

Sensibilité à la condition initiale de la convection naturelle de Bénard-Marangoni en régime transitoire.

Eric CHÉNIER^{1*}, Christophe DESCELIERS¹, Benoît TROUETTE²

¹Université Paris-Est, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME FRE3160 CNRS, 5 bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée, France

²Université Paris-Sud 11, LIMSI-CNRS, Bât. 508, 91405 Orsay Cedex, France

* (auteur correspondant : Eric.Chenier@univ-mlv.fr)

Résumé - La sensibilité de l'évolution transitoire de la convection naturelle de Bénard-Marangoni vis-à-vis de la condition initiale thermique est étudiée à l'aide d'un modèle probabiliste de Karhunen-Loeve. Les grandeurs moyennes et les incertitudes sont calculées par une méthode de Monte Carlo. Les paramètres du modèle probabiliste sont étudiés et les résultats sont comparés à une approche classique dans laquelle la condition initiale numérique est perturbée par l'ajout d'une composante aléatoire uniforme et centrée sur chaque degré de liberté numérique.

Nomenclature

A	rapport de forme, $= L^*/e^*$	x, z	coordonnées spatiales
e^*	épaisseur fluide, m	<i>Symboles grecs</i>	
h	coefficient de convection, $W.m^{-2}.K^{-1}$	α	diffusivité thermique, $m^2.s^{-1}$
k	Conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$	β	coefficient d'expansion, K^{-1}
L	chaleur latente, $J.m^{-3}$	γ	tension de surface, $kg.s^{-2}$
L^*	longueur de la cavité, m	μ	viscosité dynamique, $kg.m^{-1}.s^{-1}$
p	pression	$\theta(x)$	fluctuation de température initiale
t	temps	<i>Indices et exposants</i>	
T	température	*	grandeurs dimensionnelles
\vec{v}	vecteur vitesse	ξ	grandeurs probabilistes

1. Introduction

Les travaux numériques ou expérimentaux sur la convection naturelle de Rayleigh-Bénard ou de Bénard-Marangoni sont abondants dans la littérature. Ils sont en grande partie consacrés à l'étude des transitions en fonction des paramètres gouvernant la physique du problème. Ces transitions ont généralement lieu entre états stationnaires, périodiques, quasi-périodiques, voire chaotiques. Dans chacun de ces cas, il existe au moins un état asymptotique établi qui se traduit par la présence d'un attracteur dans l'espace des phases. Cet attracteur attire la dynamique selon une trajectoire qui est dépendante de la condition initiale. S'intéresser à cette dynamique transitoire implique donc de se poser la question du choix de la condition initiale.

Le problème étudié dans ce papier porte sur un modèle thermique du processus de séchage pour des temps très courts [1]. L'objectif est d'étudier numériquement la dynamique et le champ thermique de l'écoulement au cours du temps pour une condition initiale construite comme la superposition d'un champ moyen et d'une fluctuation. Une approche stochastique, basée sur des développements de Karhunen-Loeve, est utilisée pour construire les perturbations. Les résultats sont comparés à ceux obtenus par une approche plus conventionnelle dans laquelle la perturbation est définie par une fluctuation aléatoire sur les degrés de liberté numériques.

2. Modélisations

Pour les solutions diluées polymère-solvant [1], le temps caractéristique de diffusion thermique est beaucoup plus faible que celui de diffusion massique. Sur les premiers instants de séchage, il est donc possible de se ramener à un problème purement thermique pour un fluide newtonien dont les propriétés sont celles du solvant, à l'exception de la viscosité qui est très fortement sensible à la fraction massique initiale de polymère. Aux temps courts, la masse évaporée de solvant est également négligeable ce qui permet de supposer une épaisseur de fluide constante.

Le refroidissement de la surface libre par évaporation peut potentiellement engendrer la convection par amplification d'instabilités gravitaires (poussée d'Archimède) ou surfaciques (tension de surface).

