

Investigation numérique de l'effet du tirage sur le mode d'écoulement en cavité de Bridgman Verticale

Khalid ACHOUBIR¹, Abdelkhalek CHEDDADI^{1*}, El Alami SEMMA²

¹Ecole Mohammadia d'Ingénieurs, Université Mohamed V-Agdal, BP 765, Agdal, Rabat (Maroc)

²Faculté des Sciences et Techniques, Université Hassan I^{er}, Settat (Maroc)

* (auteur correspondant : cheddadi@emi.ac.ma)

Résumé – Ce travail concerne l'étude numérique de la convection thermosolutale en phase fluide d'une cavité de croissance cristalline de type Bridgman verticale. La cavité contient un fluide binaire caractérisé par un nombre de Prandtl $Pr=0,01$ et un nombre de Lewis $Le=1000$. Les équations de Navier-Stokes et les équations de conservation de l'énergie et des espèces sont résolues par une méthode de volumes finis de 2^{ème} ordre en temps et en espace. L'effet de la translation de l'ampoule sur la structure de l'écoulement et les transferts de chaleur et de masse est investigué pour trois valeurs du rapport des forces de volume solutales et thermiques $N=1, 10$ et 100 . Les résultats obtenus ont décelé l'existence de valeurs de vitesses de croissance permettant une stabilisation quasiment parfaite de l'écoulement.

Nomenclature

| | | | |
|--------|--|-----------------------|--|
| C | fraction massique adimensionnelle | v | vitesse adimensionnelle suivant la direction y |
| D | diffusivité massique, $m^2.s^{-1}$ | x, y | coordonnées cartésiennes adimensionnelles |
| g | accélération gravitationnelle, $m.s^{-2}$ | <i>Symboles grecs</i> | |
| Le | nombre de Lewis | α | Diffusivité thermique, $m^2.s^{-1}$ |
| N | rapport des forces de volume solutales et thermiques | β | coefficient d'expansion thermique, K^{-1} ou solutal |
| p | Pression, Pa | ν | viscosité cinématique, $m^2.s^{-1}$ |
| Pe | nombre de Peclet | ρ | masse volumique, $kg.m^{-3}$ |
| Pr | nombre de Prandtl | <i>Indices</i> | |
| Ra_T | nombre de Rayleigh thermique | C | chaud |
| t | temps adimensionnel | F | froid |
| T | température adimensionnelle | T | thermique |
| u | vitesse adimensionnelle suivant la direction x | S | solutal |

1. Motivation & Introduction :

Industriellement la forte demande en matériaux utilisés dans de nombreux dispositifs en électronique, optique et optoélectronique, a permis l'émergence de nouveaux cristaux adaptés et optimisés vis-à-vis d'une utilisation spécifique. La maîtrise des outils et des conditions de croissance cristalline s'avère primordiale pour l'obtention de cristaux de grande pureté et de haute qualité cristalline répondant aux objectifs recherchés. Le couplage entre la microstructure du cristal et l'écoulement dû à la convection thermosolutale dans la phase liquide au cours de la cristallisation a été démontré dans plusieurs travaux [1-2]. Dans la littérature l'étude de la convection thermosolutale dans les cavités rectangulaires a été effectuée pour plusieurs configurations géométriques (horizontale, verticale, inclinée, aplatie...). Différents scénarios de conditions aux limites thermiques et solutales

(coopérantes, opposées ou croisées) ont été investiguées. Parmi les premières études portant sur le sujet nous pouvons citer les travaux de Nield parus en 1967, et depuis, plusieurs études ont été consacrées à ce phénomène [3-8]

Le procédé de solidification dirigée par la technique de Bridgman est composé principalement de trois zones thermiques entourant une ampoule cylindrique au sein de laquelle le métal liquide est solidifié. L'un des avantages de cette technique de refroidissement est la commodité de certains de ces paramètres de contrôle, entre autres : les températures des parois chaudes (T_C) et de la paroi froide (T_F), l'épaisseur de la zone adiabatique ou isolante, la vitesse linéaire de l'ensemble thermique (Pe). Dans ce travail, L'étude présente une investigation numérique de la double diffusion dans une cavité carrée avec des conditions aux limites proches des conditions aux frontières réelles. On s'intéresse particulièrement aux effets de la vitesse de tirage sur la contribution solutale et sa répercussion sur le régime d'écoulement.

