



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN



MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique Computationnelle

Par :

Mr. Yaichi Abdessamed

Sur le thème

Étude d'un fluide supercritique dans une cavité

Soutenue publiquement le 11/07/2021 devant le jury composé de :

Mr.Brahmi Nabil	MCA à l'Université de Tlemcen	Président
Mr.Ameur Djilali	MCA à l'Université de Tlemcen	Encadreur
Mr.Bentalha Zinelabidin	Professeur à l'Université de Tlemcen	Examineur

*Laboratoire Automatique Tlemcen(LAT)
Tlemcen - Algérie*

Dédicaces

Grâce à mon Dieu « El Kadir » Je dédie ce travail

*A mes très chers parents, pour tous leurs sacrifices, leur amour, et leurs prières *

A mes frères et ma sœur

A Mes oncles et mes tantes

A la famille Yaichi pour leur soutien tout au long de mon parcours universitaire

A tous mes amis

....A toute personne qui m'est chère.

Remerciement

Je tiens à remercier Dieu pour m'avoir donné la volonté, la force d'achever le travail de ce mémoire.

Je tiens prioritairement à remercier très sincèrement monsieur AMEUR DJILALI pour l'encadrement de ce mémoire et de m'avoir guidé, ainsi pour ces précieux conseils à la réalisation de ce travail.

Je tiens également à remercier tous les membres du jury pour leur participation à la présentation de ce travail.

Je remercie particulièrement monsieur BENTALHA ZINELABIDIN pour avoir accepté d'examiner et évaluer ce travail malgré ces préoccupations.

Je remercie monsieur BRAHMI NABIL pour avoir présidé le jury de ce travail.

Enfin, un vif remerciement à tous mes enseignants qui ont contribué à cette formation et à mes collègues au laboratoire de recherche LPT.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE.....	8
CHAPITRE 1 : Introduction aux fluides supercritiques.....	11
1.1 Les fluides supercritiques.....	12
1.2 Le point critique.....	14
1.3 Le point triple.....	15
1.4 Différence entre le point critique et le point triple.....	16
1.5 CO ₂ Supercritique.....	16
1.6 L'eau supercritique.....	18
1.7 Les phénomènes critiques.....	19
1.8 Exposants critiques.....	19
1.9 Les modèles classiques.....	22
1.10 L'influence de la gravité et les anomalies de transport de la chaleur.....	24
1.10.1 Effet de la gravité.....	24
1.10.2 Transfert de chaleur.....	25
1.11 Les écoulements de Poiseuille-Rayleigh-Bénard.....	25
CHAPITRE 2 : Modélisation Mathématique et méthode numérique.....	28
2.1 Introduction.....	29
2.2 Modélisation mathématique.....	29
2.3 Les équations dimensionnelles du problème.....	34
2.4 Équations adimensionnelles.....	35
2.5 Méthodes numérique.....	38
2.5.1 Schéma temporel et approximation spatiale.....	38
2.5.2 Algorithme numérique.....	39
2.5.2.1 Première étape: calcul de $(T, \rho, \nabla \cdot V)$	40
2.5.2.2 Deuxième étape: calcul de (V, P_{dyn})	41
CHAPITRE 3 : Simulations et résultats numériques.....	45
Conclusion et perspectives.....	54
Bibliographies.....	56

TABLES DES FIGURES

Figure 1 : L'état supercritique du dioxyde de carbone CO ₂	10
Figure 1.1 : Surface d'états d'un corps pur.....	13
Figure 1.2 : Diagramme P, T d'un corps pur.....	14
Figure 1.3 : Schéma du cycle d'extraction par CO ₂ supercritique.....	17
Figure 1.4 : Écoulement de Poiseuille purement conducteur : écoulement de base dans les études de stabilité linéaire temporelle.....	26
Figure 1.5 : Représentation schématique de deux types de rouleaux dans l'écoulement de Poiseuille – Rayleigh – Bénard.....	27
Figure 2.1 : Géométrie de canal avec thermique supérieur et inférieur conditions limites.....	30
Figure 3.1 : Problème physique et conditions aux limites.....	47
Figure 3.2 : Champ de température pour le cas du gaz parfait.....	48
Figure 3.3 : Champ de température pour un FSC.....	49
Figure 3.4 : Champ de température pour le fluide parfait à t=31.11.....	50
Figure 3.5 : Champs de vitesse du fluide parfait à t=31.11.....	51
Figure 3.7 : Champ de température pour le cas du gaz supercritique en fonction du temps.....	52
Figure 3.8 : Densité du fluide (a) cas du fluide parfait (b) cas du fluide supercritique.....	53

TABLES DES TABLEAUX

Tableau 1.1 : Coordonnées du point critique de quelques corps.....	15
Tableau 1.2 : Température et pressions critiques de quelques fluides.....	18
Tableau 1.3 : Propriétés au voisinage du (PC) avec les exposants associés.....	21
Tableau 1.4 : Comparaison des exposants critiques classiques et réels.....	24
Tableau 3.1 : Tableau comparatif des propriétés thermodynamiques entre un fluide parfait (FP), un fluide supercritique (FSC) et l'air à 31°C.....	48
Tableau 3.2 : Paramètres de calcul et nombres adimensionnels du problème étudié.....	48

