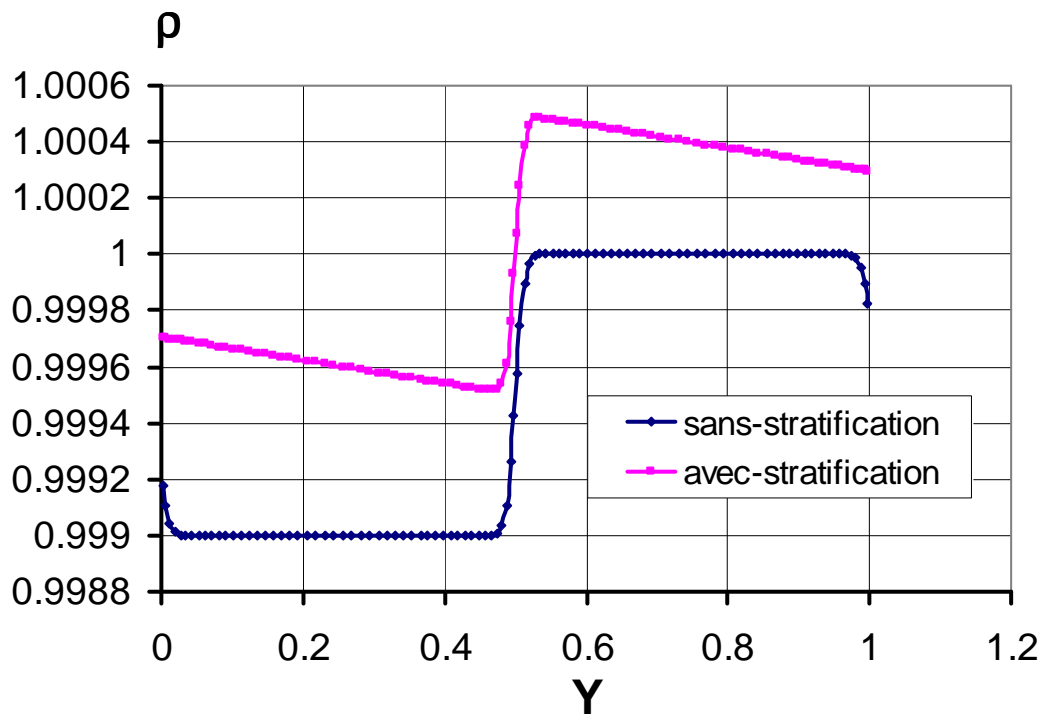


Figure 6.7: Profil adimensionnel de densité avec et sans stratification pour $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$, $\varepsilon_\rho = 1 \times 10^{-3}$ et $h' = 0.5 \text{ mm}$ ($H' = 1 \text{ mm}$) à $t' = 0.1 \text{ s}$.

On vient de montrer que la stratification initiale devient très importante quand le point critique est approché et permet de stabiliser la configuration de type Rayleigh-Taylor pour des valeurs données des deux paramètres de contrôle : différence de densité initiale et proximité du point critique. C'est la différence de densité entre les deux parois qui semble piloter la stabilité du système. Pour des faibles valeurs de la différence de densité initiale à l'interface, la différence de densité entre les deux parois devient très importante mais dans le sens stable, c'est-à-dire que le profil de densité s'inverse, le fluide lourd se trouve près de la paroi inférieure alors que celui qui est léger se trouve en haut près de la paroi supérieure : le système devient donc stable.

6.4 Analyse des champs de densité (ou température) et de vitesse

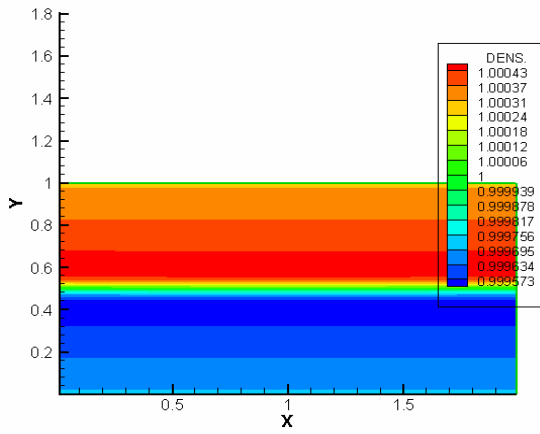
L'évolution du champ de densité adimensionnel est représentée sur la Figure 6.8 à différents instants de la simulation pour $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$, $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ et dans le cas où la stratification initiale est prise en compte comme on peut le constater sur cette figure. Cette

série représente l'évolution de la position de l'interface entre les deux sous domaines. Comme on pouvait s'y attendre, pour cette proximité assez proche du point critique, l'interface commence à se déstabiliser dès $t'=2s$ et la plume thermique envahit toute la cavité à $t'=4s$. A $t'=5s$, le champignon se déstructure et le processus de mélange thermique s'opère.

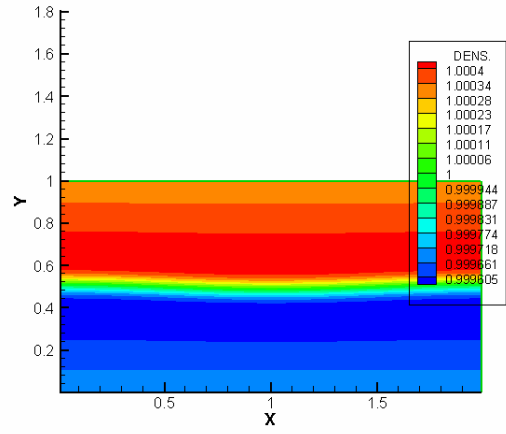
La *Figure 6.9* montre le champ de densité adimensionnel en fonction de ε_T à $t'=1s$ pour deux valeurs de ε_ρ (les graphiques de gauche correspondent à $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ et ceux de droite à $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ dans le cas où initialement le saut de densité se situe à $y=0.5$ (au milieu).

Une première remarque d'ordre général : les profils de densité à ($t'=1s$) correspondent bien à nos attentes puisque pour de fortes variations de différences de densité initiale ($\varepsilon_\rho = 10^{-2}$), l'interface est bien déformée à ces courts instants (apparition de plumes thermiques) alors qu'elle ne l'est pas pour de faibles variations de cette différence de densité ($\varepsilon_\rho = 10^{-3}$). De plus, les gradients de densité sont plus importants sur l'interface déformée pour de petites proximités du point critique que pour les grandes.

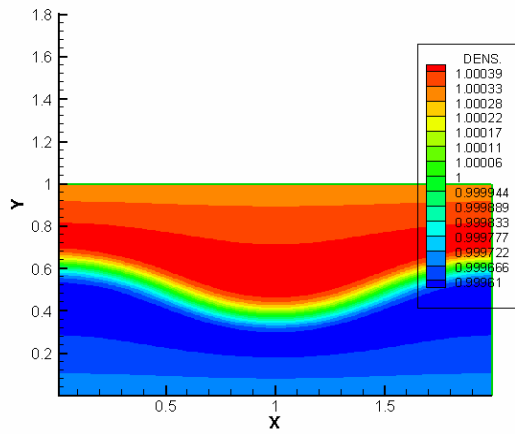
On peut par ailleurs remarquer que lorsqu'on est assez proche du point critique (*Figure 6.9.a*) et pour des valeurs de différence de densité plus faibles, il n'y a pas d'apparition de plumes thermiques à cet instant (ce cas est en fait instable d'après le diagramme de la *Figure 6.2* qui ne tient pas en compte l'effet de la stratification initiale). En revanche, l'effet de la stratification est beaucoup plus remarquable dans ce cas : lorsqu'on est proche du point critique, la stratification est beaucoup plus influente que lorsqu'on en est loin.



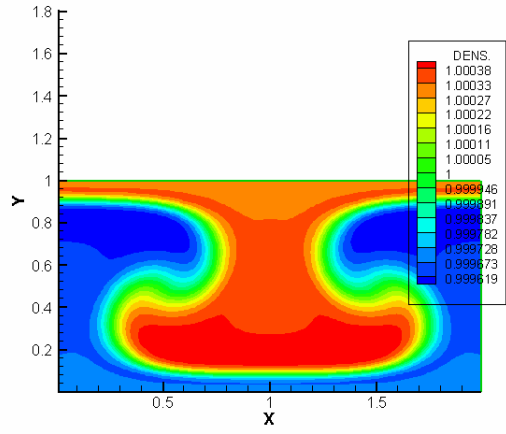
a. $t' = 1s$



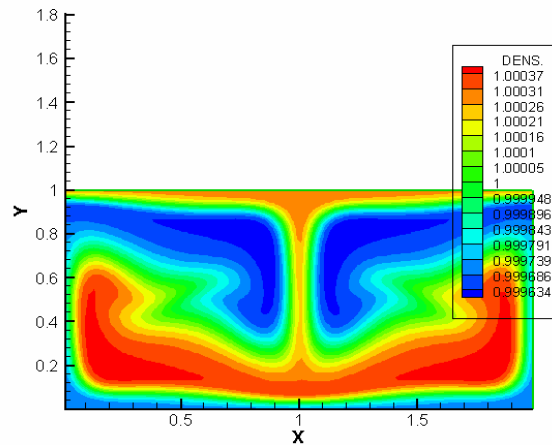
b. $t' = 2s$



c. $t' = 3s$

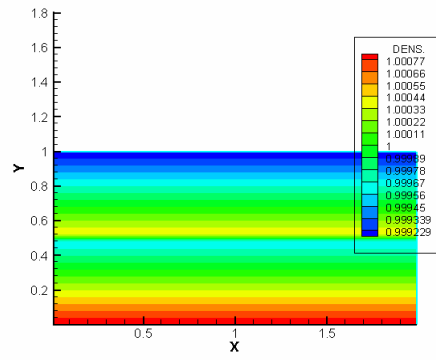
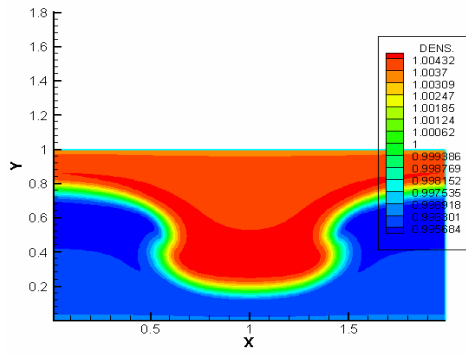


d. $t' = 4s$

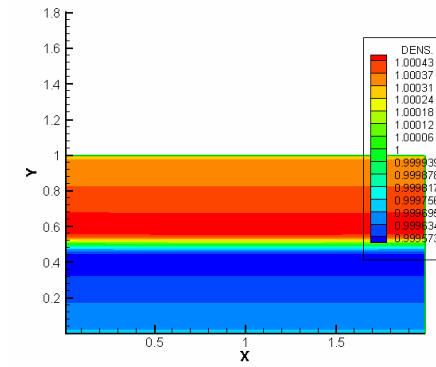
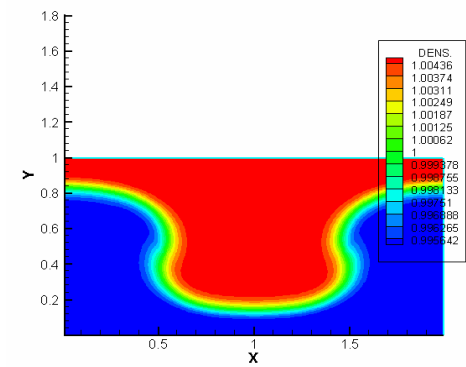


e. $t' = 5s$

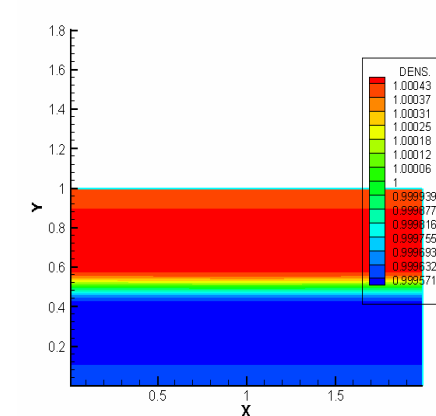
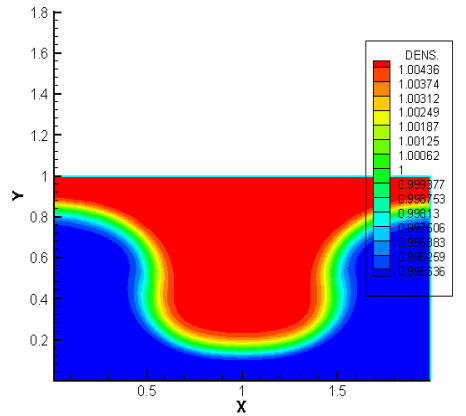
Figure 6.8: Evolution du champ de densité adimensionnel de $t' = 1s$ à $t' = 5s$ pour $\epsilon_T = 5 \cdot 10^{-3}$, $\epsilon_p = 10^{-3}$, $h' = 0.5mm$ ($H' = 1mm$) pour une longueur d'onde $\tilde{\lambda}' = 2mm$.