2. Modèle et approximations numériques

Le fluide est supposé Newtonien, incompressible et en écoulement laminaire. Les propriétés thermophysiques sont supposées constantes sauf la densité qui est approchée dans le terme de gravité par l'hypothèse de Boussinesq :

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta_T (T' - T'_0) - \beta_S (C' - C'_0)] \quad (1)$$

Avec C'_0 et T'_0 respectivement la fraction massique du constituant le moins dense et la température de référence.

Les variables adimensionnelles sont définies par identification comme suit :

$$(x, y) = \left(\frac{x'}{H}, \frac{y'}{H} \right) ; t = \alpha \frac{t'}{H^2} ; (u, v) = \left(H \frac{u'}{\alpha}, H \frac{v'}{\alpha} \right), T = \frac{T' - T'_0}{\Delta T}, C = \frac{C' - C'_0}{\Delta C}. \text{ Avec :}$$

$$\Delta T = T'_C - T'_F \text{ et } \Delta C = C'_1 - C'_0 \quad (2)$$

Le mouvement du fluide est gouverné par les équations de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces qui s'écrivent sous forme adimensionnelle en variables primitives :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \text{Pr} \nabla^2 u \quad (4)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \text{Pr} \nabla^2 v + \text{Ra}_T \text{Pr} (T - NC) \quad (5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \nabla^2 T \quad (6)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{1}{Le} \nabla^2 C \quad (7)$$

$$\text{Avec : } Ra_T = \frac{g\beta_T \Delta T H^3}{\nu \alpha}, \quad Le = \frac{\alpha}{D} \quad \text{et } N = - \frac{\beta_s \Delta C}{\beta_T \Delta T}.$$

Le rapport N est défini de telle sorte que les forces de volume solutales et thermiques agissent en sens opposés lorsque sa valeur est positive.

Les parois horizontales inférieure et supérieure de la cavité de la configuration étudiée (figure1) sont portées respectivement aux températures chaude et froide. Les parois verticales sont portées à la même température que celle du bas sauf une zone considérée adiabatique du côté de la paroi supérieure. Cette zone de largeur $H/4$ est conçue pour relaxer le déplacement de l'interface solide/liquide.

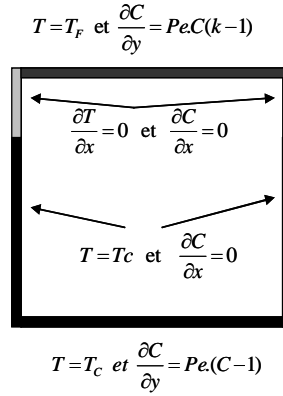


Figure 1 : Configuration géométrique

Les conditions aux limites associées sont données comme suit :

$$T = 1 \text{ pour } : y = 0 ; x = 0, 1 \text{ et } y \in [0, 0.75]$$

$$T = 0 \text{ pour } : y = 1$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \text{ pour } : x = 0, 1 \text{ et } y \in [0.75, 1]$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, u = 0 \quad v = Pe \quad \text{pour } : y = 0$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, u = 0 \quad v = Pe \quad \text{pour } : y = 1$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = Pe \times Le \times (C - 1) \quad u = 0 \quad v = Pe \quad \text{pour } x = 1$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = Pe \times Le \times C(k - 1) \quad u = 0 \quad v = Pe \quad \text{pour } x = 0$$