LISTE DES ABREVIATIONS

- a : Paramètre d'énergie dans l'équation de l'état
- ε : La proximité sans dimension du point critique $\varepsilon=(T'_i-T'_c)/T'_c$
- b : Covolume dans l'équation du point d'état
- C'_p : Chaleur spécifique isobare exprimé en $J/(Kg.K)$
- λ' : Conductivité thermique exprimé en $W/(m.K)$
- C'_v : Chaleur spécifique isochorique exprimé en $J/(Kg.K)$
- μ' : Viscosité dynamique exprimé en $(Pa.s)$
- g' : Constante de gravité exprimé en (m/s^2)
- ρ' : Densité exprimé en (kg/m^3)
- H' : Hauteur du canal exprimé en (m)
- χ' : Compressibilité isothermique exprimé en (Pa^{-1})
- L' : Longueur du canal exprimé en (m)
- ω : Facteur acentrique
- P' : Pression exprimé en (Pa)
- Ω : Domaine de calcul
- R' : Constante de gaz parfaite exprimé en $J/(K.g.K)$
- $\partial\Omega$: Limite du domaine de calcul
- t' : Temps (s)
- γ : Rapport de chaleur spécifique
- T : Température (K)
- μ' : Composant de vitesse dans la direction x, exprimé en (m/s)
- v' : Composant de vitesse dans la direction y, exprimé en (m/s)

b : Propriété de fond

x' : Direction de l'axe cartésien, (m)

c : Propriété critique

y' : Direction de l'axe cartésien, (m)

dyn : Partie dynamique

hyd : Partie hydrostatique

α : Fonction Soave dans l'équation de la valeur moyenne de l'état

β' : Coefficient de dilatation thermique exprimé en (K^{-1})

δt : Pas de temps sans dimension

$\delta T'$: Augmentation de la température

Introduction générale

Pour promouvoir une chimie plus soucieuse de l'environnement et de la santé, le concept « *Chimie verte* » est apparu dans les années 1990 [1], et a connu un avancement considérable. Ce concept est basé sur un ensemble de principes [2] qui permettent de réduire les impacts environnementaux et sanitaires des pratiques chimiques. D'une autre façon, ils permettent de réduire l'utilisation ou la production de substances dangereuses dans les phases de conception, fabrication et d'applications des produits chimiques. A partir de ce principe, on définit cinq principaux systèmes réactionnels « verts » tels que : Les fluides supercritiques, les liquides ioniques, l'eau, les réactions sans solvant et les solvants fluorés.

Depuis près d'un siècle, Les fluides supercritiques (FSC) font l'intérêt de plusieurs études dans des domaines variés [3]. Aujourd'hui, les méthodes en FSC en pharmacie visent principalement le domaine de la galénique et permettent le contrôle de la biodisponibilité, de la forme polymorphique de molécules actives. Aussi, grâce à la difficulté d'accès et d'observation et aussi l'intérêt pratique de l'état supercritique, elle est moins étudiée que les trois états liquide, solide ou gaz et même que l'état plasma. D'après plusieurs études, l'état supercritique est de loin l'état le plus mystérieux des cinq états classiques de la matière, à cause de la difficulté d'accès mais il demeure possible de le « voir » à partir d'expériences assez simples pour être mise en place dans un lycée bien équipé.

Les fluides supercritiques ont des propriétés intermédiaires entre celles des liquides et celles des gaz par exemple le CO_2 , l'un des deux fluides les plus utilisés en conditions (SC) le H_2O et le CO_2 . Ce gaz est très abondant naturellement, disponibles à bas prix et à haute pureté, non toxique [4], non inflammable et ne présente aucun danger pour l'environnement (voir Figure 1) [5]. Ce gaz possède aussi des propriétés modifiées dans l'intervalle supercritique qui permettent de lui attribuer un pouvoir de bon solvant par rapport à certains solvants organiques usuels.

Lorsqu'un corps pur est soumis à des conditions de pression et de température supérieures à ses coordonnées critiques (P_C et T_C), le domaine supercritique est atteint.