2.1. Equations de conservation

Soit une cuve rectangulaire de longueur L^* , de parois adiabatiques, et contenant un fluide newtonien sur une épaisseur e^* en contact avec l'air. La surface libre est plane et indéformable. Les champs de vitesse et de température sont solutions des équations d'évolution de Navier-Stokes et de l'énergie écrites sous l'approximation de Boussinesq. En utilisant l'épaisseur du film fluide e^* , la vitesse de diffusion thermique α/e^* comme échelles de référence et $T=(T^*-T_0^*)/\Delta T$ la variable thermique réduite, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{v} + \text{div}(\vec{v} \otimes \vec{v}) = -\overrightarrow{\text{grad}} p + \text{Pr} \Delta \vec{v} + \text{Ra Pr} T \vec{e}_z \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T + \text{div}(\vec{v} T) = \Delta T \quad (2)$$

$$\text{div} \vec{v} = 0 \quad (3)$$

avec T_0^* la température initiale et à l'infini du gaz surmontant le fluide, ΔT l'écart de température entre T_0^* et celle atteinte à l'équilibre final (le flux perdu par évaporation est équilibré par le transfert convectif avec l'extérieur), $\text{Ra} = g\beta\Delta T(e^*)^3/(\nu\alpha)$ et $\text{Pr} = \nu/\alpha$ les nombres de Rayleigh et Prandtl. Le fluide adhère sur les parois solides adiabatiques. En surface libre, l'équilibre mécanique adimensionnel impose

$$\frac{\partial u}{\partial z}_{z=1} = -\text{Ma} \frac{\partial T}{\partial x}_{z=1} \quad (4)$$

avec $\text{Ma} = -(\partial\gamma/\partial T^*)\Delta T e^*/(\alpha\mu)$ le nombre de Marangoni. La condition thermique à l'interface traduit l'équilibre entre le flux de conduction de la chaleur dans le fluide et la somme de celui échangé par convection avec l'extérieur et évacué par évaporation. Compte tenu des faibles fluctuations de la température, une approche linéarisée du flux d'évaporation autour de T_0^* est adoptée [2] :

$$-k \frac{\partial T^*}{\partial z}_{z^*=e^*} = H(T^*(x^*, e^*, t^*) - T_0^*) + L\Phi(T_0^*) \quad (5)$$

avec $\Phi(T_0^*)$ le flux d'évaporation à T_0^* et $H = h + L \frac{\partial \Phi}{\partial T}_{T_0^*}$. Sous forme adimensionnelle cette condition aux limites thermique s'écrit :

$$\frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=1} = -Bi(T+1) \quad (6)$$

avec $Bi=He^*/k$ le nombre de Biot. La présentation des conditions initiales fait l'objet de la section suivante.

2.2. Conditions initiales

En s'abstrayant des erreurs liées aux solutions numériques discrètes, approximations des solutions continues qui elles-mêmes sont issues d'une modélisation de la physique, la reproduction par voie numérique d'une évolution physique transitoire nécessite la connaissance précise des conditions initiales expérimentales, lesquelles sont généralement entachées d'incertitudes. Dans un problème non-linéaire, une légère modification de la condition initiale peut se traduire par une modification importante de l'évolution de la solution discrète. La pertinence d'une simulation numérique particulière, munie de sa condition initiale, se pose donc naturellement. Une façon de contourner cette difficulté est de ne plus s'intéresser à une unique simulation mais à un ensemble de simulations pour lequel il est possible d'extraire un comportement moyen et d'évaluer des incertitudes.

Dans notre problème, nous supposons que les conditions initiales cinématiques sont parfaitement connues : le fluide est au repos. Les éléments d'incertitude résident uniquement dans la connaissance du champ thermique. La température initiale est modélisée par un champ moyen uniforme à la température T_0^* ($T_0=0$ en adimensionnel) sur lequel est ajouté une fluctuation de nature probabiliste qui ne dépendant que de x : $T_\xi(x,z,t=0)=0+\theta_\xi(x)$. Les grandeurs probabilistes sont indicées par ξ . Les moyennes et écarts types sont obtenues par une méthode de Monte Carlo.

