Simulation numérique d'un panache thermique stationnaire dans un fluide supercritique

Gilbert ACCARY^{1*}, Patrick BONTOUX², Bernard ZAPPOLI³

¹Université Saint-Esprit de Kaslik, Faculté de Sciences et de Génie Informatique, Département de Sciences et Technologie, B.P. 446 Jounieh, Liban

²Laboratoire MSNM-GP, UMR 6181 CNRS, Technopôle de Château-Gombert, 38 rue Frédéric Joliot Curie, 13451 Marseille, France

³CNES, 18 Avenue Edouard Berlin, 31401 Toulouse, France

*(auteur correspondant : <u>gilbertaccary@usek.edu.lb</u>)

Résumé - Le développement d'un panache thermique - provenant d'une source de chaleur ponctuelle - dans un fluide, légèrement au dessus de son point critique liquide-vapeur, est étudié numériquement. La forte stratification du fluide induite par sa forte compressibilité sous l'effet de son propre poids empêche la progression du panache qui, une fois développé, n'évolue que par diffusion ; une configuration souvent observée aux échelles atmosphériques est reproduite dans une cellule centimétrique contenant un fluide supercritique.

Nomenclature

- *a,b* paramètres de l'équation d'état de van der Waals
- $C_{P,V}$ capacité calorifique à pression constante et à volume constant, $J.Kg^{-1}.K^{-1}$
- g gravité terrestre, $m.s^{-2}$
- *H* côté de la cavité carrée, *cm*
- *P* pression, *Pa*
- Q scalaire passif
- r distance au point (0,5H; 0,25H), m
- *R* constante du gaz parfait, $J.Kg^{-1}.K^{-1}$
- *S* puissance du chauffage, *W*
- T température, K

x,y système de coordonnées, m Symboles grecs

- β_P coefficient d'expansion thermique, K^T
- ε proximité adimensionnelle du PC, $(T_i-T_c)/T_c$
- λ conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$
- μ viscosité dynamique, *Pa.s*
- χ_T compressibilité isotherme, Pa^{-1}
- Indices et exposants
- 0 gaz parfait, loin du PC
- *i* initial
- c critique

1. Introduction

La convection naturelle dans un fluide proche de son point critique (PC) liquide-vapeur a été le sujet d'intérêt croissant depuis la mise en évidence de l'Effet Piston [1-3]. Cet effet thermo-acoustique, responsable de l'équilibre thermique rapide dans un fluide supercritique (FSC), résulte du comportement singulier des propriétés de transport au voisinage du PC, comme l'évanescence de la diffusivité thermique ou la divergence du coefficient d'expansion thermique et de la compressibilité isotherme. Une autre conséquence de cette dernière anomalie critique est la forte stratification du FSC sous l'effet de son propre poids. Des variations de densité de l'ordre de 10% ont été déjà observées dans une cellule de quelques centimètres contenant un FSC [4]. Pour un fluide normalement compressible, de telles variations de densité sont souvent rencontrées dans des systèmes de très grandes dimensions. Par exemple, le gradient de densité dans une cellule contenant du CO₂, 1K au dessus de son PC, est presque mille fois (sous forme adimensionnelle) supérieure à celle de l'atmosphère. Par conséquent, certains mécanismes de convection rencontrés dans les écoulements géophysiques, peuvent être reproduits (du moins qualitativement) à petites échelles dans un FSC qui, dans certaines configurations, peut servir de modèle réduit pour les écoulements géophysiques [5].

