Intensité d'écoulements de convection naturelle induits par chauffage plasmonique

Marc MEDALE^{1*}, Guillaume BAFFOU², Chérifa ABID¹, Serge MONNERET²

¹ Aix-Marseille Université, CNRS, IUSTI UMR 7343
5 rue Enrico Fermi, 13453 Marseille Cedex 13
² Institut Fresnel, CNRS, UMR 7249 Aix Marseille Université, Centrale Marseille 13013 Marseille Cedex
*(auteur correspondant : marc.medale@univ-amu.fr)

Résumé - Ce travail a pour objectif de caractériser les écoulements induits par chauffage plasmonique d'une couche d'eau liquide. Deux configurations ont été considérées : le cas fortement surchauffé précédant l'apparition d'une bulle de vapeur, et celui où cette dernière est apparue. La première configuration est caractérisée par une température maximale de l'ordre de $240 \,^{\circ}C$ et une vitesse maximale de l'ordre de $10 \,\mu m.s^{-1}$. Pour la seconde configuration, la température maximale est de l'ordre de $100 \,^{\circ}C$ et la vitesse maximale de l'ordre de $100 \,\mu m.s^{-1}$. Cette différence d'ordre de grandeur sur la vitesse maximale est due aux forces thermo-capillaires agissant à la surface de la bulle.

Nomenclature

chaleur spécifique, J.kg⁻¹.K⁻¹ conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$ C_p λ épaisseur de la couche d'eau, m viscosité dynamique, Pa.s μ eaccélération de la gravité, $m.s^{-2}$ masse volumique, kg.m $^{-3}$ g ρ $\theta = \frac{T - T_{ref}}{\Delta T_{ref}}$ température adimensionnelle vecteur unitaire, normale sortante à la surface \boldsymbol{n} $Pr = \frac{\mu(T_{ref}) C_p(T_{ref})}{\lambda(T_{ref})}$ nombre de Prandtl de l'eau Indices température, °C Tf fluide vecteur vitesse, m.s⁻¹ Vref référence de température Symboles grecs parois solides sdiffusivité thermique, $m^2.s^{-1}$ κ

1. Introduction

Une des conséquences les plus remarquables d'un chauffage très intense et très localisé d'une couche d'eau liquide est la possibilité d'obtenir à l'échelle macroscopique d'importants niveaux de surchauffe (état liquide métastable). Ceci a été mis en évidence expérimentalement avec un chauffage plasmonique, c'est à dire, produit par illumination laser de nanoparticules d'or, déposées sur un substrat de verre [1]. Grâce aux très fortes densités surfaciques de puissance produites par chauffage plasmonique, l'eau reste liquide à pression atmosphérique jusqu'à une température qui atteint localement $240 \,^{\circ}C$ et ce niveau de surchauffe particulièrement élevé peut être maintenu à l'état stationnaire [2]. Cette découverte ouvre une voie prometteuse pour la réalisation de réactions chimiques hydrothermales, à pression ambiante dans un milieu réactionnel ouvert, pour lesquelles les cinétiques de réaction sont trois à quatre ordres de grandeur plus rapides que celles obtenues conventionnellement en autoclave [3].

Cependant, pour mettre en oeuvre ces techniques particulièrement prometteuses, mais très pointues, il devient crucial de maitriser les champs de température, de concentration des espèces au cours des réactions chimiques, ainsi que celui des vitesses induites par convection naturelle. En effet, au delà d'une valeur seuil de la densité surfacique du chauffage plasmonique (de l'ordre de $10^8 W.m^{-2}$, pour la configuration expérimentale considérée), une bulle composée de

vapeur d'eau et de gaz dissous dans l'eau apparait au centre de la zone illuminée. Plusieurs caractérisations expérimentales de ces écoulements de convection naturelle ont révélé que leur intensité pouvait augmenter de quasiment un ordre de grandeur suite à l'apparition de la bulle. Cependant, ces approches expérimentales sont intrusives et les mesures délicates, ce qui les rend généralement peu quantitatives à ces échelles micrométriques. C'est la raison pour laquelle nous avons cherché à caractériser ces écoulements par simulations numériques, en considérant dans un premier temps le cas le plus simple d'eau pure, dépourvue de réaction chimique.