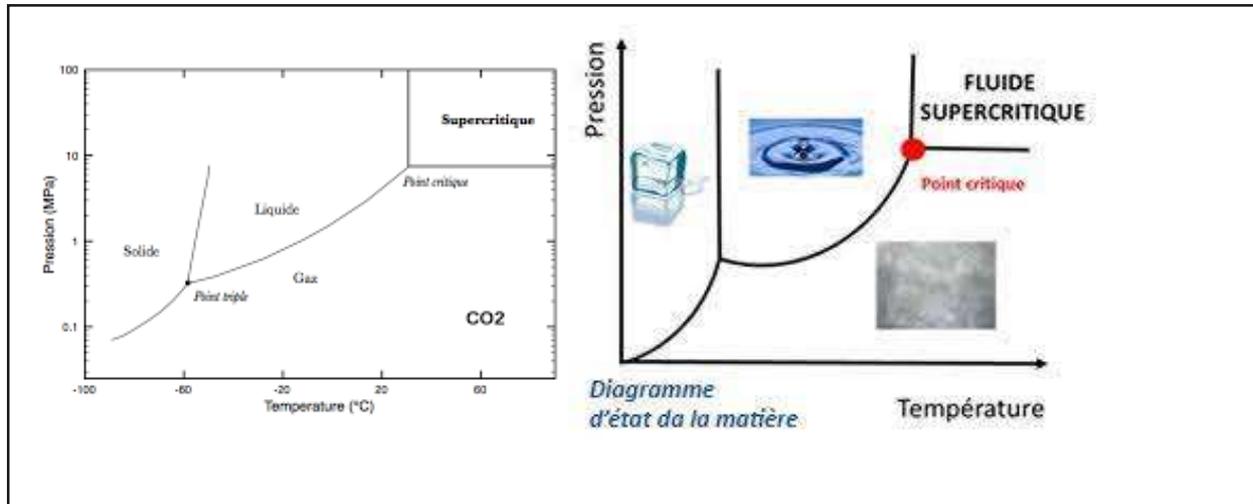


Figure 1 : L'état supercritique du dioxyde de carbone CO_2 [5]

Dans ce travail, nous sommes intéressés à l'étude d'un fluide supercritique dans une cavité ouverte des deux cotés. Ce manuscrit comporte donc les parties suivantes :

- Premièrement, nous nous intéressons à donner une introduction détaillée aux fluides supercritiques. Cette introduction fait l'objet du chapitre 1.
- Dans le premier chapitre, nous donnons des définitions des fluides supercritiques ainsi que les écoulements de Poiseuille-Rayleigh-Bénard. Le but de ce chapitre est d'étudier l'influence des caractéristiques spécifiques de ce type de fluide sur le phénomène d'instabilité de convection thermique, par rapport à celles observées dans des conditions de gaz parfaites.
- Dans le troisième chapitre, nous présenterons le modèle mathématique et la méthode numérique pour le résoudre.
- Nous concluons ce manuscrit par le chapitre quatre contenant une conclusion générale et les perspectives de ce travail.

Chapitre I

Introduction aux fluides supercritiques

Chapitre I Introduction aux fluides supercritiques

L'objectif de ce chapitre est donner une présentation des fluides supercritique, quelques applications dans le domaine industriel et une recherche approfondie sur les structures d'instabilité thermoconverctive des écoulements de Poiseuille-Rayleigh-Bénard.

1.1 Les fluides supercritiques

Dans un corps pur,il existe trois cas : L'état liquide, solide ou gazeux en fonction de trois paramètres thermodynamiques qui sont, la pression, la température et le volume. Le fluide supercritique est un fluide dont le composé pur est sous pression et possédant unménisque habituel séparant le liquide de la phase gazeuse non visuel. C'est une réelle continuité entre ces deux phases. Ce résultat a été découvert depuis 1822 par le Baron Cagniard de la tour [6]. Ce dernier avait observé une augmentation de la quantité de liquide du point de vaporisation jusqu'à des températures nettement plus élevées (362 °C pour l'eau)en chauffant de l'éther, de l'alcool ou de l'eau dans des tubes fermés (volume constant) et dans un espace deux à trois fois plus grand que le volume du liquide et déterminait le point critique de l'éther, de l'alcool et de l'eau.Ces expériences sont encore aujourd'hui considérées comme l'une des bases expérimentales de la théorie des gaz.

Ce n'est qu'avec les travaux d'Andrews [7] et puis la thèse de Van der Waals en 1873 [8] 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'état d'un corps pur en fonction des trois variables thermodynamiques : Pression, volume et température (P, V, T) (voir Figure 1.1).