La résolution numérique du système d'équations est effectuée par une méthode de volumes finis utilisant un schéma d'Euler implicite d'ordre 2 pour la discrétisation temporelle [9]. Certaines variables peuvent présenter de forts gradients, ce qui nécessite l'utilisation d'un schéma de discrétisation spatiale qui soit à la fois stable et non diffusif. Pour cette raison, nous avons utilisé un schéma de type ULTIMATE2D [10] qui associe un schéma convectif décentré quadratique avec une stratégie de limitation de flux. La résolution du couplage vitesse-pression est assurée par l'algorithme SIMPLEC [11]. Le choix d'un pas de temps $\delta t = 5 \times 10^{-4}$ et un maillage de 64×64 dans le plan (x, y) a permis d'avoir une description précise des

phénomènes thermo-convectifs au sein de la cavité (Tableau 1). A chaque pas de temps, les champs dynamique et thermique sont calculés itérativement jusqu'à ce que le critère de convergence suivant soit satisfait : valeur maximale relative entre deux itérations successives inférieure à 10^{-6} .

| $N_X \times N_Y$ | 24 x 24 | 36 x 36 | 48 x 48 | 64 x 64 | 96 x 96 | 128 x 128 |
|--|---------|---------|---------|----------------|---------|-----------|
| $(\Psi_{\max} - \Psi_{\max128}) / \Psi_{\max128} \times 100$ | 75.3 | 9.20 | 1.29 | 0.93 | 0.25 | 0.00 |

Tableau 1 : Effet du maillage ; $Ra=10000$, $N=5$, $Le=1000$

3. Résultats et discussion.

La méthode numérique est validée par comparaison avec les travaux de Bergman et Hyun [12]. La configuration considérée est une cavité carrée différentiellement chauffée. Les parois gauche et droite sont maintenues respectivement à des concentrations uniformes ($C=1$, riche en Sn) et ($C=0$, riche en Pb). Bergman et Hyun ont effectué les simulations par une méthode spectrale et ont obtenu des solutions de haute précision dans une large gamme de valeurs de Rayleigh thermique et solutal. Nous avons considéré ici pour comparaison le cas correspondant à $Ra=100$ et $N=10$ (N étant le rapport entre les nombres de Rayleigh solutal et thermique). Aux premiers instants, et en raison de la rapidité de la diffusion thermique ($Le=7500$), les forces de volume thermiques s'installent rapidement et donnent naissance à une cellule de convection occupant la quasi-totalité du domaine. De même, il y a développement d'une couche limite solutale au voisinage des parois verticales donnant lieu à des cellules secondaires tournant dans le sens contraire. Ces cellules s'étendent avec le temps réduisant ainsi la taille de la cellule thermique. Ceci peut être aussi illustré par la chute de la valeur de la fonction de courant qui passe de 5.00 pour $t=0.3$ à 0.339 pour $t=3.15$ (figure 2). Les calculs affichent une bonne concordance avec les résultats de référence montrant ainsi l'aptitude du présent modèle à décrire avec une bonne précision la compétition thermo-solutale.

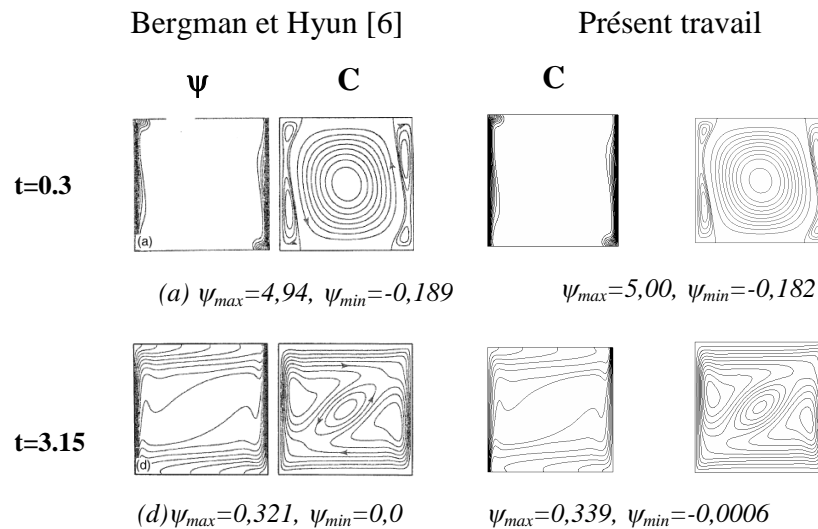


Figure 2 : Cavité différentiellement chauffée
 $Ra=100$, $N=10$, $Le=7500$

Dans cette section, on considère plus particulièrement la configuration géométrique de la figure 1. Les investigations numériques sont effectuées pour les paramètres de contrôle