(a)



(b)

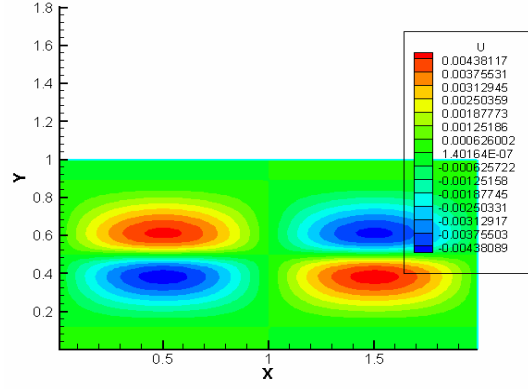
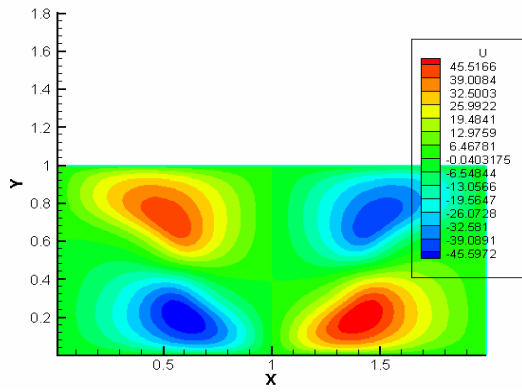


(c)

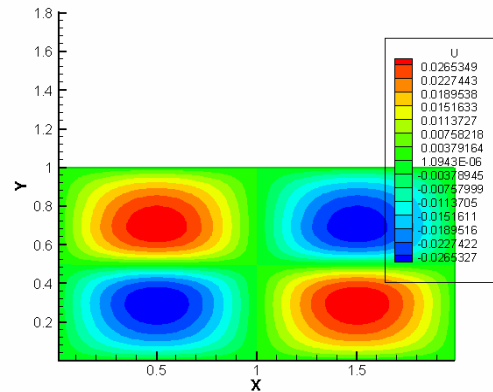
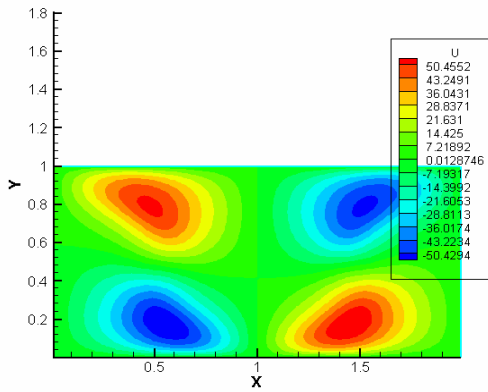
Figure 6.9: Evolution du champ de densité adimensionnel en fonction ε_T [(a) $\varepsilon_T = 10^{-3}$, (b) $\varepsilon_T = 5 \cdot 10^{-3}$, (c) $\varepsilon_T = 10^{-2}$] à $t'=1s$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ (à gauche), $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ (à droite), $h'=0.5mm$ ($H'=1mm$) pour une longueur d'onde $\tilde{\lambda}' = 2mm$.

Sur les *Figures 6.10* et *6.11* sont présentées les champs adimensionnels de la vitesse horizontale U et de la vitesse verticale V pour le même cas que la *Figure 6.9*. Quelques remarques s'imposent au vu de ces résultats :

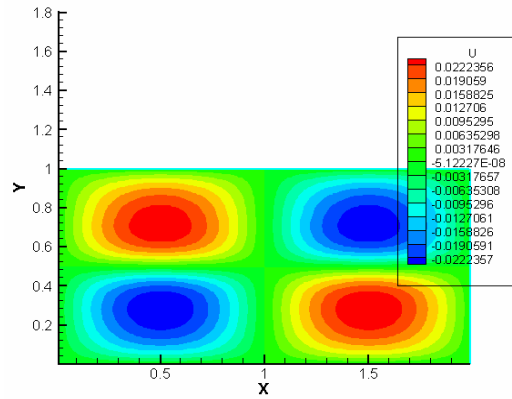
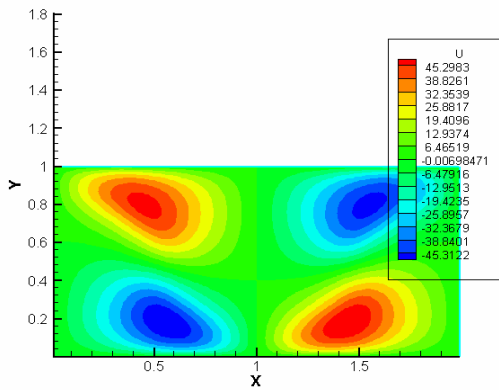
- Il existe deux cellules contra-rotatives : les champs de vitesse adimensionnelle (U et V) semblent être un peu plus perturbés dans le cas de fortes différences de densité initiale ($\varepsilon_\rho = 10^{-2}$) que dans le cas de faibles différences de densité ($\varepsilon_\rho = 10^{-3}$).
- Dans le cas d'une proximité faible du point critique ($\varepsilon_T = 10^{-3}$), les cellules ont tendance à être confinées au niveau de l'interface. Ceci est conforme à nos attentes puisque la compressibilité est grande proche du point critique et l'épaisseur du front de diffusion est petite, puisque le coefficient de diffusion thermique est très petit.
- On peut enfin remarquer que les amplitudes des vitesses deviennent plus petites lorsque $\varepsilon_T = 10^{-3}$. Comme on vient de le voir dans le paragraphe précédent, ce résultat est dû à la stratification initiale et ceci est bien illustré sur la *Figure 6.12*. Le champ de densité s'inverse pour le cas ($\varepsilon_T = 10^{-3}, \varepsilon_\rho = 10^{-3}$), c'est-à-dire que le champ global basé sur la différence de densité entre les deux parois est stable, ce qui explique des vitesses plus faibles pour ce cas.



(a)

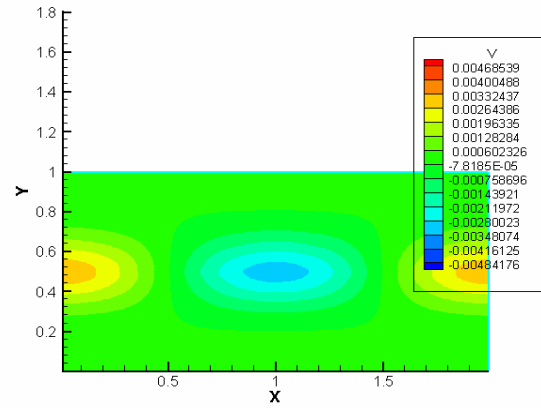
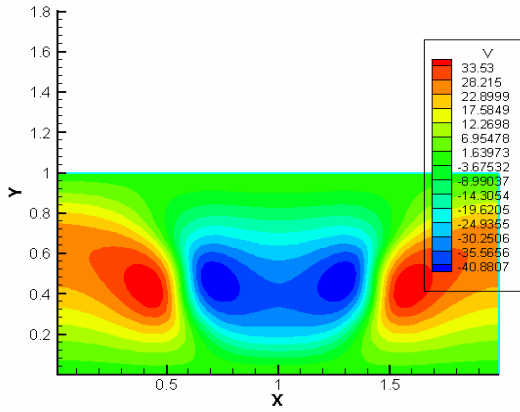


(b)

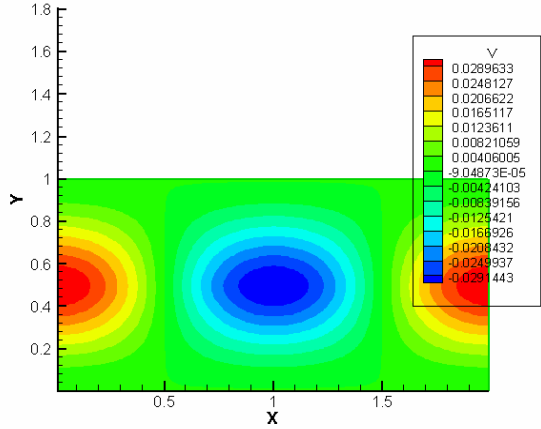
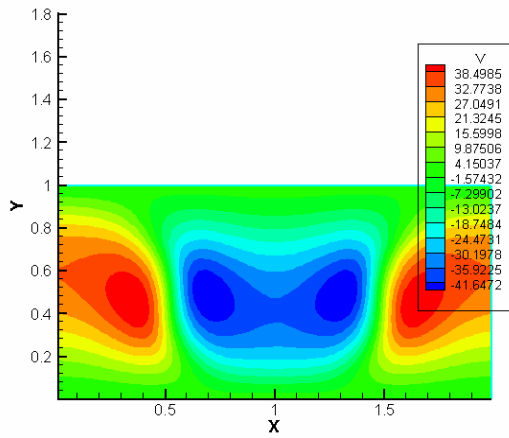


(c)

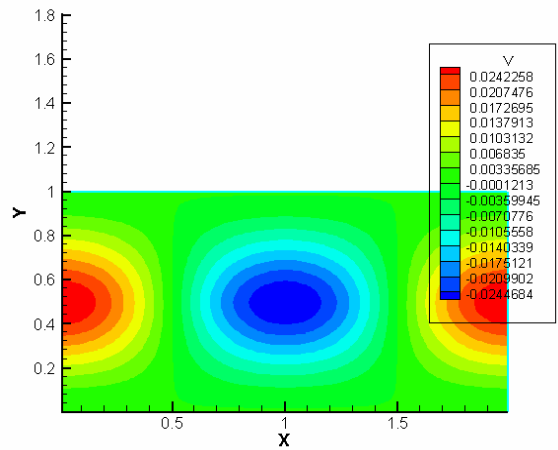
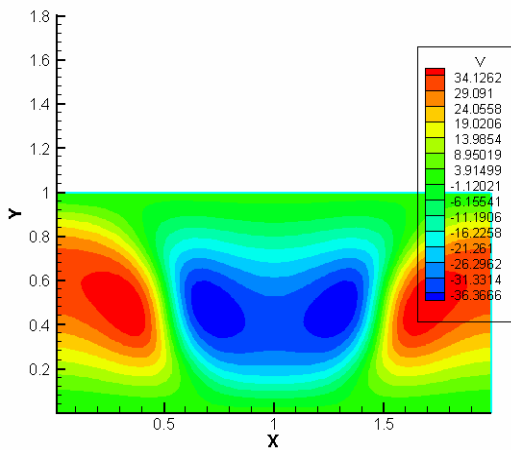
Figure 6.10: Evolution du champ de vitesse adimensionnel vertical U en fonction de ε_T [(a) $\varepsilon_T = 10^{-3}$, (b) $\varepsilon_T = 5 \cdot 10^{-3}$, (c) $\varepsilon_T = 10^{-2}$] à $t'=1s$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ (à gauche), $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ (à droite), $h'=0.5mm$ ($H'=1mm$) pour une longueur d'onde $\tilde{\lambda}' = 2mm$.



(a)



(b)



(c)

Figure 6.11: Evolution du champ de vitesse adimensionnel vertical V en fonction de ε_T [(a) $\varepsilon_T = 10^{-3}$, (b) $\varepsilon_T = 5 \cdot 10^{-3}$, (c) $\varepsilon_T = 10^{-2}$] à $t' = 1s$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ (à gauche), $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ (à droite), $h' = 0.5mm$ ($H' = 1mm$).

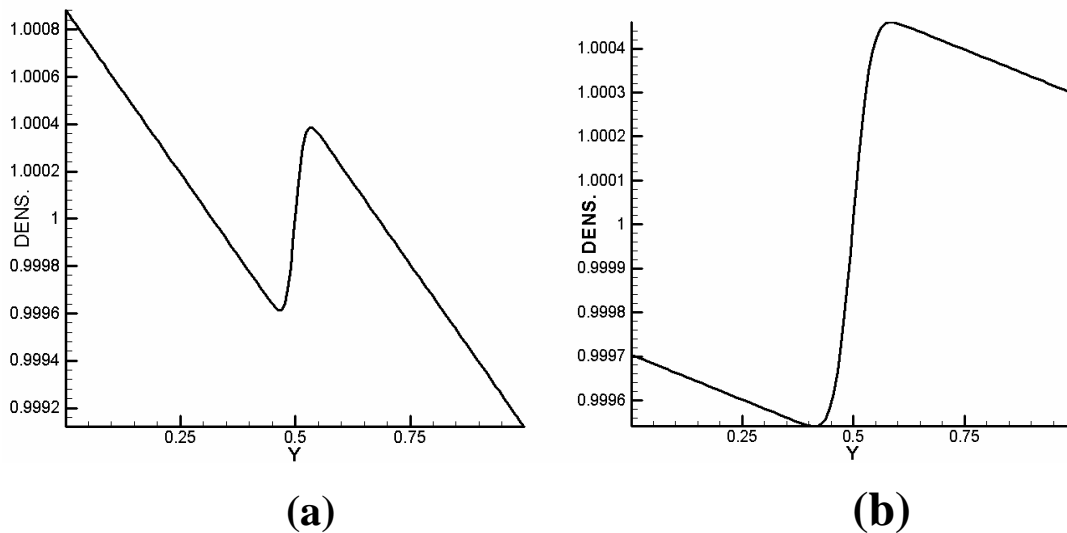


Figure 6.12: Profil de densité adimensionnel en fonction de la distance verticale y : (a) $\varepsilon_T = 10^{-3}$, (b) $\varepsilon_T = 5 \cdot 10^{-3}$ à $t'=1s$, $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ et $h'=0.5mm$ ($H'=1mm$).