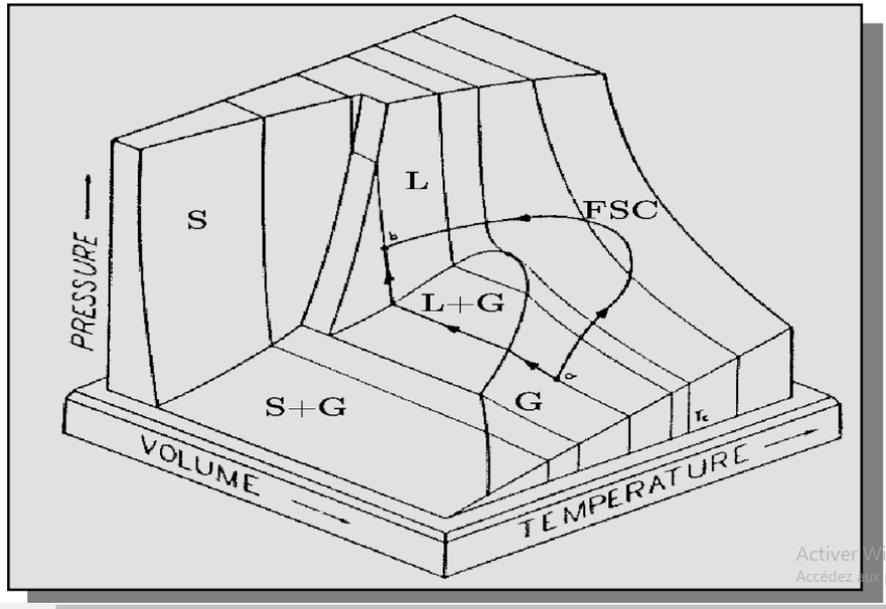


Figure 1.1: Surface d'états d'un corps pur [9]

Avec :

- S : Phase solide,
- G : Phase gazeuse,
- L : Phase liquide,
- FSC : Fluide Supercritique

L'analogie de ce diagramme sur la pression P et la température T (voir Figure 1.2) donne dans un corps pur les trois phases usuelles de la matière : Solide, Liquide et Gazeux, séparées les unes des autres avec trois zones par des courbes de coexistence.

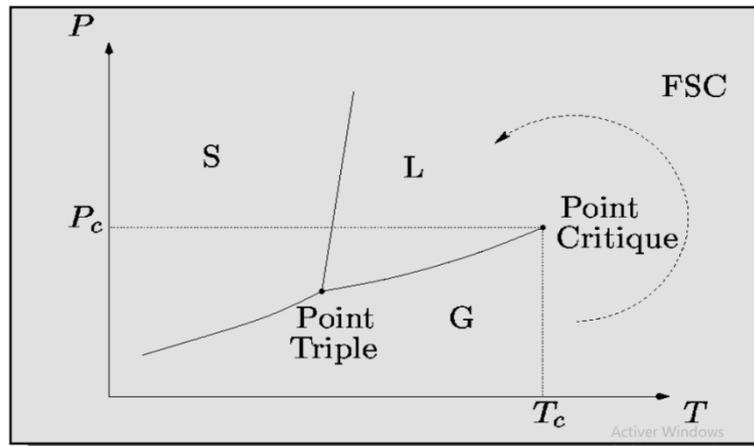


Figure 1.2 : Diagramme P, T d'un corps pur [9]

1.2 Le point critique

Il y a deux phases qui ne sont pas complètement séparées : Liquide et gazeuse, car la courbe de coexistence entre elle se termine au maximum, mais au contraire, on peut passer de l'une à l'autre sans traverser la ligne de transition de phase par la phase intermédiaire appelée la phase supercritique (voir Figure 1.2). Le sommet de la courbe de vaporisation a été nommé par Andrew [8] « *Point Critique* » en raison de son caractère singulier. Ce point est repéré par les coordonnées notées T_c , ρ_c et P_c qui sont respectivement : La température, la densité et la pression critiques de ce corps. Ce point critique est défini comme étant un point où on perd la stabilité mécanique. Nous pouvons interpréter cette instabilité selon la Figure 1.2 par:

- Compressibilité infinie

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T (T_c, P_c) = 0 \quad (1)$$

- Point d'inflexion sur l'isotherme critique

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_T (T_c, P_c) = 0 \quad (2)$$

- Stabilité le long de l'isotherme critique de part et d'autre du point critique

$$\left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3}\right)_T (T_c, P_c) > 0 \quad (3)$$

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	3.316	0.114	41.45

Tableau 1.1 : Coordonnées du point critique de quelques corps [10]

Ce tableau indique que chaque corps chimique possède un point critique, caractérisé par une température critique (T_c), une pression critique (P_c), et une masse volumique critique (ρ_c).

La courbe de coexistence Solide-Liquide est différente de la courbe liquide-vapeur. Elle est infinie. De nombreux auteurs estiment maintenant que les liquides et les solides n'ont pas les mêmes propriétés symétriques, de sorte qu'ils ne le permettent pas d'atteindre le point critique solide-liquide. L'obtention de ce point indique la naissance d'un nouvel état autrement dit la fin de la différenciation entre les deux états.

1.3 Le point triple

Dans le diagramme précédent (voir Figure 1.2), des lignes représentent la zone dans laquelle l'eau est disponible dans les deux états tels que liquide + glace. Le point triple est le point auquel les trois états de la matière peuvent être possibles simultanément. Pour l'eau, il est de 0.006 atm et 0.01 ° C. Grâce à ces conditions, vous verrez l'eau bouillir avec des glaçons. Les glaçons ne fondront pas et l'eau ne s'évaporerait pas complètement si vous êtes dans une pièce fermée : Il y aura trois changements d'états en permanence et de manière

Chapitre I Introduction aux fluides supercritiques

Quelque peu chaotique. Par exemple, lorsque nous escaladons des montagnes, la température d'ébullition de l'eau tombe à 70 degrés Celsius au lieu des 100 degrés Celsius habituellement. En effet, la pression diminue. Si vous abaissez d'avantage la pression, il arrivera un point où la température d'ébullition sera inférieure à la température de l'eau solidifiée, il y aura donc un phénomène dans lequel l'eau gèle et bout en même temps, qui est ce triple point.