- **Modèle « classique » de la fluctuation.** L'approche la plus simple consiste à discrétiser $\theta(x)$ puis d'imposer aux degrés de liberté discrets de la fluctuation de satisfaire une loi de probabilité uniforme centrée. Cette approche excite indépendamment tous les modes numériques de la fluctuation et engendre donc, pour chaque tirage, des gradients qui tendront vers l'infini lorsque le maillage sera raffiné. La variable probabiliste ne satisfait également pas aux conditions aux limites en $x=0$ et $x=A$.
- **Développement de Karhunen-Loeve.** En l'absence des conditions aux limites, la perturbation stochastique $\theta_\xi(x)$ possède une cohérence spatiale caractérisée par une fonction d'autocorrélation qui est choisie sous la forme $\bar{R}_\theta(x,y) = R_0 \exp(-|x-y|/\lambda)$ avec $\lambda \in \mathfrak{R}^{+*}$ la longueur de corrélation et $R_0 \in \mathfrak{R}^{+*}$. En utilisant un développement de Karhunen-Loeve [3], en tenant compte des conditions aux limites et en n'utilisant qu'un nombre fini N de modes, la perturbation stochastique s'écrit :

$$\theta_\xi(x) = \sqrt{\frac{2\lambda R_0}{A}} \left(\xi_0 + \sum_{n=1}^N \xi_n \sqrt{2} \sqrt{1 + \lambda^2 \left(\frac{n\pi}{A} \right)^2} \cos\left(\frac{n\pi}{A} x \right) \right) \quad (7)$$

avec ξ_0, \dots, ξ_N , une suite de valeurs aléatoires réelles satisfaisant une loi uniforme centrée autour de zéro et de variance unitaire. La fonction d'autocorrélation, définie comme la variance du produit scalaire dans $L^2([0,A])$ entre $\theta_\xi(x)$ et $\theta_\xi(y)$, s'écrit :

$$R_\theta^N(x,y) = \frac{2\lambda R_0}{A} \left(1 + \sum_{n=1}^N 2 \sqrt{1 + \lambda^2 \left(\frac{n\pi}{A} \right)^2} \cos\left(\frac{n\pi}{A} x \right) \cos\left(\frac{n\pi}{A} y \right) \right) \quad (8)$$

2.3. Modèle discret

Les équations d'évolution sont discrétisées par une méthode de volumes finis sur maillages structurés et décalés. Les opérateurs spatiaux et temporels sont exprimés au second ordre avec un schéma Euler implicite pour les termes de diffusion et d'Adams Bashforth pour les contributions non-linéaires. L'équation de pression est découplée de celle de quantité de mouvement grâce à l'utilisation d'une méthode de projection. La suite des valeurs aléatoires permettant de construire la condition initiale est générée par un programme libre qui est une implémentation 64 bits de l'algorithme Mersenne Twister.

3. Résultats

Les simulations sont réalisées pour une longueur adimensionnelle $A=20$, un maillage régulier de 800×40 cellules, un temps adimensionnel de 10 et un pas de temps variable pour suivre avec précision la dynamique sur les premiers instants. Le pas de temps est initialisé à 10^{-4} , augmente de 1% à chaque itération jusqu'à atteindre une valeur maximale de 10^{-3} . Les nombres de Rayleigh, Prandtl, Marangoni et Biot sont fixés à $Ra=451$, $Pr=12$, $Ma=5850$ et $Bi=0,2$. Ces valeurs sont issues de travaux expérimentaux [1] et numériques [2].

Les calculs sont effectués sur une machine parallèle à 12 nœuds bi-processeurs 64 bits. Une simulation de Monte Carlo dure environ 15 minutes.