Le jeu de paramètre de contrôle (ε_T , ε_ρ) semble jouer sur la stabilité du système pour ce cas $h=0.5$ (interface située au milieu). Il y a en effet un compromis entre le fait que proche du point critique, l'interface est de plus en plus instable mais aussi que la stratification devient de plus en plus importante. Par exemple, entre les deux cas de la *Figure 6.10* ($\varepsilon_T = 10^{-3}$ et $\varepsilon_T = 5 \cdot 10^{-3}$), la diminution de l'amplitude de la vitesse est de l'ordre de 80% dans le cas $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ alors que celle dans le cas $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ n'est que de 10%.

6.5 Conclusion

Nous avons effectué dans ce *Chapitre* une simulation numérique pour l'étude de la stabilité de deux couches d'un même fluide supercritique, initialement soumis à une différence de densité au niveau de l'« interface » tout en tenant compte de la stratification initiale. Nous avons résolu les équations adimensionnelles avec des nombres caractéristiques dépendant tous de la proximité du point critique (voir *Chapitre 3*). Le filtrage acoustique ne s'est pas avéré nécessaire puisque la nature filtrante de la méthode numérique des volumes finis (forme intégrale des équations) a suffi pour donner des résultats cohérents avec un pas de temps suffisamment grand afin de limiter le temps de calcul.

Un diagramme de stabilité a été développé en fonction de trois paramètres principaux : la différence de densité initiale entre les deux couches, la proximité au point critique et l'épaisseur de la couche inférieure. Pour une taille H' donnée de la cellule, les résultats ont prouvé que la configuration peut être stabilisée pour trois raisons : (i) quand l'épaisseur de la couche de diffusion basée sur le taux de croissance maximum est plus grand que l'épaisseur de la couche inférieure, (ii) quand la différence de densité est suffisamment faible et (iii) quand le fluide est suffisamment loin du point critique.

La stratification initiale devient très importante quand le point critique est approché et permet de stabiliser la configuration de type Rayleigh-Taylor pour des valeurs données des deux paramètres de contrôle : différence de densité initiale et proximité du point critique. Elle a montré que c'est la différence de densité entre les deux parois qui semble piloter la stabilité du système et pour des faibles valeurs de cette différence de densité, celle-ci devient très importante mais dans le sens stable, c'est-à-dire que le profil de densité s'inverse, le fluide lourd se trouve près de la paroi inférieure alors que celui qui est léger se trouve en haut près de la paroi supérieure : le système devient donc stable.

CONCLUSION GENERALE

Notre étude s'inscrit dans le cadre de l'hydrodynamique des fluides proches de leur point critique et plus particulièrement l'effet de la gravité sur cette hydrodynamique.

La convection thermo-acoustique (ou effet piston) dans les fluides supercritiques, découverte dans les années 90 a redynamisé les problèmes liés à cette hydrodynamique, et particulièrement ceux liés aux problèmes d'instabilité. En effet, les fluides proches de leur point critique de par leurs propriétés (certaines divergentes et d'autres évanescents au point critique) ont un comportement quelque peu inhabituel : comme la compressibilité diverge au point critique, on peut obtenir une stratification en densité identique à celle obtenue dans les couches atmosphériques, mais cette fois-ci dans des cellules de dimensions millimétriques. En effet, les instabilités de Rayleigh-Bénard se sont particulièrement basées sur le critère de Schwarzschild (ou gradient adiabatique) qui d'habitude n'est présent que dans des situations où les dimensions sont très grandes (exemple : couches atmosphériques). Dans cette configuration de Rayleigh-Bénard, il a été montré que la couche supérieure froide, normalement stable dans le cas d'un gaz parfait, est en fait instable dans le cas d'un fluide supercritique. Ce phénomène est dû au fait qu'il existe un effet piston froid dû à la couche limite de contraction, ce qui est analogue à l'effet piston chaud existant au niveau de la couche limite chaude (en dilatation). Cet effet piston froid (sur la paroi non chauffée) donne naissance à des gouttes « froides » qui tombent sous la gravité et cette forme d'instabilité peut s'apparenter à une instabilité de type Rayleigh-Taylor. Nous avons donc considéré le problème d'une instabilité de front de diffusion, assimilé à deux couches d'un même fluide supercritique à deux densités différentes (en configuration instable).

Pour ce faire, nous nous sommes basés sur la simulation numérique directe des équations de Navier-Stokes instationnaires et compressibles d'un fluide newtonien couplées aux équations d'énergie et de l'état linéarisée. Nous avons choisi d'utiliser la méthode numérique des volumes finis puisque c'est une méthode à formulation variationnelle (forme intégrale des équations). Par conséquent, elle semble être bien adaptée aux problèmes que l'on considère ici, puisqu'aux fortes variations des propriétés thermophysiques, il existe des zones de très forts gradients.

Dans la mesure où pour des écoulements compressibles (comme c'est le cas ici), les phénomènes acoustiques dominant le problème physique, on est souvent confronté à des pas de temps très petits, au moins de l'ordre $0.1 \times t_a$ (avec t_a le temps acoustique). Nous avons initialement choisi de filtrer ces ondes (dans l'approximation à faible nombre de Mach) pour permettre de réduire les coûts liés aux calculs.

Nous avons montré que notre configuration de deux couches est analogue à celle de l'instabilité de Rayleigh-Taylor dans le cas de deux fluides miscibles à condition de remplacer, dans les lois de dispersion, le coefficient de diffusion massique entre les deux fluides par le coefficient de diffusion thermique. Dans le cas où la différence de densité relative entre les deux couches est telle que dans le cas Rayleigh-Bénard on est stable, on a aussi montré, dans le régime linéaire, qu'en diminuant l'épaisseur de la couche inférieure, on stabilisait de plus en plus notre configuration de type Rayleigh-Taylor. En fait, lorsque cette épaisseur devient inférieure à l'épaisseur de la couche de diffusion thermique calculée à partir du taux de croissance maximal, le mécanisme de Rayleigh-Taylor devient stable. Pour de faibles différences de densité que l'on a considérées et dans le régime linéaire, le symétrique (augmentation de l'épaisseur de la couche inférieure) n'avait pas d'effet sur la courbe du taux de croissance. L'analyse de la stabilité de notre configuration dépend en fait de deux paramètres : les hauteurs des deux couches et la différence de densité (ou température) entre les deux couches.

Nous avons ensuite considéré la même configuration mais en tenant compte cette fois-ci de la stratification initiale. Nous avons résolu les équations adimensionnelles avec des nombres caractéristiques dépendant tous de la proximité du point critique. Il s'est avéré que le filtrage acoustique n'était pas nécessaire, puisque la nature filtrante de la méthode numérique des volumes finis (forme intégrale des équations) a suffi pour donner des résultats cohérents avec un pas de temps suffisamment grand, afin de limiter le temps de calcul. Un diagramme de stabilité a été développé en fonction de trois paramètres principaux : la différence de densité initiale entre les deux couches, la proximité au point critique et l'épaisseur de la couche inférieure.

Pour une taille donnée de la cellule, les résultats ont prouvé que la configuration peut être stabilisée pour trois raisons : (i) quand l'épaisseur de la couche de diffusion basée sur le taux de croissance maximum est plus grand que l'épaisseur de la couche inférieure, (ii) quand la différence de densité est suffisamment faible et (iii) quand le fluide est suffisamment loin du point critique.

Enfin, nous avons montré que la stratification initiale devient très importante quand le point critique est approché et permet de stabiliser la configuration de type Rayleigh-Taylor pour des valeurs données des deux paramètres de contrôle : différence de densité initiale et proximité du point critique. Elle a montré que c'est la différence de densité entre les deux parois qui semble piloter la stabilité du système et pour des faibles valeurs de cette différence de densité, celle-ci devient très importante mais dans le sens stable. En effet, le profil de densité s'inverse, le fluide lourd se trouve près de la paroi inférieure alors que celui qui est léger se trouve en haut près de la paroi supérieure : le système devient donc stable.

ANNEXE 1 : Propriétés thermophysiques de l'He³

Le but de cette annexe est d'évaluer les propriétés thermophysiques de l'He³ qui ont été établies par A.Kogan et H.Meyer de l'Université de Duke (USA) [Kog00].

Les paramètres critiques de l'He³ sont $T'_c = 3.316$ K, $P'_c = 0.117$ MPa et $\rho'_c = 41.45$ kg/m³.

A partir des données expérimentales de la littérature (nous ne les rappellerons pas ici), une

expression interpolée des quantités λ' , C'_v , $\left(\frac{\partial P'}{\partial T'}\right)_{\rho'}$ et $\chi'_T = \frac{1}{\rho'} \left(\frac{\partial \rho'}{\partial P'}\right)_{T'}$ a été établie.

De ces quantités, C'_p et d'autres propriétés thermodynamiques peuvent être calculées.

Par exemple, C'_p est donnée par la relation de Mayer généralisée [Sea63] :

$$\rho' C'_p = \rho' C'_v + \frac{T'}{\rho'} \left(\frac{\partial P'}{\partial T'}\right)_{\rho'}^2 \left(\frac{\partial \rho'}{\partial P'}\right)_{T'} \quad (\text{A1.1})$$

La capacité calorifique à volume constant [Bro72] peut être interpolée par l'expression suivante :

$$\rho' C'_v [\text{J/cm}^3 \text{K}] = w'_0 \epsilon_T^{-0.11} + w'_1 + w'_2 \epsilon_T \ln \epsilon_T + w'_3 (\epsilon_T \ln \epsilon_T)^2 \quad (\text{A1.2})$$

où $w'_0 = 0.1031$, $w'_1 = 1.832 \times 10^{-3}$, $w'_2 = -0.0738$, $w'_3 = -6.089 \times 10^{-3}$.

Toutes ces constantes sont exprimées en $[\text{J/cm}^3 \text{K}]$.

Le coefficient de pression $\left(\frac{\partial P'}{\partial T'}\right)_{\rho'}$ a été mesuré par Behringer *et al.* [Beh76] et l'expression

interpolée à partir de ces données est :

$$\left(\frac{\partial P'}{\partial T'}\right)_{\rho'} \frac{T'_c}{P'_c} = v_0 + v_1 \epsilon_T + v_2 \epsilon_T \ln \epsilon_T + v_3 (\epsilon_T \ln \epsilon_T)^2 + v_4 (\epsilon_T \ln \epsilon_T)^3 \quad (\text{A1.3})$$

avec $v_0 = 3.415$, $v_1 = 10.39$, $v_2 = 0.9803$, $v_3 = -11.5717$, $v_4 = 1.770$.

La compressibilité isotherme $\chi'_T = \frac{1}{\rho'} \left(\frac{\partial \rho'}{\partial P'} \right)_T$ a été établie par les mesures de Pittman *et al.*

[Pit79] pour $0.02 < \varepsilon_T < 0.2$:

$$\chi'_T = 0.209 \varepsilon_T^{-1.19} \frac{1}{P'_c} \quad (\text{A1.4})$$

Et enfin la conductivité thermique, bien analysée dans [Pit82] a été interpolée sous la forme suivante, possédant par ailleurs une partie régulière et une partie singulière :

$$\lambda' = \lambda'_{\text{sing}} + \lambda'_{\text{reg}} \quad (\text{A1.5})$$

avec $\lambda'_{\text{sing}} = 4.2 \cdot 10^{-6} \varepsilon_T^{-0.575} [\text{W/cmK}]$ et $\lambda'_{\text{reg}} = (0.9384 + 0.1634 T) 10^{-4} [\text{W/cmK}]$

Ces résultats sont valables pour des valeurs de $\varepsilon_T > 0.05$ car très près du point critique, le fait que δT_c soit petit et la brusque variation de la conductivité font que les mesures expérimentales ne peuvent pas être fiables. Connaissant $\left(\frac{\partial \rho'}{\partial P'} \right)_T$ à partir de l'expression de la

compressibilité et $\left(\frac{\partial P'}{\partial T'} \right)_{\rho'}$ à partir de (A1.3), on peut calculer l'expression de l'expansion thermique β'_T .