Généralement, le point triple est atteint à des pressions et températures assez basses. Si la pression est inférieure, la phase liquide disparaît complètement et seuls la vapeur et le solide coexistent.

1.4 Différence entre le point critique et le point triple

En raison de la pression et de la température, la phase de cette substance est déterminée. Par conséquent, la phase d'une substance particulière peut être modifiée en modifiant la température ou la pression, ou les deux. Le point critique et le point triple d'une substance sont deux combinaisons importantes de température et de pression. Et à partir de là, le point critique du matériau est le point final de la courbe d'équilibre de phase, et le point triple n'est autre que le point de rencontre des trois courbes équilibrées.

Pour le point critique d'une substance, les deux phases gazeuse et liquide peuvent être en équilibre, mais au point triple de la substance, les trois phases de la substance peuvent l'être. C'est donc la principale différence entre le point critique et le point triple.

1.5 CO₂ Supercritique

La plupart des procédés utilisant un fluide supercritique sont basés sur la grande variation de son pouvoir solvant en fonction de la température et/ ou de la pression. Ainsi, le CO₂ est considéré comme un bon solvant pour de nombreuses molécules non polaires ou faiblement polaires dans les conditions supercritiques, mais il possède un très faible pouvoir

Chapitre I Introduction aux fluides supercritiques

solvant à l'état gazeux. De plus, il présente une haute sélectivité en fonction de la nature chimique des composés à extraire : Il est donc possible d'extraire un composé spécifique d'un mélange par exemple lors du fractionnement des lipides, des arômes de boissons alcoolisées, polymères, etc... Il est à noter qu'un extrait pur est ainsi récupéré en fin de traitement sans avoir besoin d'une étape d'élimination des solvants, contrairement à des procédés utilisant des solvants traditionnels.

Cependant, comme le CO_2 est un solvant de faible polarité, nous devons alors ajouter un co-solvant polaire tel que l'éthanol qui est le plus utilisé afin d'augmenter le spectre de molécules extraites. Enfin, il convient de noter que, comme le montre le schéma de principe ci-dessous (figure 1.3), le CO_2 est facilement recyclé par condensation et pompage à haute pression. Ces propriétés sont également utilisées dans la mise en forme et la synthèse de particules permettant des opérations selon plusieurs types de processus.

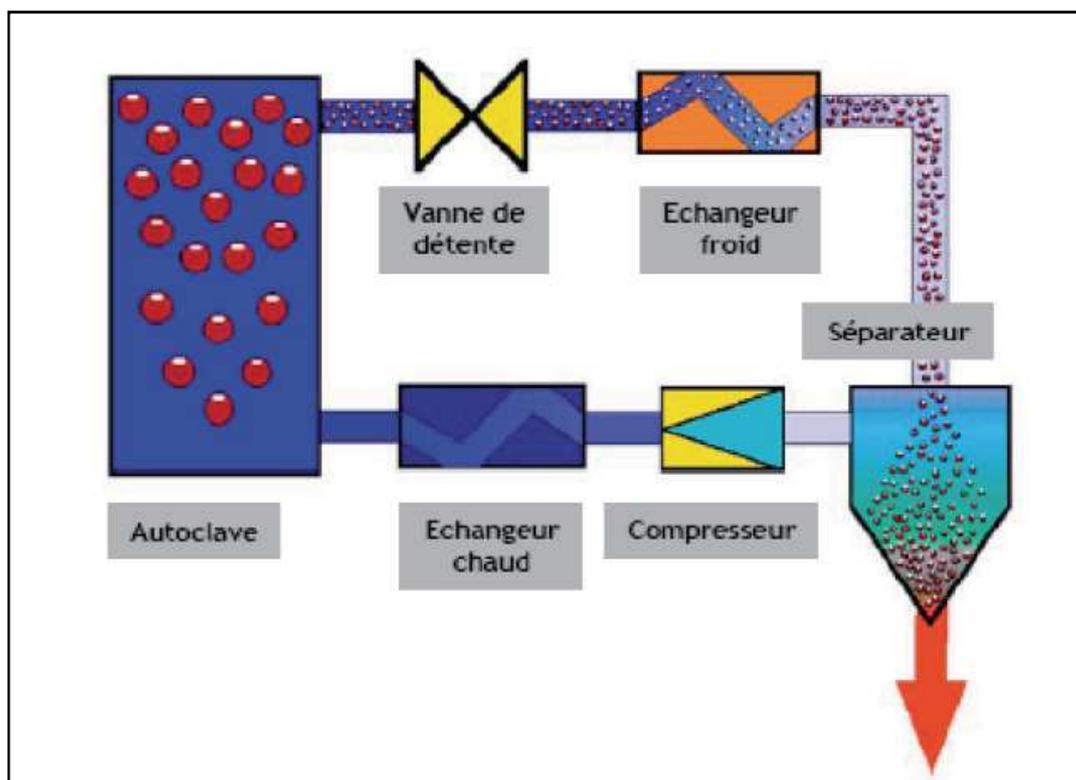


Figure 1.3 : Schéma du cycle d'extraction par CO_2 supercritique [11]