Par simulation numérique directe, cet article illustre l'interaction entre la convection et la stratification du FSC dans une configuration souvent rencontrée dans l'atmosphère. Un panache thermique provenant d'une source de chaleur ponctuelle est généré dans une cellule contenant un FSC. Cette configuration a déjà été étudiée [6] dans le but d'estimer la contribution de l'Effet Piston à l'équilibre thermique global de la cellule en présence d'un panache thermique ; cependant, ni l'intensité du chauffage considéré (relativement trop fort) ni la modélisation considérée (ne prenant pas en compte la stratification du fluide) ne convenait pour observer l'interaction recherchée ici entre la convection et la stratification du fluide. Dans cette étude, l'approximation à faible nombre de Mach du modèle mathématique proposé pour l'écoulement d'un FSC [7] a été modifiée [8] pour prendre en compte la stratification du fluide, ce qui rend son interaction avec la convection possible. On montre comment l'évolution du panache thermique est ralentie et même bloquée par son environnement stratifié. Une illustration géophysique de cette pénétrabilité de convection est par exemple la hauteur terminale d'une montée de fumée ou d'autres produits de combustion due à la présence d'une stratification thermique stable de son environnement. Un nombre considérable d'études a été consacré au cours des trois dernières décennies à la pénétrabilité de la convection [9,10] vu ses nombreuses applications géophysiques.

2. Modèle mathématique

On considère un fluide sur son isochore critique et à une température T_i légèrement au dessus de la température critique T_c , de sorte que $T_i = (1+\varepsilon) T_c$. L'écoulement et le transfert thermique dans un tel fluide sont gouvernés par le couplage des équations de Navier-Stokes et de l'équation de l'énergie, tandis que son équilibre thermodynamique est qualitativement décrit par l'équation d'état de van der Waals donnée par :

$$P + a\rho^2 = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} \tag{1}$$

Où *P* est la pression, ρ est la densité et *T* est la température. *R* est la constante des gaz parfait et *a* et *b* sont respectivement le paramètre d'énergie et le co-volume déterminés à partir des coordonnées critiques : $a = 9RT_c/(8\rho_c)$ et $b = 1/(3\rho_c)$. Malgré sa simplicité, l'équation d'état de van der Waals rempli les conditions nécessaires pour l'existence du PC et produit une divergence critique en ε^{-1} de la compressibilité isotherme χ_T , du coefficient d'expansion thermique β_P , et de la capacité calorifique à pression constante C_P . Une autre conséquence de l'équation d'état de van der Waals est l'expression de l'énergie interne donnée par : $U = C_V T - a\rho$. La capacité calorifique à volume constant C_V et la viscosité dynamique μ sont supposées constantes et égales à leurs valeurs loin du PC, C_{V0} et μ_0 respectivement, où le fluide est supposé se comporter comme un gaz parfait. Tandis que la divergence de la conductivité thermique λ est décrite par une loi de la forme $\lambda = \lambda_0(1+0,75\times\varepsilon^{-1/2})$. On considère les coordonnées critiques du dioxyde de carbone ($T_c = 304,13 \text{ K}$; $\rho_c = 467,8 \text{ Kg.m}^{-3}$) et ses propriétés de transport ($C_{V0} = 472,2 \text{ J.Kg}^{-1}.K^{-1}$; $\mu_0 = 34,4 \mu Pa.s$; $\lambda_0 = 0,01 \text{ W.m}^{-1}.K^{-1}$), l'étude est menée pour $T_i = T_c + 1K$ ($\varepsilon = 3,29\times10^{-3}$). Pour ce modèle, le gradient de température adiabatique $g\beta_P T_i/C_P$ (où *g* est la gravité terrestre) est égal à 0,344 mK/cm, comparable à celui de l'atmosphère ¹ qui est de l'ordre de 10 K/Km.

¹ Le gradient de température adiabatique gouverne la convection naturelle dans l'atmosphère. Lorsque le gradient de température local dépasse le gradient de température adiabatique dans une couche atmosphérique, celle-ci devient instable. Plusieurs études [11-13] ont montré la pertinence du gradient de température adiabatique pour la convection naturelle dans un FSC du fait de sa forte compressibilité isotherme.