A partir de ces expressions, il est possible de déterminer les valeurs de toutes les propriétés thermophysiques en fonction de la distance au point critique. Le *Tableau A1.1* [Mey02] donne quelques unes de ces valeurs et qui ont été utilisées dans nos simulations.

ϵ	$C_V,$ (P_C/T_C)	$(\partial P/\partial T)_{\rho},$ (P_C/T_C)	$10^4 \lambda,$ (W/cm K)	$D_T,$ (cm^2/sec)	Pr	γ
5.00×10^{-4}	6.95	3.42	5.18	7.27×10^{-7}	5.86×10^2	2.95×10^3
1.00×10^{-3}	6.45	3.42	4.01	1.28×10^{-6}	3.28×10^2	1.40×10^3
1.14×10^{-3}	6.36	3.42	3.83	1.43×10^{-6}	2.93×10^2	1.21×10^3
2.00×10^{-3}	6.00	3.42	3.21	2.33×10^{-6}	1.77×10^2	6.62×10^2
3.18×10^{-3}	5.71	3.43	2.84	3.56×10^{-6}	1.15×10^2	4.03×10^2
5.00×10^{-3}	5.46	3.43	2.55	5.46×10^{-6}	7.48×10^1	2.48×10^2
9.00×10^{-3}	5.16	3.45	2.28	9.68×10^{-6}	4.19×10^1	1.33×10^2
1.00×10^{-2}	5.11	3.45	2.24	1.07×10^{-5}	3.77×10^1	1.19×10^2
1.30×10^{-2}	4.99	3.46	2.16	1.40×10^{-5}	2.90×10^1	9.04×10^1
2.00×10^{-2}	4.81	3.48	2.04	2.16×10^{-5}	1.87×10^1	5.77×10^1
3.00×10^{-2}	4.67	3.49	1.96	3.25×10^{-5}	1.24×10^1	3.81×10^1
4.00×10^{-2}	4.58	3.51	1.91	4.34×10^{-5}	9.28×10^0	2.85×10^1
5.00×10^{-2}	4.52	3.52	1.88	5.42×10^{-5}	7.43×10^0	2.28×10^1
6.00×10^{-2}	4.48	3.54	1.86	6.48×10^{-5}	6.22×10^0	1.91×10^1
7.00×10^{-2}	4.45	3.55	1.85	7.52×10^{-5}	5.36×10^0	1.65×10^1
8.00×10^{-2}	4.42	3.56	1.84	8.55×10^{-5}	4.71×10^0	1.45×10^1
9.00×10^{-2}	4.40	3.58	1.83	9.54×10^{-5}	4.22×10^0	1.30×10^1
1.00×10^{-1}	4.38	3.59	1.83	1.05×10^{-4}	3.83×10^0	1.18×10^1
1.20×10^{-1}	4.36	3.63	1.82	1.24×10^{-4}	3.25×10^0	1.00×10^1
1.40×10^{-1}	4.34	3.69	1.82	1.42×10^{-4}	2.84×10^0	8.75×10^0
1.60×10^{-1}	4.32	3.75	1.82	1.59×10^{-4}	2.53×10^0	7.80×10^0
1.70×10^{-1}	4.31	3.79	1.82	1.67×10^{-4}	2.41×10^0	7.41×10^0
1.80×10^{-1}	4.30	3.83	1.82	1.75×10^{-4}	2.30×10^0	7.07×10^0
2.00×10^{-1}	4.29	3.92	1.83	1.91×10^{-4}	2.11×10^0	6.48×10^0

Tableau A1.1 : Propriétés thermophysiques en fonction de ϵ_T . Les quantités $C'_V, \left(\frac{\partial P'}{\partial T'}\right)_{\rho'}$ sont adimensionnées

par P'/T'_c . Le nombre de Prandtl est donné par $P_r = \frac{\nu'}{D'_T}$: dans cette notation D'_T est la diffusivité thermique

et ν' la viscosité cinématique donnée par : $\nu' = \eta'/\rho'$ avec $\eta' \approx 16.7 \mu\text{Poise}$ la viscosité dynamique qui varie très peu en fonction de ϵ_T .

ANNEXE 2 : Instabilités de Rayleigh-Bénard avec l'approximation de Boussinesq

A2.1 - Position du problème

L'instabilité de *Rayleigh-bénard* est une instabilité qui provoque l'apparition de courants convectifs au sein d'un fluide chauffé par le bas. Afin de modéliser cette situation, on a étudié la stabilité d'un fluide compris entre deux plaques infinies, et soumis à une différence de température initiale correspondant à un chauffage par le bas (la paroi inférieure est plus chaude que la paroi supérieure). La température de la paroi supérieure est T_0 , et la température de la paroi inférieure est T_1 . La distance entre les deux parois est d . Cette situation est représentée sur la *Figure 1*.

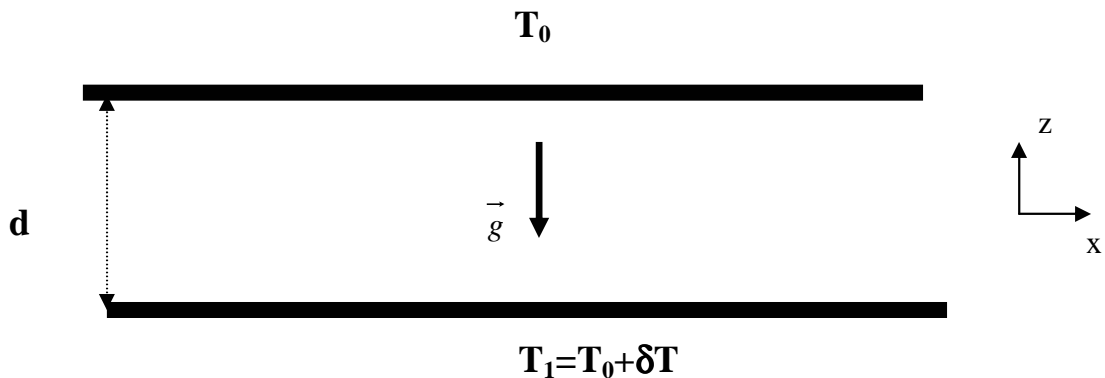


Figure A2.1: Fluide confiné entre deux parois infinies et soumis à une différence de température (chauffage par le bas).

- Le seul moteur de la convection est l'action du champ de gravité sur le gradient de densité.
- Le fluide est supposé incompressible; plus précisément, la pression varie suffisamment peu dans le fluide pour que l'on puisse faire abstraction de la variation de la densité due à la variation de pression. Ceci est réaliste dans le cas des cavités de faible dimension.
- La viscosité, la conductivité et la diffusivité thermique, sont supposées constantes dans le domaine de température ($\delta T = T_1 - T_0$) considéré.

- La variation de densité avec la température est supposée linéaire dans le domaine de température considéré (le coefficient de dilatation thermique est constant).

L'équation d'état du fluide est donc (pour un faible écart de température δT) :

$$\rho = \rho_0 (1 - \alpha \delta T) \quad (\text{A2.1})$$

où β_P est le coefficient de dilatation thermique.

- La variation de densité avec la température n'est prise en compte que dans l'expression du terme de pesanteur de l'équation du mouvement.

- La chaleur dissipée par friction dans le fluide est négligeable.

- Nous considérons dans notre étude le cas d'une convection stationnaire.

Les hypothèses précédentes constituent l'approximation de *Boussinesq*, et sont réalisées à l'échelle du laboratoire, tout au moins dans un voisinage du seuil de convection.

A2.2 - Equations dimensionnelles

Les équations générales qui régissent le mouvement d'un fluide dû à une instabilité thermique, ainsi que son champ de température, s'écrivent alors en exprimant la conservation de masse (ou équation de continuité), de la quantité de mouvement et de l'énergie :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div}(\vec{u}) = 0 \\ (\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla P_1 + \beta_P \Delta T g \vec{e}_z + \nu \Delta \vec{u} \\ \vec{u} \cdot \vec{\nabla} T = \kappa \Delta T \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (\text{A2.2}) \\ (\text{A2.3}) \\ (\text{A2.4}) \end{array}$$

où $\vec{u}(u,v,w)$ est le champ des vitesses, T le champ de température, $P_1 = P + \rho_0 g z$ est la pression motrice, ν est la viscosité cinématique, $\kappa = \frac{k}{\rho_0 C_p}$ est la diffusivité thermique avec k

la conductivité thermique et C_p la chaleur spécifique à pression constante.

Nous avons joint aux équations précédentes les conditions limites thermiques et mécaniques imposées par la présence des parois supérieure et inférieure. Nous avons

considéré le cas où la couche de fluide étendue dans une cavité rectangulaire finie, de rapport de forme $\Gamma = L/d$. Les conditions limites sont donc :

- $\vec{u} = \vec{0}$ sur toutes les parois.
- Les températures des parois supérieure et inférieure sont respectivement T_0 et T_1 , et dans notre milieu confiné, les parois latérales sont supposées adiabatiques.

A2.3 - Equations adimensionnelles

On considère les échelles caractéristiques suivantes afin de résoudre les équations sous forme adimensionnelle :

$$\bar{x}^* = \frac{\bar{x}}{d}, \quad t^* = \frac{\kappa}{d} t, \quad \vec{u}^* = \frac{\vec{u}d}{\kappa}, \quad P_1^* = \frac{d^2 p_1}{\rho_0 \kappa^2}, \quad \theta^* = \frac{T - T_0}{T_1 - T_0}$$

En projetant les équations (A2.2-A2.4) sur les axes (ox, oz), on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial w^*}{\partial z^*} = 0 \\ u^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + w^* \frac{\partial u^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P_1^*}{\partial x^*} + \text{Pr} \Delta u^* \\ w^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + w^* \frac{\partial w^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P_1^*}{\partial z^*} + \text{Ra Pr} \theta^* + \text{Pr} \Delta w^* \\ u^* \frac{\partial \theta^*}{\partial x^*} + w^* \frac{\partial \theta^*}{\partial z^*} = \Delta \theta^* \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(A2.5)} \\ \text{(A2.6)} \\ \text{(A2.7)} \\ \text{(A2.8)} \end{array}$$

avec les conditions aux limites adimensionnelles suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{ll} z^* = 0 & \theta^* = 1 \\ z^* = 1 & \theta^* = 0 \end{array} \right.$$

où $\text{Pr} = \frac{\nu}{\kappa}$ est le nombre de Prandtl et $\text{Ra} = \beta_p g \frac{d^3 \Delta T}{\kappa \nu}$ le nombre de Rayleigh.

A2.4 - Les nombres sans dimension du problème

L'illustration des effets stabilisants dus à la diffusion de la température et de la vorticité, peut se faire à partir de l'exemple d'une goutte de liquide, de rayon d , chauffée soudainement, dans un milieu isotherme. En raison de son échauffement, la goutte va avoir tendance à monter.

Nombre de Prandtl (Pr)

Deux cas limites sont à considérer selon les valeurs relatives de κ et de ν , ou plus précisément selon les valeurs relatives du temps de relaxation de la diffusion de la

température $\tau_{th} = \frac{d^2}{\kappa}$, et du temps de relaxation de la diffusion de la vitesse $\tau_v = \frac{d^2}{\nu}$.

Le nombre de Prandtl mesure l'importance relative de ces deux temps : $Pr = \frac{\tau_{th}}{\tau_v} = \frac{d^2/\kappa}{d^2/\nu} = \frac{\nu}{\kappa}$.

- Dans le cas où $\kappa \gg \nu$, soit $Pr \ll 1$, τ_{th} est petit par rapport à τ_v , donc l'effet moteur (poussée d'Archimède due à la différence de température δT) devient nul.

- Dans le deuxième cas ($\kappa \ll \nu$, donc $Pr \gg 1$), le temps de relaxation de la vitesse est court, et le mouvement s'arrête dès que l'excès de température ΔT a fini de relaxer, donc les termes visqueux l'emportent.

Dans ce type de problème, on peut faire une analogie, qualitative, entre le nombre de Prandtl et l'inverse du nombre de *Reynolds* ($Re = U_0 L / \nu$, où U_0 et L sont la vitesse et longueur caractéristique).

Nombre de Rayleigh (Ra)

La grandeur adimensionnelle $Ra = \beta_p g \frac{d^3 (T_1 - T_0)}{\kappa \nu}$ est le nombre de *Rayleigh*, c'est

le paramètre de contrôle de l'instabilité. Si Ra est plus grand qu'une valeur critique Ra_c , le mouvement convectif s'établit.