1.6 L'eau supercritique

Au-delà du point critique (374 ° C et 221 bar), l'eau voit ses propriétés thermodynamiques profondément modifiées. Les composés organiques y sont solubles, tandis que les sels inorganiques se ruent. Les composés gazeux, et en particulier l'oxygène, sont également solubles dans de grandes proportions dans ce milieu. L'eau supercritique est donc un milieu dans lequel la matière organique et l'oxydant peuvent être mis en contact intime, rendant les réactions d'oxydation hydrothermales extrêmement rapide, notamment pour le traitement des déchets organiques « réfractaires ».

L'eau supercritique est également utilisée comme support pour le développement de matériaux innovants par synthèse hydrothermale.

Outre l'eau et le CO₂, des composés tels que l'éthane et le propane sont également utilisés dans leur phase supercritique pour certaines applications (extraction, réactions chimiques, etc.)

Fluide	Température critique(c°)	Pression critique(bar)
Dioxyde de carbone(CO ₂)	31.1	73.8
Eau (H ₂ O)	374	220
R134a (C ₂ H ₂ F ₄)	101	101.6
Éthane (C ₂ H ₆)	32.2	48.8
Propane (C ₃ H ₈)	96.6	42.5
Éthylène (C ₂ H ₄)	9.5	50.76
Propylène (C ₃ H ₆)	91	46.1

Tableau 1.2 : Températures et pressions critiques de quelques fluides[11]

Chapitre I Introduction aux fluides supercritiques

Le tableau suivant représente la température critique d'une substance est la température à laquelle et au-dessus de laquelle la vapeur de la substance ne peut pas être liquéfiée, quelle que soit la pression appliquée. Chaque substance a sa propre température critique.

1.7 Les phénomènes critiques

Comme nous venons de le voir, un fluide proche de son point critique a une compressibilité isotherme qui tend vers l'infini. D'autres propriétés ont également le comportement singulier.

Parmi ces grandeurs, on cite :

- La capacité calorifique à pression constante C_p ,
- La capacité calorifique à volume constant C_v ,
- La conductivité thermique l ,
- La longueur de corrélation z qui mesure l'étendue spatiale des fluctuations densité,
- La diffusivité thermique k tend vers zéro,
- La vitesse du son C tend vers zéro.
- La tension superficielle dans le domaine diphasique tend également vers zéro, ce qui peut être se traduire par la grande similitude des phases liquide et gazeuse 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 appelés phénomènes critiques : Ils constituent les différents mécanismes par lesquels le fluide supercritique prépare la transition de phase à l'approche du point critique.

1.8 Exposants critiques

Les phénomènes critiques reposent largement sur la notion d'exposants critiques et lois des échelles. Nous caractérisons la divergence des paramètres de transport en donnant cinq informations:

Chapitre I Introduction aux fluides supercritiques

- Le paramètre considéré (X), un chemin particulier sur la surface état pour s'approcher du point critique (C),
- Une variable caractérisant la proximité du point critique (r),
- Une amplitude appelée amplitude critique (A),
- Un exposant de divergence critique.

La singularité en question est alors exprimée, pour une valeur finie de X_c (l'indice c indique une valeur prise au point critique), sous la forme de la loi asymptotique suivante:

$$\left| \frac{X-X_c}{X_c} \right| = A \left| \frac{r-r_c}{r_c} \right| = \pm e \quad (4)$$

La vitesse de convergence ou de divergence dépend de la façon dont on aborde le point critique, il est donc très important d'avoir une précision sur le chemin C . Des études expérimentales ont conduit à une caractérisation empirique assez précise des amplitudes critiques et exposants pour les différents paramètres qui divergent au point critique et pour les différents chemins qui l'abordent. C'est la différence entre la valeur des exposants trouvés expérimentalement et ceux prédits par l'analyse dimensionnelle qui a conduit les physiciens dès les années 1930 à se rendre compte que quelque chose fondamentale était caché derrière cette divergence. Ce n'est que dans les années 1970 avec l'application de phénomènes critiques de la théorie des groupes de Renormalisation [11] (une théorie développée en 1957 par K.G. Wilson), qu'un argument théorique a pu établir la valeur. On a ainsi montré que tous les fluides avaient les mêmes exposants au point critique liquide-vapeur et en particulier que seuls deux de ces exposants étaient indépendants et que la vitesse de n'importe quel paramètre sur n'importe quel chemin peut être déduit de ces deux derniers uniquement. De plus, il a été prouvé que les données de deux amplitudes spécifiques au fluide suffisaient pour caractériser pleinement son comportement critique. Cette réduction de la spécificité du fluide à seulement deux amplitudes