Ce modèle [7] est considéré dans une approximation à faible nombre de Mach qui a été récemment adaptée [8] pour prendre en compte la forte stratification du FSC sous l'effet de son poids. La seule, néanmoins essentielle, différence avec l'approximation classique à faible nombre de Mach (souvent considérée pour un fluide normalement compressible) [14] est la définition des conditions initiales. L'approximation classique suppose des champs initiaux de densité et de pression sont homogènes, tandis que dans l'approximation à faible nombre de Mach adaptée à l'écoulement des FSC, les champs initiaux de densité et de pression sont stratifiés verticalement. Dans une approximation linéaire (qui est suffisante pour la proximité considérée du PC), le gradient de densité initial, obtenu de l'équilibre hydrostatique du fluide sous la contrainte de l'équation d'état de van der Waals, est égal à $\varepsilon^{-1}g/2a$ tandis que le gradient de pression correspondant, dépendant uniquement du poids du fluide, est égal à $g\rho_c$.

Les équations de Navier-Stokes et de l'énergie sont résolues par une méthode implicite du type volumes finis sur un maillage structure non uniforme ; la méthode est précise à l'ordre 2 en espace et à l'ordre 3 en temps [15]. En plus de ces équations, une équation de transport d'un scalaire passif Q a été implémentée avec un coefficient de diffusion mille fois inférieur à la diffusivité thermique du fluide. Ce scalaire passif Q est donc un traceur, simplement advecté par l'écoulement indiquant le mouvement du fluide.

3. Position du problème

Une cavité carrée de côté H = 1 cm contient un FSC soumis au champ de gravité terrestre g (Fig. 1-a). Les frontières horizontales sont des parois solides (condition de non glissement) isolées thermiquement, tandis que des conditions de symétrie sont appliquées sur les frontières verticales. Initialement le fluide est au repos, en équilibre thermodynamique à une température $T_i = T_c + 1K$, stratifié sous l'effet de son poids avec une densité moyenne égale à sa densité critique ρ_c . La simulation numérique commence par l'injection d'une certaine puissance de chauffage au point (0,5H; 0,25H).



Figure 1 : (a) Un FSC dans une cavité carrée (H = 1 cm), un chauffage d'intensité S est injecté au point (0,5H ; 0,25H). (b) Le maillage de 120^2 points considéré pour S = 3mW, le maillage est raffiné au niveau de la source de chaleur et au voisinage des parois solides. (c) Profils instantanés de température en x = 0,5H pour S = 3 mW, montrant le chauffage rapide et homogène du fluide par l'Effet Piston. Le profil en t = 2s est déformé par l'émergence du panache thermique.

D'une part, l'intensité de ce chauffage est augmentée durant la première seconde de la simulation jusqu'à une valeur fixe *S*, elle est ensuite maintenue constante. D'autre part, ce chauffage est réparti en loi sinusoïdale sur un cercle de rayon e = 0,01H; ainsi, à une distance *r* du point (0,5*H*; 0,25*H*), $0 \le r \le e$, l'intensité *s*(*r*) du chauffage (pour *t* > 1*s*) est donnée par :

$$s(r) = \frac{S}{\pi e^2} \frac{\pi^2}{\pi^2 - 4} \left(1 + \cos \frac{\pi r}{e} \right)$$
(2)

La même expression du terme source a été introduite dans l'équation de transport du scalaire passif Q, pour lequel une condition de Neumann $(\partial Q/\partial n = 0)$ a été imposé sur toutes les frontières. Un flux de Q est donc injecté au point (0,5H; 0,25H); la distribution de Q et son évolution montre le mouvement du fluide traversant ce point. La structure du maillage considéré est montrée par la figure 1-b, ces dimensions et le pas de temps dépendent de l'intensité du chauffage.

4. Résultats

Le comportement recherché a été obtenu pour des intensités de chauffage S de quelques mW; le cas S = 3 mW est présenté ici et a nécessité un maillage de 120^2 et un pas de temps de 0,0125 s pour une solution indépendante de ces paramètres numériques. Les résultats sont qualitativement similaires pour S = 1,5 mW et 5 mW.