Ainsi, la principale difficulté de modélisation de ce problème concerne la détermination des propriétés thermo-physiques de l'eau liquide à pression atmosphérique, sur la plage de températures d'intérêt $[20 - 240 \circ C]$. En effet, la loi d'état de l'eau, bien que complexe, est maintenant bien connue [4, 5]. Cependant, celle-ci est déterminée dans les conditions normales (pas de surchauffe ou de sous-refroidissement), pour laquelle à pression atmosphérique, l'eau devient vapeur à $100 \,^{\circ}C$. C'est la raison pour laquelle nous avons utilisé un modèle dilatable [6], avec des propriétés thermo-dépendantes, déterminées à pression de saturation, pour maintenir l'eau liquide jusqu'à $240 \,^{\circ}C$. Nous avons ensuite simulé les expériences dans les deux configurations d'intérêt : avant l'apparition de la bulle, et après. Dans la première configuration, l'écoulement de convection naturelle est induit par le seul gradient de densité de l'eau liquide et atteint une intensité l'ordre de la dizaine micro-mètres/seconde. Dans la seconde configuration, au mécanisme de flottabilité précédent, se rajoute l'effet thermo-capillaire induit à l'interface entre la bulle et l'eau. Ce second phénomène devient alors le moteur dominant de l'écoulement, dont l'intensité est l'ordre de la centaine micro-mètres/seconde. La complexité de l'écoulement résultant dépend de l'intensité relative de chacun des mécanismes (flottabilité et thermo-capilarité). Nous avons ensuite utilisé notre modèle numérique pour réaliser une analyse de sensibilité aux principaux paramètres numériques et physiques du modèle, et nous en présentons les résultats dans cette communication.

2. Equations du problème

Le système considéré est composé de la couche d'eau, confinée horizontalement par deux lamelles de verre, pour lequel les champs de température, de vitesse et pression sont régis par les équations couplées de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. En introduisant les grandeurs de référence de longueur ($L_{ref} = d_{ph}$), vitesse ($V_{ref} = \kappa/L_{ref}$) et température (T_{ref} and ΔT_{ref}), les équations adimensionnelles à résoudre s'écrivent à l'état stationnaire, comme suit :

- Équation de la chaleur dans les lamelles de verre :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\frac{\lambda_s}{\lambda_f(T_{ref})} \boldsymbol{\nabla} \theta_s \right) = 0 \tag{1}$$

associée aux conditions aux limites :

• $\frac{\partial \theta_s}{\partial n} = -\frac{hL_{ref}}{\lambda_s}(\theta_s - \theta_\infty)$ sur les faces horizontales extérieures des deux lamelles de verre; • $\frac{\partial \theta_s}{\partial n} = 0$ le long de l'axe de symétrie et les parois latérales.

- Contraintes aux interfaces solide-liquide :

Aux deux interfaces entre la couche d'eau et les lamelles de verre, nous appliquons les conditions suivantes :

- vitesse nulle : $V = 0|_{z=(0,e)}$;
- continuité du champ de temperature : $(\theta_s = \theta_f)|_{z=(0,e)}$;

- continuité du flux de chaleur à l'interface solide-liquide supérieure $(z = e) : \lambda_f(T) \frac{\partial \theta_f}{\partial z} =$ $\lambda_s \frac{\partial \theta_s}{\partial z}$ et inférieure à l'extérieur du spot laser $(z = 0, r > r_{ph})$: $\lambda_s \frac{\partial \theta_s}{\partial z} = -\lambda_f(T) \frac{\partial \theta_f}{\partial z}$; • discontinuité du flux de chaleur sur la surface de chauffage plasmonique (centre de l'in-
- terface solide-liquide inférieure : $z = 0, r \leq r_{ph}$). Ce chauffage est modélisé à l'échelle macroscopique par une densité de flux de chaleur, uniforme et constante sur la surface de chauffage : $\lambda_s \frac{\partial \theta_s}{\partial z} - \lambda_f(T) \frac{\partial \theta_f}{\partial z} = \phi_{ph}$.