suivants : $Pr=0,01$, $Le=1000$, $Ra=10^4$ et trois valeurs de N ($N=1, 10$ et 100). L'effet de la vitesse de déplacement de l'ampoule est réalisé pour des valeurs de Peclet comprises entre 10^{-4} et 10^{-1} .

Pour l'ensemble des valeurs de N considérées, lorsque la valeur de Pe est très faible et tend vers 0, le régime solutal est pratiquement uniforme au sein de la cavité et le moteur de l'écoulement est réduit aux forces de flottabilité dues aux gradients thermiques. Ainsi, Pour $N=1$, le mode d'écoulement est stationnaire convectif caractérisé par la dominance d'une seule cellule sur la globalité de la cavité. L'augmentation de Pe n'a pas d'incident fort sur la structure de l'écoulement et le transfert thermique (figure 3).

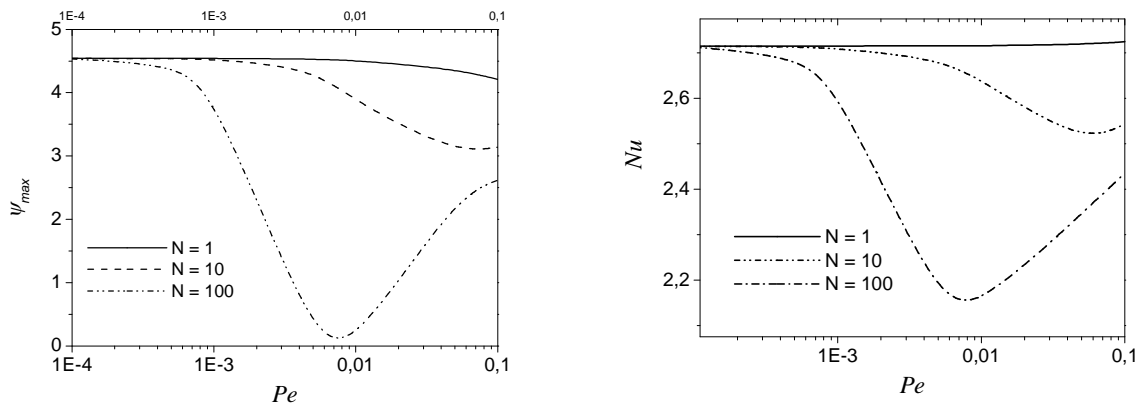


Figure 3. Effet de l'augmentation de la vitesse de tirage (Pe) sur : (a) l'intensité maximale de l'écoulement, (b) le transfert thermique à travers la paroi horizontale.

L'augmentation de N entraîne celle de l'intensité des forces de volume solutales par rapport aux forces de volume thermiques. Ainsi pour $N=10$, on remarque que le déplacement de l'ampoule a un effet important sur l'intensité de l'écoulement. En effet, pour les faibles Pe , l'écoulement reste contrôlé totalement par les forces de volume thermiques, toutefois lorsque Pe augmente, le gradient solutal au centre de la cavité augmente et tend à stabiliser l'écoulement. Ceci est mis en évidence dans la figure 3 où on observe une chute importante de la valeur de l'intensité de l'écoulement pour $Pe < 0.07$. En augmentant davantage la vitesse de translation, les gradients de concentration deviennent localisés du côté de la paroi horizontale supérieure sous forme de couche limite solutale de faible épaisseur. Ceci réduit l'effet stabilisateur de la concentration qui devient pratiquement uniforme au centre de la cavité (figure 4).