A cause de la faible diffusivité thermique du FSC et son coefficient d'expansion thermique élevé, le chauffage induit autour du point (0,5H; 0,25H) d'importants gradients de densité (de l'ordre de 5 Kg.m⁻³/mm). D'une part, la dilatation de cette zone circulaire induit par couplage thermo-acoustique (Effet Piston) un chauffage homogène de la cavité dès les premiers instants de la simulation (Fig. 1-c). D'autre part, ces fortes variations de densité produisent des vitesses de l'ordre de 2 mm.s⁻¹ (qui sont relativement élevées étant donné les dimensions de la cavité) générant le panache thermique montré par les champs de température de la figure 2; Cependant, d'après la figure 1-c, même en présence du transport convectif, l'Effet Piston reste l'acteur principal responsable de l'équilibre thermique de la cavité.



Figure 2 : Champs instantanés de température et lignes de courant pour la moitié du domaine, la solution étant symétrique par rapport à la ligne x = 0,5H.

Une fois émergé, le mouvement du panache thermique est soumis à l'effet ralentissant de la stratification. Pour mieux visualiser ce panache, des champs de Q sont montrés par la figure 4 ; la gamme de variation de Q n'est pas significative puisqu'il s'agit d'un scalaire passif et son équation de transport est linéaire par rapport à Q. En effet, le champ de Q indique la région dans laquelle le fluide, chauffé en traversant la zone chaude, est advecté ; en d'autres termes, les contours de Q définissent le panache thermique. On remarque dans la figure 3 que l'évolution du panache est significativement ralentie ; le panache est pratiquement immobile et évolue uniquement par diffusion, son sommet avance d'environ 0.1 mm/s. Ce comporte-

ment stationnaire a lieu parce que les variations de densité dues à la stratification du fluide (environ 0.11 Kg/m^3 entre la paroi inférieure et la paroi supérieure) sont comparables à celles que provoque le chauffage : la variation maximale de densité ayant lieu en (0,5H; 0,25H) est d'environ 0.5 Kg/m^3 (voir Fig. 3). Maintenant, la même simulation est répétée en utilisant l'approximation classique à faible nombre de Mach, ce qui consiste simplement à supprimer la stratification initiale de densité et de pression du modèle. La figure 4 montre comment le panache thermique évolue beaucoup plus vite dans ce cas, et par l'intermédiaire du champ de pression dynamique, la figure 4 illustre l'impacte du panache sur la paroi supérieure, ce qui ne se produit pas (ou du moins se produit bien plus tard et avec beaucoup moins d'intensité) quand la stratification est prise en compte dans le modèle.



Figure 3 : Champs instantanés de Q (moitié gauche du domaine) et de densité avec les lignes de courant (moitié droite), la solution étant symétrique par rapport à la ligne x = 0.5H. O est nul sur les frontières, sa valeur est maximale au niveau de la source du chauffage (où ρ - ρ_c atteint son minimum) et ses niveaux sont distribués linéairement.



-0.32 -0.23 -0.14 -0.05 0.04 0.13 0.21 0.30 0.39 0.48 0.57 0.66 0.74

Figure 4 : Champs instantanés de Q (moitié gauche du domaine) et de la pression dynamique (p) [16] avec les lignes de courant (moitié droite), obtenus pour S = 3mW. (a) Approximation à faible nombre de Mach adaptée à l'écoulement du FSC [8], (b) Approximation classique à faible nombre de Mach [14] (ne prenant pas en compte la stratification du fluide).

5. Conclusion

La convection dans un FSC peut servir de modèle réduit pour certains écoulements géophysiques [5]. Avec une proximité du point critique $\varepsilon = 3.29 \times 10^{-3}$, la stratification du fluide est suffisamment intense pour interagir avec la convection, mais cette interaction a été observée pour des chauffages de faibles intensités, ce qui est cependant très commun dans les expériences concernant la stabilité hydrodynamique des FSC [12]. Des valeurs plus faibles de ε permettraient cette interaction à des chauffages plus intenses, et vu le caractère continu des anomalies critiques, les résultats seraient qualitativement similaires. Cependant, pour prendre en compte la stratification de densité sans effort numérique supplémentaire à celui de l'approximation classique, l'approximation à faible nombre de Mach adaptée aux FSC [8] est limitée aux faibles variations de densités. Des chauffages plus intenses nécessiteraient la résolution de l'ordre Ma^2 des équations de transport, les équations anélastiques [14] souvent considérées dans les problèmes de circulations stellaires.