- Équations de Navier-Stokes dilatables et de conservation de l'énergie dans la couche liquide :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot [\rho(T)\boldsymbol{V}] = 0 \tag{2}$$

$$\boldsymbol{V}\cdot\nabla\boldsymbol{V} = -\boldsymbol{\nabla}p + Pr\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\frac{\mu(T)}{\mu(T_{ref})}\left(\bar{\boldsymbol{\nabla}}\boldsymbol{V} + \bar{\boldsymbol{\nabla}}\boldsymbol{V}^T - \frac{2}{3}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{V})\bar{\boldsymbol{I}}\right)\right] + \frac{gL_{ref}^3}{\kappa^2}\left(1 - \frac{\rho(T)}{\rho(T_{ref})}\right)\boldsymbol{e_z}$$
(3)

$$\frac{\rho(T)}{\rho(T_{ref})} \left[\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{\nabla} \left(\frac{C_p(T)}{C_p(T_{ref})} \theta_f \right) \right] = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\frac{\lambda_f(T)}{\lambda_f(T_{ref})} \boldsymbol{\nabla} \theta_f \right]$$
(4)

associées aux conditions aux limites :

- $V \cdot n = 0$ et $\frac{\partial \theta_f}{\partial n} = 0$ le long de l'axe de symétrie; $\frac{\partial (V \cdot n)}{\partial n} = 0$ et $\frac{\partial \theta_f}{\partial n} = 0$ le long des parois latérales du domaine de calcul.

3. Modèle numérique

3.1. Propriétés thermophysiques de l'eau liquide

Bien que la composition chimique de l'eau soit parmi les plus simples, sa loi d'état ne fut déterminée de manière satisfaisante qu'il y a seulement une trentaine d'années [7, 8, 4, 5]. Cependant, celle-ci ne permet pas de reproduire les phénomènes d'intense surchauffe qui se manifestent en chauffage plasmonique, où expérimentalement l'eau reste liquide jusqu'à $T \approx$ 240 °C. C'est pourquoi dans ce travail les propriétés thermophysiques de l'eau liquide ont été considérées à pression de vapeur saturante, sur la plage de températures d'intérêt ($20 \,^{\circ}C$ < $T < 240 \,^{\circ}C$). Ensuite, pour rendre efficace la résolution numérique des équations du problème, nous avons modélisé la dépendance thermique de ces propriétés par les polynomes de degré six suivants (chaque propriété est évaluée en unité SI, avec T exprimé en $^{\circ}C$) :

- Masse volumique :

$$\rho(T) = -9.6774 \ 10^{-13} \ T^6 + 7.4321 \ 10^{-10} \ T^5 - 2.5426 \ 10^{-7} \ T^4 + 4.9608 \ 10^{-5} \ T^3 - 7.8139 \ 10^{-3} \ T^2 + 5.6392 \ 10^{-2} \ T + 999.92$$
(5)

- Viscosité dynamique :

$$\mu(T) = 3.2597 \ 10^{-17} \ T^6 - 3.9876 \ 10^{-14} \ T^5 + 1.9333 \ 10^{-11} \ T^4 - 4.7572 \ 10^{-9} \ T^3 + 6.3518 \ 10^{-7} \ T^2 + 4.6071 \ 10^{-5} \ T + 1.7328 \ 10^{-3}$$
(6)

- Capacité calorifique :

$$C_p(T) = -1.8019 \ 10^{-12} \ T^6 + 6.2246 \ 10^{-10} \ T^5 + 1.4084 \ 10^{-7} \ T^4 - 4.6702 \ 10^{-5} \ T^3 + 1.3265 \ 10^{-2} \ T^2 - 8.1580 \ 10^{-1} \ T + 4.1936 \ 10^3$$
(7)

- Conductivité thermique :

$$\lambda_f(T) = 8.8441 \ 10^{-16} \ T^6 - 1.1267 \ 10^{-12} \ T^5 + 4.1681 \ 10^{-10} \ T^4 - 5.8797 \ 10^{-8} \ T^3 - 3.7349 \ 10^{-6} \ T^2 + 1.7603 \ 10^{-3} \ T + 5.6864 \ 10^{-1}$$
(8)

3.2. Algorithmes et méthodes de résolution

Les propriétés thermo-physiques présentent d'importantes variations relatives sur la plage de températures d'intérêt, notamment la viscosité dynamique $(\Delta \mu/\mu_{(T_{ref})} \approx 0.9, \Delta \rho/\rho_{(T_{ref})} \approx 0.2, \Delta C_p/C_{p_{(T_{ref})}} \approx 0.15, \Delta \lambda_f/\lambda_{f_{(T_{ref})}} \approx 0.15)$. Ces importantes variations sont prises en compte dans le modèle numérique dilatable utilisé pour la résolution des équations sous l'approximation des faibles nombres de Mach [6]. Cette hypothèse est ici pleinement vérifiée, puisque la vitesse maximale de ces écoulements est de l'ordre de 10^{-4} m.s⁻¹, conduisant à un nombre de Mach de l'ordre de 10^{-7} .