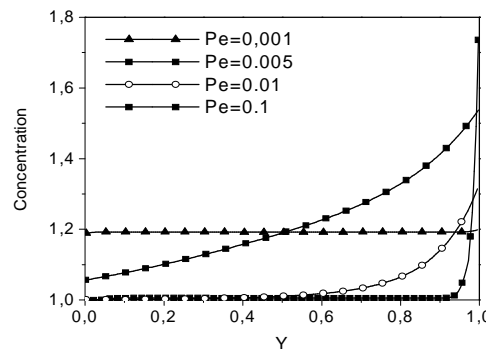


Figure 4. Distribution de la concentration suivant y pour $x=0.5$

Ce comportement apparaît nettement pour $N=100$. En effet, pour les faibles Pe , l'écoulement est toujours contrôlé par la convection thermique. Lorsque Pe augmente, l'intensité de l'écoulement chute jusqu'à atteindre une valeur seuil pour $Pe \approx 0,007$ pour laquelle les gradients solutaux au centre de la cavité prennent des valeurs maximales. Lorsqu'on augmente davantage la valeur de Pe , les gradients solutaux deviennent localisés à proximité de la paroi supérieure et s'affaiblissent au centre. Ceci réduit l'effet stabilisateur de la concentration et la valeur maximale de l'intensité de l'écoulement augmente à nouveau.

3. Conclusion

Dans le présent travail nous avons étudié l'effet de la vitesse de solidification (vitesse de tirage de l'ampoule) sur le mode d'écoulement et le transfert thermique au sein d'une cavité carrée chauffée par le bas. Les résultats montrent une forte influence du nombre de Peclet sur la structure de l'écoulement pour les fortes valeurs de N . Toutefois, ce paramètre ne présente pas un effet important pour des tirages très faibles par rapport à la vitesse de diffusion thermique. Ce travail est en cours d'extension pour tenir compte des phénomènes de changement de phase solide/liquide.

Références

- [1] G. Hensen, A. Hellawell, S.Z. Lu, R.S. Steube, Some consequences of thermosolutal convection: the grain structure of castings, *Metall. Mater. Trans. A.*, 27A (3) (1996), 569-581.
- [2] J. Chang, R.A. Brown, Radial segregation induced by natural convection and melt-solid interface shape in vertical Bridgman growth, *J. Crystal Growth*, 63 (1983) 343-364.
- [3] A. Bejan, *Convection Heat Transfer*, Wiley, New York, (1984).
- [4] R. Krishnan, A numerical study of the instability of double-diffusive convection in a square enclosure with horizontal temperature and concentration gradients, in: *National Heat Transfer Conference: Heat Transfer in Convective Flows*, Vol.107 (1989), 357-368.
- [5] H. Zhou, A. Zebib, Oscillatory double diffusive convection in crystal growth, *J. Crystal Growth*, 135 (1994) 587- 593.
- [6] D. Gobin, R. Bennacer, Double diffusion in a vertical fluid layer: Onset of the convective regime, *Phys. Fluids*, 6 (1994), 59-67.
- [7] K. Kamakura, H. Ozoe, Double diffusive natural convection in a rectangle with horizontal temperature and concentration gradients, in: *Thermal Engineering Conference* (1995), Vol.1, 171-178.
- [8] I. T. Nishimura, M. Wakamatsu, A numerical study of the structure of double diffusive natural convection in square cavity, in: *Thermal Engineering Conference* (1995), Vol.1, pp. 193-200.
- [9] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill (1980).
- [10] B.P. Leonard, The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 88 (1991), 17-74
- [11] J.P. Van Doormal, G.D. Raithby, Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows, *Num. Heat Transfer*, 7(1984)., 147-163
- [12] T. L. Bergman, M. T. Hyun, Simulation of two-dimensional thermosolutal convection in liquid metals induced by horizontal temperature and species gradients, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 39 (1996), pp. 2883-2894.