Références

- [1] B. Zappoli, D. Bailly, Y. Garrabos, B. Le Neindre, P. Guenoun, and D. Beysens, Anomalous heat transport by the piston effect in supercritical fluids under zero gravity, *Phys. Rev. A*, 41 (1990), 2264.
- [2] A. Onuki, H. Hao, and R. A. Ferrel, Fast adiabatic equilibration in a single-component fluid near the liquid-vapour critical point, *Phys. Rev. A*, 41 (1990), 2256.
- [3] H. Boukari, J. N. Schaumeyer, M. E. Briggs, and R. W. Gammon, Critical speeding up in pure fluids, *Phys. Rev. A*, 41 (1990), 2260.
- [4] J. V. Sengers and M. R. Moldover, Critical phenomena in a low gravity environment, *Space Res.*, 18 (1978), 495.
- [5] G. Accary, P. Bontoux and B. Zappoli, Convection in a supercritical fluid: a reduced model for geophysical flows, *Phys. of Fluids*, 19(1) (2007), 014104.
- [6] B. Zappoli, A. Jounet, S. Amiroudine, and A. Mojtabi, Thermoacoustic heating and cooling in hyper-compressible fluids in the presence of thermal plume, *J. Fluid Mech.* 388 (1999), 389.
- [7] B. Zappoli, S. Amiroudine, P. Carles, J. Ouazzani, Buoyancy-driven and acoustic thermal convection in a square cavity containing supercritical CO₂, *J. of Fluid Mech.*, 316 (1996), 53.
- [8] G. Accary, I. Raspo, P. Bontoux, B. Zappoli, An adaptation of the low Mach number approximation for supercritical fluid buoyant flows, *C. R. Méc.*, 333 (2005), 397.
- [9] Y. Jaluria, Natural Convection Heat and Mass Transfer, *Pergamon Press*, London (1980).
- [10] A. V. Getling, Rayleigh-Bénard Convection: Structures and Dynamics, *World Scientific* (1998).
- [11] M. Gitterman and V. A. Steinberg, Criteria for the commencement of convection in a liquid close to the critical point, *High Temperature, USSR*, 8-4 (1970), 754. P. Carlès and B. Ugurtas, The onset of free convection near the liquid-vapour critical point. Part I: Stationary initial state, *Physica* D 126 (1999), 69.
- [12] A. B. Kogan and H. Meyer, Heat transfer and convection onset in a compressible fluid: 3He near the critical point, *Phys. Rev. E*, 63 (2001), 056310.
- [13] G. Accary, I. Raspo, P. Bontoux, B. Zappoli, Reverse transition to hydrodynamic stability through the Schwarzschild line in a supercritical fluid layer, *Phys. Rev. E*, 72 (2005), 035301.
- [14] S. Paolucci, On the filtering of sound from the Navier-Stokes equations, *Sandia National Lab. Report, SAND*, 82 (1982), 8257.
- [15] G. Accary and I. Raspo, A 3D finite volume method for the prediction of a supercritical fluid buoyant flow in a differentially heated cavity, *Comp. & Fluids*, 35-10 (2006), 1316. Les simulations ont été réalisées par la version 2D du code.
- [16] Dans l'approxiamtion à faible nombre de Mach, la pression dynamique p est la partie inhomogène de la pression totale qui apparaît à travers son gradient dans les équations de mouvement, $p \sim O(\rho_c v^2)$.

Remerciements

Les auteurs remercient le support financier du CNES et les moyens informatiques fournis par l'IDRIS.