3.1. Caractérisation de la fonction d'autocorrélation

La fonction d'autocorrélation $R_\theta^N(x, y)$ dépend d'un paramètre entier N qui a vocation à tendre vers l'infini. Pratiquement, nous choisirons une valeur N finie telle que l'erreur relative entre les fonctions d'autocorrélation $R_\theta^N(x, y)$ et $R_\theta^{N_\infty}(x, y)$ soit inférieur à 10^{-2} :

$$\sqrt{\left(\int_0^L \int_0^L (R_\theta^N(x, y) - R_\theta^{N_\infty}(x, y))^2 dx dy \right) / \left(\int_0^L \int_0^L (R_\theta^{N_\infty}(x, y))^2 dx dy \right)} < 10^{-2} \quad (9)$$

avec $N_\infty=10^6$. Ce critère nous conduit à choisir $N=100$ pour $\lambda=1$ et $N=8$ pour $\lambda=10$. On peut remarquer que, lorsque $\lambda=1$, la longueur d'onde la plus petite intervenant dans l'expression de la fluctuation (7) vaut $2/5=0,4$: compte tenu du maillage horizontal choisi, ce mode sera discrétisé sur 16 mailles.

Les représentations graphiques des fonctions d'autocorrélation $R_\theta^N(x, y)$ et $\bar{R}_\theta(x, y)$ sont similaires pour les couples d'abscisse (x, y) éloignés des frontières adiabatiques et la longueur pour laquelle ces fonctions coïncident augmente avec la diminution du rapport λ/A .

3.2. Sensibilité de la dynamique à la condition initiale

Les figures 1a et 1b présentent des fluctuations de température $\theta_\xi(x)$ modélisées par un développement de Karhunen-Loeve pour $\lambda=1$ ($R_\theta=1,2 \cdot 10^{-8}$) et $\lambda=10$ ($R_\theta=4,9 \cdot 10^{-8}$), la valeur de R_θ étant choisie pour que les valeurs moyennes des maxima des fluctuations initiales soient proche 0,00025 pour les deux longueurs d'autocorrélation. Afin d'illustrer la sensibilité de la dynamique à la condition initiale, les évolutions temporelles des écarts maximaux de température, $\Delta T_\xi^{\max}(t) = \max_{(x, y) \in \Omega} (T_\xi(x, y, t)) - \min_{(x, y) \in \Omega} (T_\xi(x, y, t))$ (Fig. 2a), et des maxima de vitesse, $\Delta U_\xi^{\max}(t) = \max_{(x, y) \in \Omega} \|\vec{v}_\xi(x, y, t)\|$ (Fig. 2b), sont tracées pour les deux conditions initiales probabilistes de la figure 1a. L'écart maximal de température pour le problème

diffusif ($Ma=0$, $Ra=0$) est également présenté sur la figure 2a (courbe sans symbole). On