La discrétisation spatiale des trois champs d'inconnues (V, θ et p) est effectuée avec la Méthode des Éléments Finis standard. Les champs de vitesses et de températures sont approximés quadratiquement par morceaux dans chaque direction d'espace, tandis que le champ de pression hydrodynamique est de son coté approximé linéairement par morceaux. En dépit des très faibles vitesses d'écoulement, le système d'équations algébriques est fortement non-linéaire en raison des fortes variations des propriétés thermo-physiques. C'est pourquoi, l'algorithme de Newton-Raphson est utilisé pour résoudre itérativement le système algébrique couplé, à l'aide du solveur parallèle direct MUMPS [11], interfacé par la librairie PETSc [12].

4. Résultats

Le modèle numérique décrit ci-dessus a été utilisé pour simuler les deux configurations les plus caractéristiques des écoulement induits par chauffage plasmonique. La première configuration reproduit les conditions où l'eau est localement fortement surchauffée, juste avant l'apparition d'une bulle, tandis que la seconde est consécutive à l'apparition d'une bulle, composée de vapeur d'eau et de gaz dissous, au centre de la zone chauffée. Les simulations numériques ont pour objectif de caractériser de manière quantitative les champs de vitesses et de températures dans chacune de ces deux configurations.

4.1. Configuration fortement surchauffée

Les conditions de très fortes surchauffes locales ont été obtenues expérimentalement pour une configuration définie par une épaisseur de la couche d'eau de e = 1 mm, confinée horizontalement par deux lamelles de verre d'épaisseur 0,5 mm. La lamelle inférieure est recouverte de nano-particules d'or et éclairée par un laser de diamètre focal $d_{ph} = 8.6 \,\mu m$, induisant une densité surfacique de chauffage plasmonique de $\phi_{ph} = 10^8 W.m^{-2}$. Ce problème est supposé axi-symétrique et le domaine de calcul est défini par : $[0 \le r \le 1] \times [-0.5 \le z \le 1.5]$, en millimètres. Il est composé de trois bandes horizontales : les lamelles inférieure $[-0.5 \le z \le 0]$ et supérieure $[1 \le z \le 1.5]$ encadrent la couche d'eau liquide $[0 \le z \le 1]$.

Afin d'obtenir des résultats numériques fiables, nous avons conduit une étude de convergence spatiale pour déterminer les paramètres de discrétisation du modèle. Pour cette configuration, la convergence est obtenue pour des résolutions spatiales de l'ordre du micro-mètre au centre du spot laser, zone où les gradients sont les plus intenses. L'extrapolation de Richardson de la température maximale est $T_{max-RE} = 239.56 \,^{\circ}C$ et celle de la vitesse maximale est $V_{max-RE} = 12.264 \,\mu m.s^{-1}$. Les champs de température et de vitesse calculés sur un maillage 1000×1200 EF Q9 sont présentés sur la figure 1. Malgré le différentiel de conductivité thermique entre le verre et l'eau, le champ de température est quasi-sphérique à l'état stationnaire, cf. fig. 1(a). Le gradient thermique à proximité du spot laser est gigantesque, environ $4 \, 10^6 \,^{\circ}C.m^{-1}$, cf. fig. 1(b). Sa composante radiale induit un gradient de masse volumique de l'eau liquide, qui engendre un

écoulement de convection naturelle. Ce panache thermique se refroidit en s'élevant et le liquide plus froid redescend radialement en formant un tore d'axe vertical, centré sur le spot laser. Dans cet écoulement axisymétrique, la composante verticale du champ de vitesses est environ trois fois supérieure à la composante radiale, cf. fig. 1(c) et fig. 1(d).



(c) Champ d'intensité de l'écoulement (d) Champ de vitesses et lignes de courant

Figure 1 : Configuration fortement surchauffée ($\phi_{ph} = 10^8 \text{ W.m}^{-2}$, $d_{ph} = 8.6 \mu \text{ m}$, e = 1 mm).