On observe que **Ra** peut s'exprimer aussi comme un rapport des temps caractéristiques des phénomènes stabilisants et déstabilisants. Pour les premiers, on utilise les termes de diffusion $\tau_{th} = d^2/\kappa$ et $\tau_v = d^2/\nu$, et pour les derniers, le temps d'advection dû à la poussée d'Archimède $\tau_a^2 = d/[\beta_p g(T_1 - T_0)]$.

Ainsi Ra peut s'écrire :
$$Ra = \frac{\tau_{th} \tau_v}{\tau_a^2} = \beta_p g \frac{d^3 (T_1 - T_0)}{\kappa \nu}$$

Le rapport d'aspect (Γ) :

Ce nombre ne dépend que de la géométrie de la cellule : $\Gamma = \frac{L}{d}$

- $\Gamma \rightarrow \infty$ correspond à une cellule très large ; les parois n'influencent pas l'écoulement et c'est très souvent dans ce cadre que s'effectuent les calculs théoriques.
- $\Gamma \rightarrow 0$ Correspond à une cellule de plus en plus élancée ; la valeur seuil du nombre Rayleigh, (**Ra**_{seuil}) dépend alors de la valeur de Γ .

Ces deux derniers nombres sont souvent fixés lors des mesures.

A2.5 - Seuil de convection :

Lorsque le fluide est au repos les isothermes sont des droites horizontales. Les couches de fluide les plus froides donc les plus denses, se trouvent au dessus des couches les moins denses, et il est à priori surprenant de constater que l'équilibre soit réalisé tant que l'écart de température $\delta T = (T_1 - T_0)$ est inférieur à un seuil critique δT_c . Lorsque la température δT est supérieur à δT_c , un mouvement de convection s'établit, et provoque la distorsion du réseau d'isothermes. Les études expérimentales montrent que près du seuil δT_c , la convection est stationnaire, et possède une vitesse qui croît comme la racine de l'écart au seuil. Suffisamment près du seuil, le terme visqueux est donc celui qui contrebalance le terme moteur dans l'équation de *Navier-Stokes*.

Les échelles caractéristiques de ces termes sont : $\nu \Delta \bar{u} \sim \nu \frac{u}{d^2}$ et $u \sim \frac{\kappa}{d}$.

Supposons un mouvement convectif de faible vitesse établi; il ne se maintiendra que si le terme moteur $g\beta_p T$ est suffisamment important par rapport au terme visqueux $\nu \Delta \bar{u}$ compte tenu de l'échelle de vitesse, imposée par le mécanisme de diffusion thermique. Cela s'écrit :

$$g\beta\delta T \geq \frac{\nu K}{d^3} * Ra_c \quad (Ra_c \text{ est une constante})$$

Nous constatons que ce sont les termes de diffusion qui stabilisent le fluide. La convection a lieu si $Ra \geq Ra_c$, où Ra_c est le nombre de Rayleigh critique. Sa valeur dépend des conditions limites et de la géométrie de la cellule de convection.

A2.6- Résultats complémentaires du *Chapitre 5*

Nous présentons les résultats un peu plus complets du *Chapitre 5* pour différents rapports de forme (1 et 4), dans le cas stationnaire ($Ra < 2,5 \times 10^4$) [Ger72] et pour un nombre de Prandtl ($Pr=0,7$) avec un maillage uniforme. Le choix du maillage ($N1 \times N2 = 200 \times 132$) est justifié sur la figure A2.2 où est représenté le module de vitesse au centre de la cavité en fonction du nombre de points $N = N1 \times N2$ pour un rapport de forme de 2 et un nombre de Rayleigh de 5000.

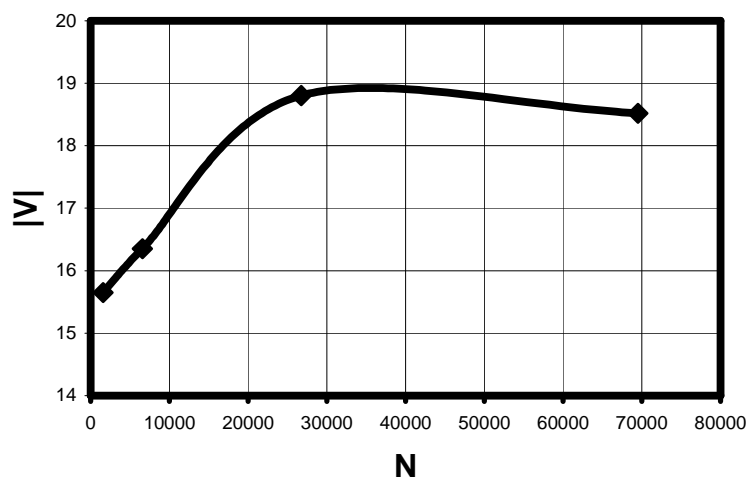


Figure A2.2 : Module de vitesse en fonction du nombre de points $N = N1 \times N2$ pour un rapport de forme de 2 et pour un nombre de Rayleigh de 5000.

a - Rapport de forme 1

Sur la *Figure A2.2a*, on a représenté la variation du module de la vitesse au centre d'une cavité de rapport de forme 1. La courbe a une forme parabolique, la vitesse est nulle à $Ra < Ra_c = 2827,58$ et dans ce cas le profil de température est diffusif (*Figure A2.2b*). Pour des valeurs supérieures à Ra_c , on a l'apparition de la convection (*Figure A2.3a* pour le champ de température et la *Figure A2.3b* pour le champ de vorticité). On reviendra sur ce cas lors de la comparaison avec la littérature (voir § A2.6b).

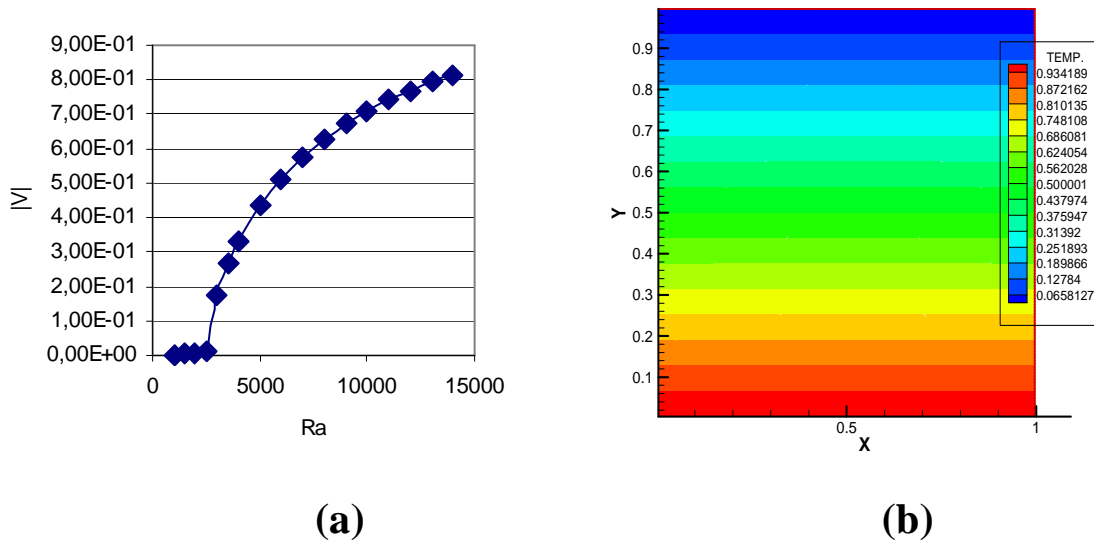


Figure A2.3 : (a) Variation du module de la vitesse adimensionnelle au centre de la cavité en fonction du nombre de Rayleigh et (b) champ de température adimensionnel (pour un rapport de forme de 1).

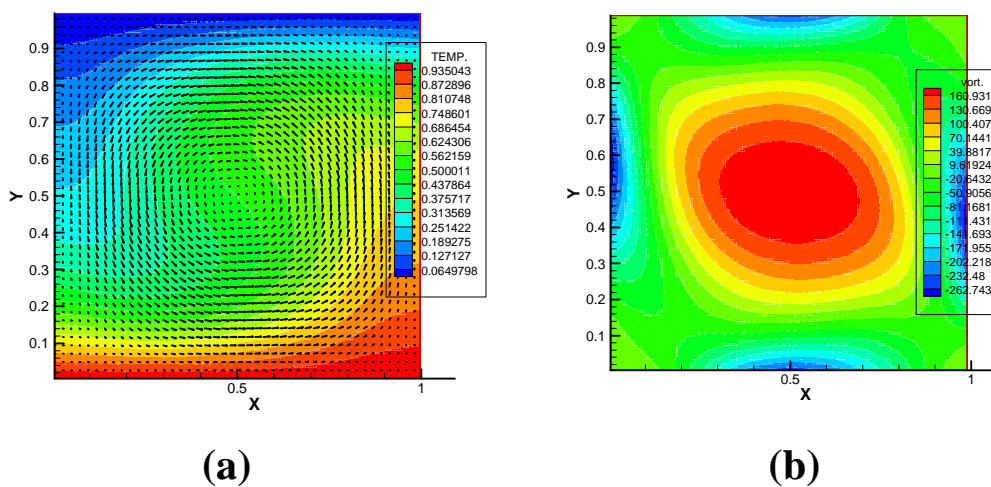


Figure A2.4 : (a) Contour de température avec le champ de vitesse et (b) champ de vorticité (pour un rapport de forme de 1 et $Ra=10000$).

b - Rapport de forme 4 et comparaison avec la littérature

Sur la *Figure A2.4*, on présente la variation du module de la vitesse adimensionnelle en échelle logarithmique, au centre de la cavité en fonction du nombre de Ra. La courbe a la même forme que celle issue de la littérature [Zie82] (voir *Figure A2.5*).

Les vitesses sont du même ordre de grandeur : on a par exemple calculé à $Ra=5000$ le rapport $(h/H)_{\text{ortel}}$ et $(h/H)_{\text{numérique}}$ (voir *Figures A2.4* et *A2.5*) et on trouve que l'erreur relative entre ces deux rapports est de l'ordre de 1.1% , cela valide notre code de calcul.

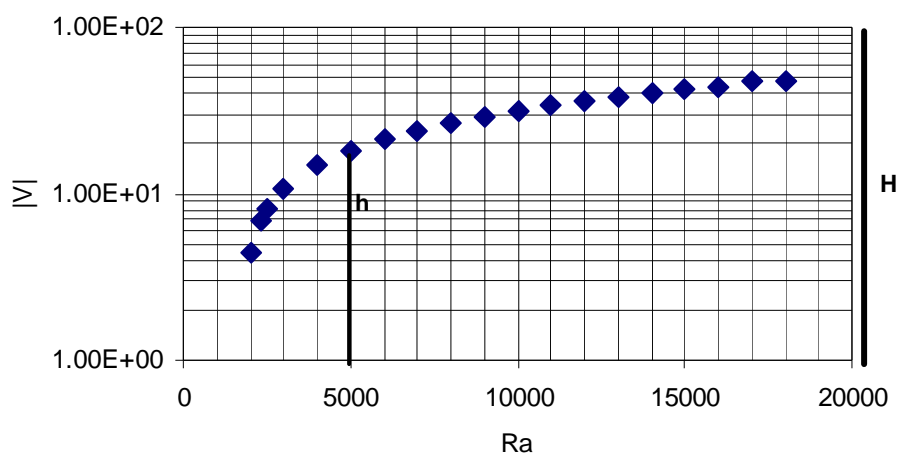


Figure A2.5 : Variation du module de la vitesse adimensionnelle, en échelle logarithmique (pour la vitesse), au centre de la cavité en fonction du nombre de Rayleigh.

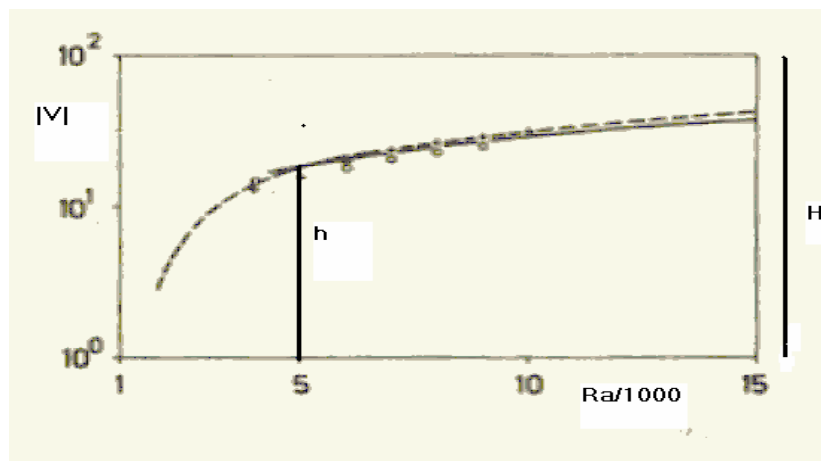


Figure A2.6 : Résultat tiré de [Zie82], variation de la vitesse en échelle log-log en fonction du Ra.