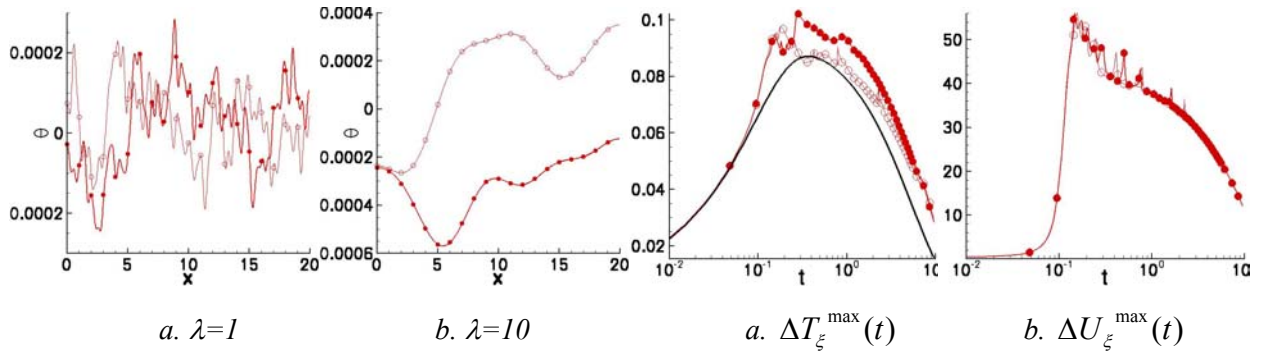


Figure 1 : Exemples de fluctuations probabilistes de température

Figure 2 : Evolutions probabilistes pour $\lambda=1$

remarque que les courbes de la figure 2a sont confondues sur les premiers instants. L'apparition de la convection se traduit par une augmentation de $\Delta T_{\xi}^{\max}(t)$ par rapport à la situation diffusive. Ce décrochage apparaît qualitativement proche du premier symbole circulaire plein, pour $t=0,05$. A cet instant, $\Delta U_{\xi}^{\max}(t=0,05)$ est compris entre 1 et 2 (Fig. 2b). Ensuite suit une dynamique transitoire très sensible à la condition initiale pour $0,15 < t < 3$, sensibilité qui s'atténue pour les temps longs du fait de la lente relaxation de la vitesse vers zéro.

3.3. Dynamiques moyennes et écarts types

La moyenne et l'écart type associés à une variable probabiliste W_{ξ} sont obtenus par une méthode de Monte Carlo. Soit W_k la valeur déterministe du $k^{\text{ième}}$ tirage de la condition initiale, on définit alors la moyenne et l'écart type pour M tirages par

$$\bar{W} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M W_k \quad \text{et} \quad \sigma_w = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M (W_k - \bar{W})^2} \quad (10)$$

La figure 3, représentant $\sqrt{\frac{1}{T} \int_0^T (\Delta T^{\max}(t))^2 dt}$ en fonction du nombre de tirage, permet de mesurer la convergence du processus de Monte Carlo pour l'écart maximal de température $\Delta T^{\max}(t)$ dans la zone fluide. Le processus de Monte Carlo converge grossièrement (<1%) avec relativement peu d'itérations, une vingtaine, mais devient extrêmement coûteux si une précision plus élevée est requise.

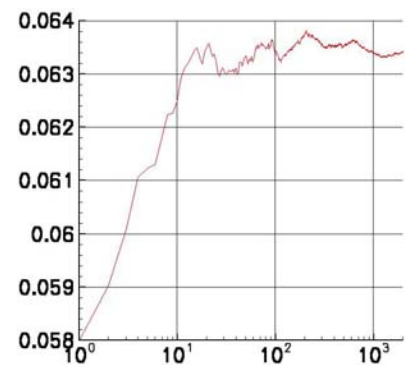


Figure 3 : Convergence Monte Carlo de $\Delta T^{\max}(t)$ en fonction du nombre de tirages pour $\lambda=1$

Les figures 4a, 4b et 4c présentent l'évolution de $\Delta T^{\max}(t)$, dans le cas convectif et diffusif ($Ma=0$, $Ra=0$), pour les longueurs d'autocorrélation $\lambda=1$, $\lambda=10$ et pour un modèle « classique » de perturbations aléatoires pour une loi uniforme, centrée et d'amplitude 0,00025 (même amplitude que pour le modèle de Karhunen-Loeve). Les moyennes et les barres d'incertitude (écarts types) sont issues de 2000 tirages aléatoires.

L'augmentation de λ (Figs 4a,b) se traduit par un déclenchement plus tardif de la convection, à un temps pour lequel l'écart de température entre le fond et la surface libre est plus important. Le sur-refroidissement de l'interface, qui est dû à l'apparition de la convection, est alors plus prononcé pour $\lambda=10$ que pour $\lambda=1$. Passé le transitoire convectif ($0,1 < t < 2$), $\overline{\Delta T^{\max}}(t)$ devient très peu dépendant de la longueur d'autocorrélation. Les incertitudes relatives (rapport entre l'écart type et la moyenne) est toujours inférieure à 9%. Compte tenu des incertitudes relativement importantes, la dynamique semble n'être que finalement très peu dépendante de la valeur de la longueur d'autocorrélation.