Une étude paramétrique nous a permis d'appréhender l'influence des principaux paramètres du problème. Nous avons observé que les valeurs maximales de température et de vitesse varient quasi-linéairement avec la densité surfacique de chauffage plasmonique ($0 < \phi_{ph} \le 10^8 W.m^{-2}$), les autres paramètres restant constants ($d_{ph} = 8.6 \mu m$, e = 1 mm). D'autre part, si l'on fait varier le diamètre du spot laser ($6 \le d_{ph} \le 20 \mu m$), à puissance et épaisseur de liquide constantes ($P_{ph} = 5.81 10^{-3} W$, e = 1 mm), on observe alors que la vitesse maximum d'écoulement passe par un extrémum pour $d_{ph} = 10 \mu m$, tandis que la température maximale décroit monotonement pour d_{ph} croissant ($\phi_{ph} \propto 1/d_{ph}^2$, à puissance constante), cf. figure 2(a). Enfin, en faisant varier l'épaisseur de la couche d'eau ($0, 2 \le e \le 1 mm$) à densité surfacique et diamètre de spot laser constants ($\phi_{ph} = 10^8 W.m^{-2}$, $d_{ph} = 8.6 \mu m$), on observe des

variations quadratiques des vitesses radiale et verticale maximales, accompagnées d'une variation quasi-linéaire du diamètre du tore d'écoulement. La température maximale décroit d'abord faiblement en diminuant l'épaisseur de la couche d'eau, puis ensuite rapidement lorsque les lamelles de verre deviennent distantes de moins de 0,5 mm, cf. figure 2(b), du fait que leur conductivité thermique est presque trois fois supérieure à celle de l'eau.



(a) Influence du diamètre laser à puissance plasmonique fixée ($P_{ph} = 5.81 \ 10^{-3} W$, $e = 1 \ mm$).

(b) Influence l'épaisseur de la couche d'eau $(\phi_{ph} = 10^8 W.m^{-2}, d_{ph} = 8.6 \,\mu m).$

Figure 2 : Configuration fortement surchauffée, étude paramétrique (maillage $1000 \times 1200 EF Q9$).

4.2. Configuration avec une micro-bulle

En augmentant la densité surfacique de puissance de chauffage plasmonique au delà d'une valeur seuil (d'environ $\phi_{ph} = 10^8 W.m^{-2}$ pour cette configuration), la densité de nucléation franchit elle aussi un seuil au delà duquel une micro bulle de vapeur apparait au centre du spot laser. Dans un premier temps, cette micro bulle augmente très rapidement de volume en se remplissant partiellement de gaz, ceux d'une part adsorbés à l'interface entre le substrat de verre et l'eau liquide et d'autre part dissous dans cette dernière. À l'état stationnaire, cette micro bulle contient ainsi un mélange de vapeur d'eau et de gaz [2]. Dans cette configuration, le chauffage plasmonique induit un écoulement de convection naturelle, par l'effet combiné de gradients de masse volumique (flottabilité) et de tension superficielle (thermo-capillarité) le long de l'interface liquide-gaz de la micro bulle. Les paramètres physiques que nous avons considérés dans nos simulations sont issus des conditions expérimentales [2]. Ainsi, pour un chauffage plasmonique induit par un spot laser de diamètre $d_{ph} = 0.78 \,\mu m$, une micro bulle de diamètre $d_{mb} = 1 \,\mu m$ apparait et reste accrochée au substrat de verre avec un angle de mouillage de 60°, à l'état stationnaire. Le domaine de calcul a les mêmes dimensions que dans la configuration précédente, mais dans ce cas le maillage se conforme en plus à l'interface liquide-gaz de manière à ce que tous les éléments ne contiennent qu'un seul des trois milieux physiques (verre, eau, gaz). Le maillage est raffiné dans la micro bulle et à proximité de celle-ci $(0, 05 \,\mu m)$, puis est progressivement dé-raffiné en s'éloignant de la micro bulle, pour atteindre une taille d'environ $1 \mu m$. Les champs de température et de vitesses de l'écoulement induit par convection naturelle sont représentés sur la figure 3(a). L'intense gradient de température qui siège le long de l'interface liquide-gaz induit, principalement par thermo-capillarité, un écoulement formé de deux tores contra-rotatifs, l'un confiné dans la micro bulle, avec un sens de rotation anti-horaire, et le second tore, externe au précédent et de bien plus grande taille, ayant une rotation en sens horaire. Cet écoulement atteint une vitesse maximale de $350 \,\mu m.s^{-1}$, cf. 3(b), soit environ 30 fois plus que dans la configuration sans bulle où le seul moteur de



(a) Champs de température et de vitesse (zoom).