A2.7 - L'effet du rapport de forme sur le nombre de Rayleigh critique

D'après les résultats présentés dans les paragraphes précédents, on voit l'effet du rapport de forme de la cavité sur le mécanisme d'instabilité convective dans une cellule en configuration de Rayleigh-Bénard.

Sur la *Figure A2.6*, on remarque que la variation de Rac dépend de la forme géométrique de la cavité. Pour des cavités de rapport de forme plus petit, la valeur du Rac est plus importante, donc on est plus stable. Les résultats trouvés numériquement sont en bon accord avec la littérature [Zie82], sauf pour le cas du rapport de forme de 1 (erreur relative=7,99%). Pour des rapports de forme que nous avons considérés, on voit que la courbe tend vers une asymptote à $Ra=1708$.

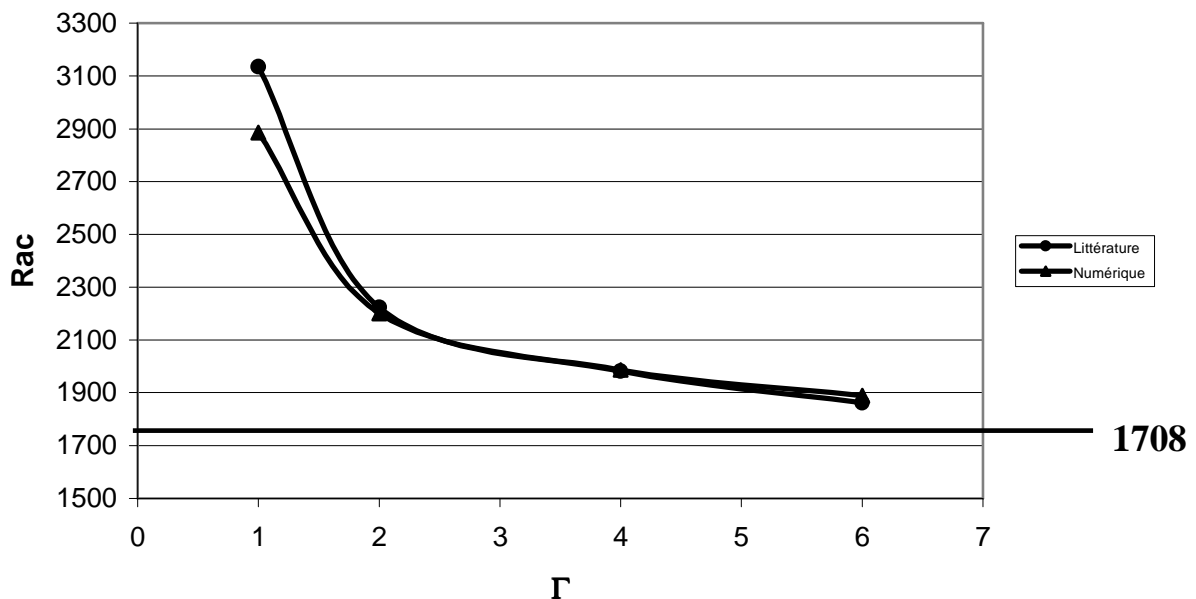


Figure A2.7 : La variation du Rac en fonction du rapport de forme.

A2.8 Conclusion

Nous avons étudié la convection de Rayleigh-Bénard dans une cavité remplie d'air ($Pr=0.7$). Nous avons considéré tous les régimes d'écoulement stationnaire (diffusifs lorsque $Ra < Rac$, convectifs lorsque $Ra > Rac$) pour un fluide incompressible dans l'approximation de Boussinesq. L'étude en fonction du rapport de forme et du nombre de Rayleigh montre des

résultats concordants avec la littérature [Zie82]. Cette première étape nous a permis de valider le code (voir *Chapitre 5*).

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1 : Coordonnées du point critique de quelques corps [Gar92].	122
Tableau 1.2 : Propriétés au voisinage du (PC) avec les exposants associés [Sen78] : Γ , A, B, ξ_0 et D sont les cofacteurs caractérisant la substance étudiée, $h(r)$ est la fonction de corrélation qui mesure la corrélation statique entre la densité en un point et la densité à une distance r de ce point. On note $\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c}$.	166
Tableau 1.3 : Comparaison des exposants critiques classiques et réels [Sen78].	199
Tableau 3.1 - Propriétés thermodynamiques de l'He ³ en fonction de la distance ε_T au point critique pour une cellule de hauteur H'=1mm.	544
Tableau 4.1 : La fonction A(P) pour les différents schémas.	666
Tableau 5.1: Longueurs d'onde de coupure des calculs numériques issus de nos simulations et analytiques [Duf62], [Kur95] en fonction de ε_T et ε_p .	84
Tableau 6.1: Valeurs numériques de la longueur d'onde de coupure (avec et sans filtrage acoustique) comparées à la valeur analytique de Duff <i>et al.</i> [Duf62] pour des valeurs fixées de ε_T et ε_p , et une cellule de hauteur H'=1mm.	966
Tableau A1.1 : Propriétés thermophysiques en fonction de ε_T . Les quantités $C'_v, \left(\frac{\partial P'}{\partial T'}\right)_{\rho'}$ sont adimensionnées par P'_c/T'_c . Le nombre de Prandtl est donné par $P_r = \frac{\nu'}{D'_T}$: dans cette notation D'_T est la diffusivité thermique et ν' la viscosité cinématique donnée par : $\nu' = \eta'/\rho'$ avec $\eta' \approx 16.7 \mu\text{Poise}$ la viscosité dynamique qui varie très peu en fonction de ε_T .	1177

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1: Surface d'états d'un corps pur	10
Figure 1.2 : Diagramme P, T d'un corps pur	10
Figure 1.3 : Diagramme P, V d'un corps pur	11
Figure 1.4 : (a) les 2 phases (liquide et gaz) clairement apparentes (ménisque) pour le CO ₂ . (b) avec un accroissement de température, lorsque la température et la pression critiques sont atteintes, les phases (liquide et gaz) ne sont plus visibles, la phase supercritique apparaît (Laboratoire LCSG, Université de Leeds).	13
Figure 1.5 : Représentation schématique du mécanisme de l'Effet Piston (Le niveau de gris symbolise la température)	23
Figure 1.6 : Le séchage à l'air et le séchage avec (FSC) [Pes99].	25
Figure 2.1 : Différence de température à partir de laquelle la convection démarre, donnée par l'équation (2.5) pour le CO ₂ en fonction de la proximité du point critique. H correspond à la hauteur totale de la cavité et h à l'épaisseur de la couche de diffusion thermique. La diffusion étant quasi-absente, cette épaisseur est en fait quasi-constante [Ami01].	37
Figure 2.2 : Champ de température à t=8.8 s avec une différence de température entre les deux parois de $\Delta T=10$ mK à 1K du point critique [Ami01].	37
Figure 2.3 : Courbe de dispersion d'une instabilité de Rayleigh-Taylor (a) Relation correspondant au cas sans viscosité et sans tension superficielle, (b) situation avec viscosité mais sans tension superficielle, (c) cas général, avec viscosité et tension superficielle.	41
Figure 3.1: Le modèle géométrique.	44
Figure 3.2 : Allure qualitative des propriétés thermodynamiques au voisinage du point critique (p'_c, ρ'_c, T'_c)	45
Figure 3.3 : Diagramme d'état qualitatif ($P', 1/\rho'$) ; présentation de l'état thermodynamique du domaine d'étude à $t'=0$ (non à l'échelle). On remarque en fait que $P'_1 \neq P'_2$	46
Figure 3.4: Gradients de densité en fonction de la hauteur de la cellule, à divers écarts de la température critique pour les deux fluides hélium3 et Xénon [Mol79].	56

Figure 4.1 : Maillage cartésien décalé en situation bidimensionnelle, et localisation des inconnues.....	62
Figure 4.2 : Volumes de contrôle pour (a) les scalaires, (b) vitesse u, et (c) vitesse v	63
Figure 5.1: Fluide confiné entre deux parois infinies et soumis à une différence de température $\Delta T = T_1 - T_2$ (chauffage par le bas).	79
Figure 5.2 : Variation du module de la vitesse adimensionnelle au centre de la cavité en fonction du nombre de Rayleigh pour une cavité de rapport de forme de 2.	80
Figure 5.3 : Pente de variation de la vitesse en fonction de (Ra-Rac) en échelle logarithmique.	80
Figure 5.4 : Contour de température adimensionnel superposé au champ des vecteurs vitesses pour un maillage 200*132, Ra=6000, Pr=0.7, $\Gamma=2$	81
Figure 5.5: Le modèle géométrique pour la configuration type Rayleigh-Taylor.	82
Figure 5.6 : Allure qualitative du taux de croissance en fonction du temps	83
Figure 5.7 : Evolution de la longueur d'onde de coupure en fonction de ε_T pour deux valeurs de $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ et 10^{-3} . Le champ de température en fonction du temps (dans le régime non-linéaire) pour une longueur d'onde $\tilde{\lambda}' = 1\text{mm}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ montre bien l'évolution d'une instabilité de type Rayleigh-Taylor.	85
Figure 5.8 : Vue du maillage (61x61).	86
Figure 5.9 : Champ de température T (K) pour $h' = 0.5$, $H' = 0.5$, $\lambda' = 1\text{mm}$, $\varepsilon_T = 8 \times 10^{-2}$, $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$	87
Figure 5.10 : Vitesse horizontale U ($\mu\text{m/s}$) pour $h' = 0.5$, $H' = 0.5$, $\lambda' = 1\text{mm}$, $\varepsilon_T = 8 \times 10^{-2}$, $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$	87
Figure 5.11 : Evolution du champ de température à différents instants et pour $h' = 0.25$, $H' = 0.75$, $\lambda' = 2\text{mm}$, $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$, $\varepsilon_T = 8 \times 10^{-2}$	88
Figure 5.12 : Effet de la gravité sur les champs de température pour $\varepsilon_T = 8 \times 10^{-2}$, $\tilde{\lambda}' = 2\text{mm}$ à $t' = 4\text{s}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$ [cas (a) et (b)] et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ [cas (c) et (d)], cas (b) et (d) sans gravité et les cas (a) et (c) avec gravité).	89
Figure 5.13 : Taux de croissance d'instabilité en fonction du nombre d'onde pour différentes hauteurs et pour le cas $\varepsilon_T = 0.08$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$	91

Figure 5.14 : Taux de croissance d'instabilité en fonction du nombre d'onde pour deux valeurs de $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$, $\varepsilon_\rho = 10^{-5}$ et $\varepsilon_T = 0.08$ dans le cas $h'=0.5\text{mm}$, $H'=1\text{mm}$	92
Figure 5.15: Différence de densité ε_ρ en fonction de la longueur caractéristique (calculée à partir du taux de croissance maximal) pour $h'=0.01\text{ mm}$, $H'=1\text{mm}$	93
Figure 6.1 : Comparaison des profils des grandeurs de l'écoulement dans le cas dimensionnel (avec et sans filtrage ($h=0.5$, $\varepsilon_T = 810^{-2}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ et $\tilde{\lambda}'=2\text{mm}$ à $t'=0.1\text{s}$ (a) Température (K), (b) Densité (kg/m^3), (c) Vitesse horizontale U ($\mu\text{m/s}$) et (d) Vitesse verticale V ($\mu\text{m/s}$).	97
Figure 6.2: Diagramme de stabilité de $\frac{\delta}{h}$ en fonction de ε_T pour différentes valeurs de ε_ρ et de h.	98
Figure 6.3: Taux de croissance en fonction du nombre d'onde pour $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$ et différentes valeurs de ε_ρ avec $h=0.5$	99
Figure 6.4: Taux de croissance en fonction du nombre d'onde pour $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ et pour deux valeurs de ε_T avec et sans stratification.	100
Figure 6.5: Champ de densité en fonction de la distance verticale y à l'état initial pour $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-4}$ avec et sans stratification.	101
Figure 6.6: Profil adimensionnel de densité en fonction de y pour différentes valeurs de ε_T avec une valeur fixe de $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ à $t'=0.1\text{s}$ et $h'=0.5\text{mm}$, ($H'=1\text{mm}$).	102
Figure 6.7: Profil adimensionnel de densité avec et sans stratification pour $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$, $\varepsilon_\rho = 1 \times 10^{-3}$ et $h'=0.5\text{mm}$ ($H'=1\text{mm}$) à $t'=0.1\text{s}$	103
Figure 6.8: Evolution du champ de densité adimensionnel de $t'=1\text{s}$ à $t'=5\text{s}$ pour $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$, $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ $h'=0.5\text{mm}$ ($H'=1\text{mm}$) pour une longueur d'onde $\tilde{\lambda}'=2\text{mm}$	105
Figure 6.9: Evolution du champ de densité adimensionnel en fonction ε_T [(a) $\varepsilon_T = 10^{-3}$, (b) $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$, (c) $\varepsilon_T = 10^{-2}$] à $t'=1\text{s}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ (à gauche), $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ (à droite), $h'=0.5\text{mm}$, longueur d'onde $\tilde{\lambda}'=2\text{mm}$	106
Figure 6.10: Evolution du champ de vitesse adimensionnel vertical U en fonction de ε_T [(a) $\varepsilon_T = 10^{-3}$, (b) $\varepsilon_T = 5 \times 10^{-3}$, (c) $\varepsilon_T = 10^{-2}$] à $t'=1\text{s}$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ (à gauche), $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ (à droite), $h'=0.5\text{mm}$ ($H'=1\text{mm}$) pour une longueur d'onde $\tilde{\lambda}'=2\text{mm}$	108