Chapitre I Introduction aux fluides supercritiques

critiques est appelée *universalité critique*, cette universalité du comportement s'étend même au-delà des systèmes fluides. La théorie des groupes de renormalisation prédit que les comportements du système au voisinage du point critique sont identiques pour la même classe d'universalité, c'est-à-dire que l'on peut regrouper les différents systèmes physiques représentant les transitions de la phase la plus variée dans un petit nombre de groupes appelé la *classe d'universalité*, caractérisé par un certain ensemble de valeurs d'exposant. Nous définissons les lois de l'échelle en tant que relations entre exposants critiques. Cette loi a un caractère universalité encore plus grande. Les valeurs actuellement acceptées des exposants critiques universels sont présentées dans le Tableau 1.3. La divergence critique d'une propriété est définie selon un chemin thermodynamique spécifiée. Si une quantité diverge pour un chemin donné, elle garde le critère de divergence pour tout autre chemin, ainsi la correspondance entre un exposant d'une divergence le long de l'isochore critique et l'exposant de la même divergence sur le long d'un autre chemin isotherme critique ou courbe de coexistence, peut être facilement déterminé [11]. En revanche, lorsque le chemin est plus complexe, il faut connaître une équation d'état qui représente l'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	$K_T = \Gamma \mathcal{E} ^{-\gamma}$	$\gamma = 1.239 \pm 0.002$
Capacité calorifique à volume constant	Isochore critique	$C_v = A \mathcal{E} ^{-\alpha}$	$A = 0.110 \pm 0.003$
Écart de densité du liquide et du gaz	Courbe de coexistence	$\rho_l - \rho_g = 2B \mathcal{E} ^{\beta}$	$\beta = 0.320 \pm 0.002$
Fonction de corrélation	Point critique	$h(r) = r^{2-d-\eta}$	$\eta = 0.031 \pm 0.004$
Longueur de corrélation	Isochore critique	$\xi = \xi_0 \mathcal{E} ^{-\nu}$	$\nu = 0.630 \pm 0.001$
Écart à la pression critique	Isotherme critique	$ \Delta P = D \Delta \rho ^{\delta}$	$\delta = 4.8 \pm 0.02$

Tableau 1.3 : Propriétés au voisinage du point critique [11]

1.9 Les modèles classiques

Le modèle de Van der Waals basé sur une équation d'état bien connue [8], est le premier modèle qui a permis une description qualitative de l'équilibre de phase liquide-gaz et le comportement des fluides à proximité du point critique. Cela s'avère être un bon outil pour l'interprétation des écarts critiques. Il s'agit d'un cas particulier d'une classe de modèles plus grands appelés modèles classiques ou modèles à 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 [12].

Leur le nom « *Champ Moyen* » provient de la propriété commune de ces modèles et est basée sur le fait que les interactions moléculaires agissent sur une molécule donnée uniquement sous la forme d'un champ moyen, indépendant de la position de la molécule vis-à-vis de ses voisins. Cette propriété ne permet pas de prendre en compte la distribution spatiale des molécules dans l'analyse des interactions moléculaires. Cette simplification excessive peut expliquer l'échec de ces modèles.

On considère à présent une équation d'état d'un fluide, écrite sous la forme générale :

$$P = f(T, \rho)$$

Comme nous venons de le préciser, l'hypothèse de champ moyen est associée au caractère analyse de la fonction f au point critique:

$$P = P_c + \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_P^c \delta T + \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_T^c \delta \rho + \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_P^c \delta T^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T \partial \rho}\right)^c \delta T \delta \rho + \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_T^c \delta \rho^2 \right\} \\ + \frac{1}{6} \left\{ \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^3}\right)_P^c \delta T^3 + 3 \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^2 \partial \rho}\right)^c \delta T^2 \delta \rho + 3 \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T \partial \rho^2}\right)_T^c \delta \rho^2 + \left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3}\right)_T^c \delta \rho^3 \right\} + \dots (5)$$

Chapitre I Introduction aux fluides supercritiques

L'indice supérieur c indique les quantités prélevées au point critique. Si l'on se base sur les conditions critiques [équations (1) - (2) - (3)] le développement au-dessus de la pression P devient:

$$P = P_c + \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_P^c \delta T + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_P^c \delta T^2 + \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T \partial \rho}\right)^c \delta T \delta \rho + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^3}\right)_P^c \delta T^3 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^2 \partial \rho}\right)^c \delta T^2 \delta \rho + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T \partial \rho^2}\right)_T^c \delta T \delta \rho^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3}\right)_T^c \delta \rho^3 + \dots \quad (6)$$