(b) Intensité de l'écoulement (zoom).





Figure 3 : Configuration avec micro bulle ($\phi_{ph} = 1.1 \, 10^8 \, W.m^{-2}$, $d_{ph} = 0.78 \, \mu m$, $d_{mb} = 1 \, \mu m$, $e = 1 \, mm$).

l'écoulement est la flottabilité. Les profils radial et vertical de température et de vitesses sont respectivement représentés sur les figures 3(c) et 3(d). Le profil radial de température est tracé à la surface supérieure du substrat en verre (z = 0), tandis que le profil radial de vitesse est quant à lui tracé at $z = 0.5 \ \mu m$.

5. Conclusion

Nous présentons dans cette communication les principaux résultats de l'étude numérique menée pour caractériser les écoulements de convection naturelle induits par chauffage plasmonique. Deux configurations ont été simulées : la première est caractérisée par un intense niveau de surchauffe pour lequel l'eau reste liquide jusqu'à une température de $240 \,^{\circ}C$ à pression atmosphérique. Pour modéliser correctement cette configuration, nous avons considéré les propriétés thermophysiques de l'eau liquide à pression de saturation, et avons pris en compte leur thermo-dépendance au sein de notre modèle dilatable. Dans ces conditions, l'écoulement est induit par gradient de masse volumique (flottabilité) et la vitesse maximale est d'environ $12 \,\mu m.s^{-1}$. La seconde configuration concerne le cas où la densité surfacique de chauffage plasmonique est telle qu'une micro-bulle est crée et elle reste accrochée au substrat chauffé. Dans ce cas, la température maximale est d'environ $100 \,^{\circ}C$, soit la température de vaporisation de l'eau à pression atmophérique. L'écoulement est induit principalement par thermo-capillarité et atteint $350 \,\mu m.s^{-1}$, soit presque 30 fois plus que dans la configuration précédente.

Références

- [1] G. Baffou, R. Quidant, C. Girard, Heat generation in plasmonic nano structures : Influence of morphology, *Applied Physics Letters* 94 (2009) 153109.
- [2] G. Baffou, J. Polleux, H. Rigneault, and S. Monneret, Super-Heating and Micro-Bubble Generation around Plasmonic Nanoparticles under cw Illumination, J. Phys. Chem. C 118, (2014) 4890–4898.
- [3] H. Robert, F. Kundrat, E. Bermudez-Ureña, H. Rigneault, S. Monneret, R. Quidant, J. Polleux, and G. Baffou, Light-Assisted Solvothermal Chemistry Using Plasmonic Nanoparticles, ACS Omega 1 (2016) 2-8.
- [4] W. Wagner and A. Pruβ, The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use, J. Phys. Chem. Ref. Data 31 (2002) 387–535.
- [5] The International Association for the Properties of Water and Steam : http://www.iapws.org/
- [6] M. Medale and A. Haddad, A 3D Low Mach Number model for high performance computations in natural or mixed convection newtonian liquid flows, *Journal of Physics : Conference Series*, 395 (2012) 012095.
- [7] R. C. Reid, J. M. Prausnitz and B. E. Poling, *The properties of gases and liquids*. 4th edition. McGraw-Hill Inc. (1987).
- [8] C. A., Jeffery and P. H. Austin, A new analytic equation of state for liquid water, *Journal of Chemical Physics*, 110, (1999) 484–496.
- [9] D. Gray and A. Giorgini. The validity of the Boussinesq approximation for liquids and gases. *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 19, pp. 545–551, 1976.
- [10] P. De Boer. Thermally driven motion of strongly heated fluids. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, Vol. 27, pp. 2239–2252, 1984.
- [11] P. R. Amestoy, I. S. Duff, and J.-Y. L'Excellent, Multifrontal parallel distributed symmetric and unsymmetric solvers, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 184 (2000) 501–520.
- [12] S. Balay, J. Brown, K. Buschelman, V. Eijkhout, W. D. Gropp, D. Kaushik, M. G. Knepley, L. C. McInnes, B. F. Smith, and H. Zhang. PETSc users manual. Technical Report ANL-95/11 Revision 3.7, Argonne National Laboratory, 2016.

Remerciements

Le premier auteur remercie très chaleureusement Yann Jobic pour l'installation et la mise à disposition des diverses bibliothèques de calculs à hautes performances nécessaires à l'exécution de notre code sur les serveurs de calcul de notre laboratoire.