Figure 6.11: Evolution du champ de vitesse adimensionnel vertical V en fonction de ε_T [(a) $\varepsilon_T = 10^{-3}$, (b) $\varepsilon_T = 5 \cdot 10^{-3}$, (c) $\varepsilon_T = 10^{-2}$] à $t'=1s$ et $\varepsilon_\rho = 10^{-2}$ (à gauche), $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ (à droite), $h'=0.5mm$ ($H'=1mm$).....	109
Figure 6.12: Profil de densité adimensionnel en fonction de la distance verticale y: (a) $\varepsilon_T = 10^{-3}$, (b) $\varepsilon_T = 5 \cdot 10^{-3}$ à $t'=1s$, $\varepsilon_\rho = 10^{-3}$ et $h'=0.5mm$ ($H'=1mm$).....	110
Figure A2.1: Fluide confiné entre deux parois infinies et soumis à une différence de température (chauffage par le bas).....	118
Figure A2.2 : Module de vitesse en fonction du nombre de points $N=N1 \times N2$ pour un rapport de forme de 2 et pour un nombre de Rayleigh de 5000.....	121
Figure A2.3 : (a) Variation du module de la vitesse adimensionnelle au centre de la cavité en fonction du nombre de Rayleigh et (b) champ de température adimensionnel (pour un rapport de forme de 1).	124
Figure A2.4 : (a) Contour de température avec le champ de vitesse et (b) champ de vorticit� (pour un rapport de forme de 1 et $Ra=10000$).....	124
Figure A2.5 : Variation du module de la vitesse adimensionnelle, en �chelle logarithmique (pour la vitesse), au centre de la cavit� en fonction du nombre de Rayleigh.....	125
Figure A2.6 : R�sultat tir� de [Zie82], variation de la vitesse en �chelle log-log en fonction du Ra.	125
Figure A2.7 : La variation du Rac en fonction du rapport de forme.....	126

BIBLIOGRAPHIE

[**Acc05**] **Accary G.**, Convection de Rayleigh Bénard dans les fluides supercritiques : mécanismes d'instabilité et transition vers la turbulence, thèse 3^ocycle, Université de la Méditerranée d'Aix-Marseille, **2005**.

[**Alm06**] **d'Almeida A.**, Prud'homme R., Comportement d'une poche fluide supercritique plongée dans un environnement à haute température, communication privé, 2006.

[**Ami95**] **Amiroudine S.**, Modélisation numérique des phénomènes de transport de chaleur et de masse dans les fluides supercritiques, thèse de l'Université de la Méditerranée, **1995**.

[**Ami96**] **Amiroudine S., Ouazzani J., Zappoli B. and Carlès P.**, Numerical simulation of convective instabilities in near-critical pure fluids, Proc. 2nd Europ. Symp. In Space, (Napoli), **1996**.

[**Ami97**] **Amiroudine S., Ouazzani J., Zappoli B. and Carlès P.**, Numerical solutions of 1D unsteady hypercompressible flows using finite volume methods, Europ. J. Mech., B/Fluids, 16, n^o5, 665-680, **1997**.

[**Ami01**] **Amiroudine S., Bontoux P., Larroudé P., Gilly B. and Zappoli B.**, Direct numerical simulation of instabilities in a two-dimensional near-critical fluid layer heated from below, J. Fluid Mech., 442:119, **2001**.

[**Ami03**] **Amiroudine S. and Zappoli B.**, Piston effect induced thermal oscillations at the Rayleigh-Bénard Threshold in supercritical He3, Phys. Rev. Lett., 90, 105303, **2003**.

[**Ami05a**] **Amiroudine S., Boutrouft K., Zappoli B.**, The stabilizing effect of a Rayleigh-Taylor like instability in a supercritical fluid, Phys. of Fluids., Vol.17, Issue 4, **2005**.

[Ami05b] Amiroudine S., Ambari A., Boutrouft K., “Acoustic filtering procedure in supercritical fluids : Application to thermal instabilities”, ASME: 2005 Summer Heat Transfer Conference, Westin St. Francis, San Francisco, CA, USA, July 17-22, **2005**.

[And69] Andrew T., Trans.Roy.Soc., 159, **1869**.

[Bak80] Baker G.R., Meiron D.I. and Orszag S.A., Vortex simulation of the Rayleigh-Taylor instability, Phys. Fluids, 23 (8), pages 1485-1490, **1980**.

[Beh76] Behringer R. P., Doiron T. and Meyer H., J. Low Temp. Phys., 24, 315, **1976**.

[Bey92] Beysens D., Que peut-on apprendre sur les phénomènes de transport d’une étude en microgravité, Ann. Chim. Fr., 17 : 45-53, **1992**.

[Bod00] Bodenschatz E., Pesch W. and Ahlers G., Recent Developments in Rayleigh-Bénard Convection, Annu. Rev. Fluid Mech. 32, 709, **2000**.

[Bon94] Bonetti M., Perrot F., Beysens D. and Garrabos Y., Fast thermalization in supercritical fluids, Phys. Rev. E, 49(6): 4779, **1994**.

[Bou90] Boukari H., Shaumeyer J. N, Briggs M. E. and Gammon R.W., Critical speeding up in pure fluids, Phys. Rev. A, 41, 2260, **1990**.

[Bout05] Boutrouft K., Amiroudine S., Ambari A., Etude de la stabilité de deux couches d’un même fluide supercritique placées en configuration instable, Congrès Français de Thermique, SFT 2005, Reims, 30 mai - 2 juin **2005**.

[Bout06] Boutrouft K., Amiroudine S., Ambari A., Stability diagram and effect of initial density stratification for a two-layer system in a supercritical fluid, à paraître dans Phys. of Fluids, 2006.

[Bra91] Bravais P., Thermodynamical behaviour of supercritical oxygen in the Hermès spaceplane environmental conditions Proceedings of the first European Symposium Fluids in Space, Ajaccio, **1991**.

[Bra93] Bravais P., Zappoli B. and Mignon C., Free convection in the vicinity of the critical point, 14th IAF Congress, Gratz , Austria., **1993.**

[Bro72] Brown R. G. and H. Meyer, Phys. Rev. A, 6, 364, **1972.**

[Cag22] Cagniard de la Tour C., Ann.Chim.phy., ,21, **1822.**

[Cab06] Cabot W.H., Cook A.W., Reynolds number effects on Rayleigh-Taylor instability with possible implications for type-Ia supernovae, Nature Physics, Vol.2, N°8, **2006.**

[Cal60] Callen H.B., Thermodynamics, Ed. Wiley & Son INC, New York (USA), **1960.**

[Car95] Carlès P., Etude de l'effet piston et des phénomènes thermo-acoustiques dans les fluides supercritiques, thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, **1995.**

[Car98] Carlès P., Physics of Fluids, 10, 2164, **1998.**

[Car99] Carlès P. and Ugurtas B., The onset of free convection near the liquid-vapour critical point. Part I: Stationary initial state, Physica D 126, 69-82, **1999.**

[Cha61] Chandrasekhar S., Hydrodynamic and hydromagnetic stability, Oxford Univ. Press, London, **1961.**

[Che86] Chenoweth D. R. and Paolucci S., Natural convection in an enclosed vertical air layer with large horizontal temperature differences, J. Fluid Mech., 169: 173, **1986.**

[Chi01] Chiwata Y. and Onuki A., Thermal oscillations plumes and convection in highly compressible fluids, Phy. Rev. Lett. 87, 144301, **2001.**

[Dah72] Dahl D., Moldover M. R., Thermal relaxation near the critical point, Phys. Rev. A, 6, **1972.**

[Dah90] Dahlburg J.P. and Gardner J.H. Ablative Rayleigh-Taylor instability in three dimensions, *Phys. Fluids B*, 41, pages 725-750, **1990**.

[Dra81] Drazin P. G. and Reid W. H., Hydrodynamic stability, Cambridge University Press, **1981**.

[Duf62] Duff R.E, Harlow F.H and Hirt C.W, Effects of diffusion on interface instability between gases, *Phys. of Fluids* **5** (4), 417-425, **1962**.

[Elk03] El Khouri L., Hydrodynamique des fluides supercritiques et gravité, thèse de l'Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, **2003**.

[Fer99] Ferziger J.H., Peric M., Computational methods for fluid dynamics, 2nd Ed. Springer, **1999**.

[Fro92] Fröhlich J., Laure P., Peyret R., Large departure from Boussinesq approximation in the Rayleigh-Bénard problem, *Phys. of Fluids A* 4 (7), **1992**.

[Fou02] Fournier E., Gauthier S., Renaud F., 2D pseudo-spectral parallel Navier-Stokes simulations of compressible Rayleigh-Taylor instability, *Comp. Fluids* 31, 569-587, **2002**.

[Gar92] Garrabos Y., Le Neindre B., Subra P., Cansell F., Pommier C., Fluides critiques et gravité, fluides supercritiques et matériaux. *Fluides, Matériaux et Microgravité, Ann. Chim. Fr.*, 17, pp. 55-90, **1992**.

[Gar98] Garrabos Y., Bonetti M., Beysens D., Perrot F., Fröhlich T., Carlès P. and Zappoli B., Relaxation of a supercritical fluid after a heat pulse in the absence of gravity effects : theory and experiments, *Phys. Rev. E*, 57(5): 5665-5681, **1998**.

[Ger76] Gershuni G.Z., E.M. Zhukhovitskii, Convective stability of incompressible fluids, Izdatel'stvo "Nauka", Moskva, translated from Russian, Jerusalem, **1976**.

[Git71] Gitterman M.S. and Steinberg V.A., Criteria for commencement of convection in a liquid close to the critical point, High Temp., 754, **1971.**

[Git78] Gitterman, M.S., Hydrodynamics of fluids near a critical point, Rev. Mod. Phys. 50, 85, **1978.**

[Glim90] Glim J., Li X.L., Menikoff R., Sharp D.H. and Zhang Q., A numerical study of bubble interactions in Rayleigh-Taylor instability for compressible fluids, Phys. Fluids, A 2, (11), page 2046-2054, **1990.**

[Haa91] Haan S.W., Weakly nonlinear hydrodynamic instabilities in inertial fusion, Phys. of Fluids B, 3, (8), 2349-2355, **1991.**

[Hal96] P.Haldenwang, C.Nicoli, J.Daou, High pressure vaporization of LOX droplet crossing the critical conditions, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.39, N°16, 3453-64, **1996.**

[Hin75] Hinze J.O., Turbulence, Mac-Graw Hill, 1975.

[Hir88] Hirsch C., Numerical computation of internal and external flows, John Wiley & Sons, **1988.**

[Hoh72] P.C. Hohenberg and M.Barmatz, Gravity effects near the gas-liquid critical point, Phys. Rev. A, 6 (1): 289-313, **1972.**

[Jos90] D.D Joseph, Fluid dynamics of two miscible liquids with diffusion and gradient stresses, Eur. J. Mech., B/Fluids, 9, n° 6, 565-596, **1990.**

[Jou99] Jounet A., Zappoli B. Mojtabi A., Simulation numérique de l'effet Piston avec prise en compte des échanges thermiques pariétaux, C.R.A.S. Paris, t.327, série IIb., pp. 991-996, **1999.**

[Kad68] Kadanoff L.P., Swift J., Phys. Rev., 166,89, **1968.**

[Kaw70] Kawasaki K., Phys. Rev.A, 1, 1750, **1970.**

[Kog00] Kogan A.B., Thermodynamics and hydrodynamics of a highly compressible fluid: ^3He near the liquid-vapor critical point, PhD thesis, Duke University, **2000**.

[Kog01] Kogan A. B. and Meyer H., Heat transfer and convection onset in a compressible fluid: ^3He near the critical point, Phys. Rev. E 63, 056310, **2001**.

[Kre93] Kreyszig E., Advanced engineering mathematics, Wiley & Sons INC, New York (Etats-unis), **1993**.

[Kul91] Kull. H. J., Theory of Rayleigh-Taylor instability. Physics Reports (Review Section of Phys. Letters), 206(5): 197-325, **1991**.