Les évolutions pour un modèle de Karhunen-Loeve avec $\lambda=1$ (Fig. 4a) et un modèle « classique » (Fig. 4c) sont quasiment identiques. Ce bon accord se retrouve également lorsqu'on considère les vitesses maximales dans la zone fluide.

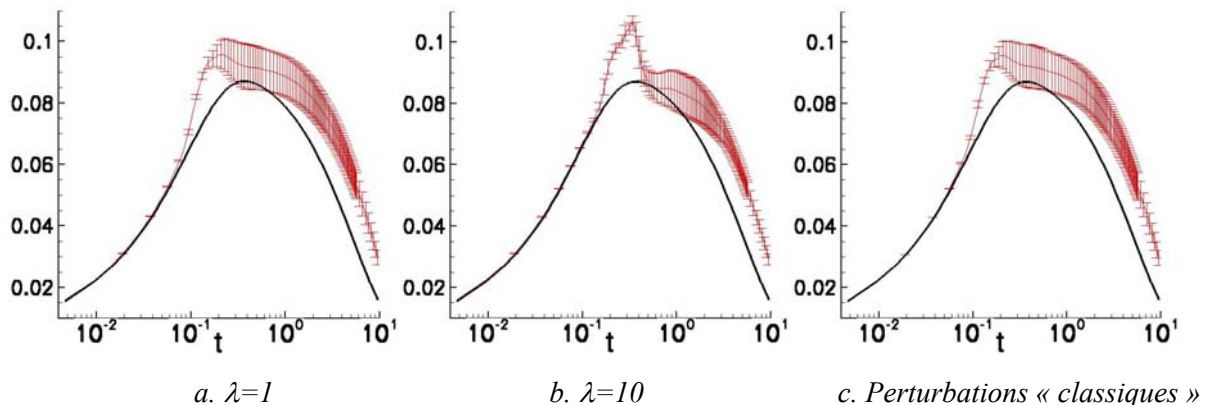


Figure 4 : Evolutions de $\overline{\Delta T^{\max}}(t)$ dans le cas convectif (barres d'erreur) et diffusif

4. Conclusion

L'influence de la condition initiale thermique sur un écoulement de convection naturelle de Bénard-Marangoni en régime transitoire est étudiée pour un modèle probabiliste de Karhunen-Loeve et pour une approche dite « classique ». Malgré une sensibilité de la dynamique moyenne transitoire à la longueur d'autocorrélation du modèle de Karhunen-Loeve, la prise en compte des incertitudes liées aux tirages Monte Carlo montre que les évolutions temporelles ne sont finalement que très légèrement dépendantes de cette longueur d'autocorrélation. Finalement, très peu de différences distinguent l'utilisation du modèle probabiliste « classique » du modèle de Karhunen-Loeve pour une longueur d'autocorrélation unitaire. Ces comparaisons nous conduisent donc à conclure que le modèle « classique », qui engendre des perturbations non physiques, permet de correctement reproduire le comportement moyen et le domaine d'incertitude fourni par le modèle physique plus élaboré de Karhunen-Loeve, du moins pour les valeurs des paramètres adimensionnels étudiés.

Références

- [1] G. Toussaint, H. Bodiguel, F. Doumenc, B. Guerrier, C. Allain, Experimental characterisation of buoyancy- and surface tension-driven convection during the drying of a polymer solution, *Int. J. Heat Mass Transfert*, 51 (2008), 4228-4237.
- [2] O. Touazi, E. Chénier, F. Doumenc, B. Guerrier, Convection naturelle de Rayleigh-Bénard-Marangoni en régime transitoire, Congrès SFT-2008 (Toulouse, 3-6 Juin 2008).
- [3] Y. Rozanov, *Processus aléatoires*, Editions MIR, Moscou (1975).