[Kur95] Kurowski P., Misbah C., Tchourkine S., Gravitational instability of a fictitious front during mixing of miscible fluids, Europhys. Lett. 29 (4), 309-314, **1995**.

[Lan89] Landau L. D., Lifshitz E. M., Physique théorique, tome 6 : Mécanique des Fluides, Ed. Librairie du Globe, Editions MIR, traduit du russe, **1989**.

[Lar67] Larkin B.K., Heat flow to a confined fluid in zero gravity, Progress in Astronautics and Aeronautics, Thermophysics of Spacecraft and Planetary Bodies, ed. by G. B Heller, 20, **1967**.

[Mes69] Meshkov E.E., Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave, Sov. Fluid Dynamics, 4: 101, **1969**.

[Mey02] Meyer H., Kogan A.B., Onset of convection in a very compressible fluid: the transient toward steady state, Phys. Res. E, 63, 056310 **2002**.

[Mol79] Moldover M.R., Sengers J.V., Gammon R.W., Hocken R.J., Gravity effects in fluids near the gas-liquid critical point, Rev. Mod. Phys., 51: 79-99, **1979**.

[Nit87] Nitsche K. and Straub J., The critical “hump“ of Cv under microgravity, result from the D-1 Spacelab experiment “Wärmekapazität”, Proceeding of 6th European Symposium on Material Science under Microgravity Conditions, ESA SP-256, Bordeaux France, **1987**.

[Nor77] Normand C., Pomeau Y., Velarde M.G., Convective instability : a physicist’s approach, Rev. of Modern Phys., Vol. 49, N°3, **1977**.

[Ofe92] Ofer D., Shvart D., Zinamon Z., Orszag S.A., Mode coupling in non-linear Rayleigh-Taylor instability, Phys. of Fluids B, 4 (11), 3549-3561, **1992**.

[Onu90] Onuki A., Hong H. and Ferrell R.A., Fast adiabatic equilibration in a single component fluid near the liquid-vapor critical point, Phys. Rev. A, 41 :2256, **1990**.

[Paj94] Pajonik G.M., Sol-Gel Process Application, Proc. Int. Symp. Adv. Sol-Gel Process. Appl., 201, 219, **1994**.

[Pao82] Paolucci S., On the filtering of sound from the Navier-Stokes equations, SAND82-8253, **1982**.

[Pat72] Patankar S.V., Spalding D.P., A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in 3D parabolic flows. Int. J. Heat and Mass Transfer, vol. 15, pp. 1787-1806, **1972**.

[Pat80] Patankar S.V., Numerical heat transfer and fluid flow. McGraw Hill, **1980**.

[Pat85] Patankar S.V., A calculation procedure for two-dimensionnal elliptic situations, Numer. Heat Transfert, Part A, 14(25) : 409, **1985**.

[Pes99] Pessy V., Garriga R., Etourneau J., Weill F., Cansell F., « Synthèses et Elaboration de Matériaux en Milieux Supercritiques », Proceedings Ed. Cancel F., Delville M.H et Subra P., Biarritz, pp.1-45, juillet **1999**.

[Pet97] Petitjeans P., Kurowski P., Fluides non miscibles/ Fluides miscibles : des similitudes intéressantes, C.R.A.S., t. 325, Série II b, pp. 587-592, **1997**.

[Pey83] Peyret R. and Taylor T.D., Computational Methods for Fluid Flow, Springer Verlag, New York, **1983**.

[Pit79] Pittman C., Doiron T. and Meyer H., Phys. Rev. B, 20, 3678, **1979**.

[Pit82] Pittman C., Cohen L. and Meyer H., J. Low Temp. Phys., 46, 115, **1982**.

[Pru01] R.Prud'homme, Combustion en micropesanteur, CRAS special, Série Iib, t.329, N°3, **2001**.

[Pré04] Préau S., Prud'homme R., Ouazzani J., Zappoli B., Supercritical density relaxation as a new approach of droplet vaporization, Phys. Of Fluids, Vol. 16, N°11, 4075-4087, **2004**.

[Pru04] Prud'homme R., Préau S., Echanges thermiques et phases fluides, ICTEA-HT3-06, Beyrouth Liban, **2004**.

[Pru05] Prud'homme R., Habiballah M., Instabilités liées au phénomène d'évaporation, 17^{ème} Congrès Français de Mécanique, Troyes, **2005**.

[Ray83] Rayleigh J.W.S., Investigation of the character of equilibrium of an incompressible heavy fluid of variable density, Proc. London Math. Soc., **1883**.

[Ren96] Renaud F., Une méthode spectrale de décomposition de domaines dynamiques : application aux écoulements de Rayleigh-Bénard et de Kelvin-Helmoltz, Thèse 3^o cycle, Université Sophia-Antipolis, Nice, 1996.

[Ren97] Renaud, F., Gauthier S., Dynamical pseudo-spectral domain decomposition technique : application to viscous compressible flows, J. Comput. Phys., 131, pp. 89-108, **1997**.

[Rhi83] Rhie C.M., Chow W.L., Numerical study of turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation, AIAA Journal, Vol. 21, n° 11, Nov. **1983**.

[Ric60] Richtmyer R.D., Taylor instability in shock acceleration of compressible fluids, *Comm. Pure Appl. Math.*, 8:297, **1960**.

[Sch93] Scholsky K.M. , *J. Supercrit. Fluids*, 6.103, **1993**.

[Sea63] Sears F.W., *Thermodynamics , the kinetic theory of gases, and statistical mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company Inc., **1963**.

[Sen78] Sengers JV., Levelt Sengers J.M.H., *Critical phenomena in classical fluids, in progress in liquid physics*, Ed. Croxton C., Wiley, Chichester (Royaume-Uni), **1978**.

[Ser02] Serre E., Gauthier S., An Auto-Adaptative Multidomain Spectral Technique for Linear Stability Analysis: Application to Viscous Compressible Flows, *J. of Scient. Comput.*, 17, N° 1-4, **2002**.

[Spa72] Spalding D. B., A novel finite-différence formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. *Int. J. Num. Methods Eng.*, 4: 551, **1972**.

[Spi60] Spiegel E.A., Veronis G., On the Boussinesq approximation for a compressible fluid, *Astrophys. J.*, 141: 1068-1090, **1960**.

[Spi65] Spiegel E.A., Convective instability in a compressible atmosphere, *Astrophys. J.* 141, 1068, **1965**.

[Spr73] Spradley L.W., Bougeois S.V., Fan C. and Grodzka P.G., A numerical solution for thermoacoustic convection of fluids in low gravity, NASA Contractor Report n. 2269, **1973**.

[Spr75] Spradley L.W. and Churchill S.W., Pressure and buoyancy driven thermal convection in a rectangular enclosure, *J. Fluid Mech.*, 70(4): 705, **1975**.

[Sta71] Stanley H.E., *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena*, Oxford University Press, New York Oxford, **1971**.

[Sub99] **Subra P., Domongo C.**, Mise en Forme de Matériaux En Milieux Supercritique, Proceedings Ed. Cancel F., Delville M.H et Subra P., Biarritz, pp. 93-126, **1999**.

[Tay50] **Taylor G.I.**, The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their plane, Proc. Royal Soc. London, 201: 192, **1950**.

[Thi90] **Thiart G.D.**, Finite difference scheme for the numerical solution of fluid flow and heat transfer problems on non-staggered grids, Part B., Vol. 17, pp. 43-62, **1990**.

[Try90] **Trayggvason, G., Unverdi, O.**, Computations of three-dimensional Rayleigh-Taylor instability, Phys. of Fluids A, 2, 656-659, **1990**.

[Van73] **Van der Wals J.D.**, Over de continuïteit van den gas en vloeistoftoestand, Ed. Sijthoff, Leiden Pay-Bas, **1873**.

[You84] **Youngs D.**, Numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability, Physica D 12, pages 32-44, **1984**.

[You91] **Youngs D.**, Three-dimensional numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability, Phys. of Fluids A, 3, 1312-20, **1991**.

[Zap90] **Zappoli B., Bailly D., Garrabos Y., Le Neindre B., Guenoun P. and Beysens D.**, Anomalous heat transport by the piston effect in supercritical fluids under zero gravity, Phys.Rev. A, 41(4): 2264-2267, **1990**.

[Zap92] **Zappoli B.**, The response of a nearly supercritical pure fluid to a thermal disturbance, Phys. Fluids, 4: 101- 107, **1992**.

[Zap94] **Zappoli B., Durand-Daubin A.**, Heat and mass transport in a near supercritical fluid, Phys. of Fluids 6, pp.1924, **1994**.

[Zap95] **Zappoli B. and Carlès P.**, The thermo-acoustic nature of the critical speeding up, European J. Mech. B, 14: 41-65, **1995**.

[Zap96] Zappoli B., Amiroudine S., Carlès P., Ouazzani J., Thermoacoustic and bouncy-driven transport in a square side-heated cavity filled with a near-critical fluid, *J. Fluid Mech.*, 316, p.53-72, **1996**.

[Zap97] Zappoli B., Amiroudine S., Gauthier S., Instabilité gravitationnelle dans un fluide supercritique pur, *C.R. Acad. Sci. Paris*, t. 324, Série II b, **1997**.

[Zap99] Zappoli B., Jounet A., Amiroudine S. And Mojtabi A., Thermoacoustic heating and cooling on near-critical fluids in the presence of a thermal plume, *J. Fluid Mech.*, 338: 389- 409, **1999**.

[Zie82] Zierep J., Oertel H., Convective transport and instability phenomena, edited by G.Braun Karlsruhe, pp. 3-24, **1982**.

[Zos64] Zosel K., German patent No. 1, 493:190, **1964**.

[Zuf88] Zufiria J.A Vortex-in-cell simulation of bubble competition in a Rayleigh-Taylor instability. *Phys. Fluids.*, 31 (11), pages 3199-3212, **1988**.

INSTABILITES THERMOCONVECTIVES DE TYPE RAYLEIGH-TAYLOR DANS LES FLUIDES SUPERCRITIQUES

RESUME :

Nous avons modélisé numériquement la stabilité d'un système de deux couches d'un même fluide pur supercritique soumis à une différence de température initiale à l'interface. La grande compressibilité et la faible diffusivité thermique des fluides critiques entraînent une instabilité gravitationnelle de type Rayleigh-Taylor de la couche de diffusion. Cette instabilité est similaire à celle que l'on retrouve dans le cas de deux fluides miscibles à condition de remplacer le coefficient de diffusion moléculaire par celui de la diffusion thermique. Nos résultats numériques semblent être consistants, d'un point de vue de la relation de dispersion dans le cas linéaire, avec ceux de Duff *et al.* [Duf62] considérés dans le cas de deux fluides miscibles. Nous avons aussi montré que, lorsque l'épaisseur de la couche inférieure devient plus petite que l'épaisseur de la couche de diffusion thermique basée sur le taux de croissance maximal alors le système devenait stable. Un diagramme de stabilité a été établi en fonction de trois paramètres : l'épaisseur de la couche inférieure, la différence de densité entre les deux couches et la distance au point critique. Lorsque l'on s'approche du point critique, la stratification devient de plus importante (à cause de la forte compressibilité) et tend à stabiliser la configuration. Par ailleurs, le filtrage acoustique initialement utilisé afin de réduire les coûts de calcul, ne s'est pas avéré nécessaire puisque la méthode des volumes finis est naturellement filtrante (formulation intégrale ou variationnelle des équations).

Mots-clés : modélisation, volumes finis, supercritique, instabilité, Rayleigh-Taylor.

RAYLEIGH-TAYLOR LIKE THERMAL INSTABILITIES IN SUPERCRITICAL FLUIDS

ABSTRACT :

A numerical study of the stability in a two-layer system filled with a single pure supercritical fluid subjected to an initial temperature difference is performed. The very large compressibility and the very low heat diffusivity of near-critical fluids lead to a Rayleigh-Taylor like gravitational instability of the heat diffusion layer. This instability is similar to the one of two miscible fluids where molecular species diffusion coefficient is replaced by the heat diffusion coefficient. Our numerical results are consistent with respect to the dispersion relation derived by Duff *et al.* [Duff62] for a system of two miscible fluids (argon-bromine mixture falling into helium or air). We have also shown that when the thickness of the lower layer becomes smaller than the heat diffusion length based on the maximum growth rate, the system is stable. A linear stability diagram has been established as a function of three parameters: the thickness of the lower layer, the density difference between the two layers and the distance to the critical point. When the critical point is approached, the high initial stratification (due to the high compressibility) of this Rayleigh-Taylor-like configuration has seen the effect of stabilising the system. We have also shown that the acoustic filtering procedure is not needed to reduce the computational time due to the weak formulation of finite volume method (filtering with the integral form of the equations).

Keywords : modelisation, finite volume, supercritical, instability, Rayleigh-Taylor.