Par exemple, pour déterminer l'écart par rapport 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 on obtient:

$$\delta P = \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3}\right)_T^c \delta \rho^3 + \dots, \text{ d'où l'exposant classique } \delta = 3 \quad (7)$$

Notez que cette valeur trouvée de δ est d'une part indépendante du nature particulière de la fonction $P = f(T, \rho)$ donc de l'équation d'état, et d'autre part, elle est loin de la valeur expérimentale $\delta = 4,80$ (voir Tableau 1.3). De la même manière, nous pouvons déterminer l'exposant γ de divergence de la compressibilité isotherme $(\chi = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T)$ le long de l'isochore critique, si l'on dérive l'équation (5) membre à membre par rapport à ρ en imposant $\delta P = 0$.

$$\text{On a alors: } \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T \partial \rho}\right)^c \delta T + \dots \implies \gamma = 1 \quad (8)$$

De la même manière, nous pouvons généraliser et déterminer les autres exposants critiques. Nous présentons dans le Tableau 1.4, la différence entre les exposants réels et les exposants prédits par des modèles classiques. Cette différence a été reconnue très tôt comme un échec de théories classiques pour décrire correctement les phénomènes critiques. L'exposant classique n ne peut être déduit de considérations purement thermodynamiques comme celles discuté ci-dessus, mais provient d'une analyse de physique statistique.

Exposant Classiques	Exposant Réels
$\gamma=1$	$\gamma=1.239\pm 0.002$
$\alpha=0$	$\alpha=0.110\pm 0.003$
$\beta=1/2$	$\beta=0.326\pm 0.002$
$\delta=3$	$\delta=4.8\pm 0.02$
$\nu=1/2$	$\nu=0.630\pm 0.01$

Tableau 1.4 : Comparaison des exposants critiques classiques et réels [11]

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

1.10.1 Effet de la gravité

Comme nous venons de le voir dans les paragraphes précédents, les fluides supercritiques ont un comportement étrange car ils sont à la fois assez dense que les liquides et compressible comme le gaz. La combinaison de ces deux propriétés est à l'origine de nombreux problèmes liés à la gravité. Un fluide compressible se stratifie sous l'effet de la gravité en couches de différentes densités telles que l'atmosphère et les océans à grande échelle.

En présence de gravité, Zappoli et al. [13] ont montré que dans une configuration à chauffage latéral, cet effet était toujours responsable sur le terrain 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 température, sous l'effet de la gravité. Les mécanismes de transport de masse et la chaleur à grande échelle (échelle de la cellule, par exemple) sont effectués via les instabilités convectives, masquant ainsi d'autres mécanismes de transport possibles. La gravité joue donc un rôle clé 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 par instabilités convectives n'a plus lieu, il faut alors s'attendre

à de graves difficultés d'homogénéisation des systèmes critiques car les effets de diffusion thermique sont presque inexistantes.

1.10.2 Transfert de chaleur

La divergence de conductivité thermique nous amène à penser 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 température dépend de la diffusivité thermique $\lambda / \rho C_p$ qui tend vers zéro au point critique liquide-vapeur.

Vu que le temps de relaxation τ tend vers l'infini, on s'attend donc à ce que le transport de chaleur se fait très lentement. Ce phénomène est appelé ralentissement «*Critical Slowing Down*», poussé vers le développement d'expériences spatiales visant à mesurer certains paramètres avec une plus grande précision en l'absence d'effet de gravité visant à supprimer tout effet dû à la convection.

Les résultats expérimentaux ([14], [15]) 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.

1.11 Les écoulements de Poiseuille-Rayleigh-Bénard

Les écoulements de Poiseuille-Rayleigh-Bénard (PRB) sont des écoulements laminaires de convection mixte en conduit de section rectangulaire horizontal chauffé uniformément par le bas et uniformément refroidi par le haut.

Ils résultent de superposition de deux sources convectives :

- Un gradient de pression horizontal entraînant le fluide dans la canalisation (moteur de convection forcée).

- Un gradient la température verticale (moteur de convection naturelle) est à l'origine de la formation des structures thermo-convectives.

Le flux de PRB a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche compte tenu de son importance dans de nombreuses applications industriels, tels que les dépôts chimiques de vapeur (CVD) pour lesquels un gaz inerte chargé de réactifs est injecté entre des substrats chauffés sur lesquels est déposée puis une couche mince par pyrolyse. Les phénomènes d'instabilité thermo-convective qui peuvent se développer dans le flux gazeux influencent directement l'épaisseur de la couche de dépôt. Un autre domaine d'application du flux PRB est l'électronique. Des explications et analyses plus complètes de ces applications sont données par [16].

La configuration PRB est riche en types de structures thermo-convectives susceptibles de se présenter sous la forme de rouleaux longitudinaux, transversaux, sinueux, variqueux, etc... Lorsque le nombre de Rayleigh (Ra) est inférieur à une valeur critique Ra^* , on a alors affaire à un écoulement de Poiseuille (Figure 1.4) c'est-à-dire :

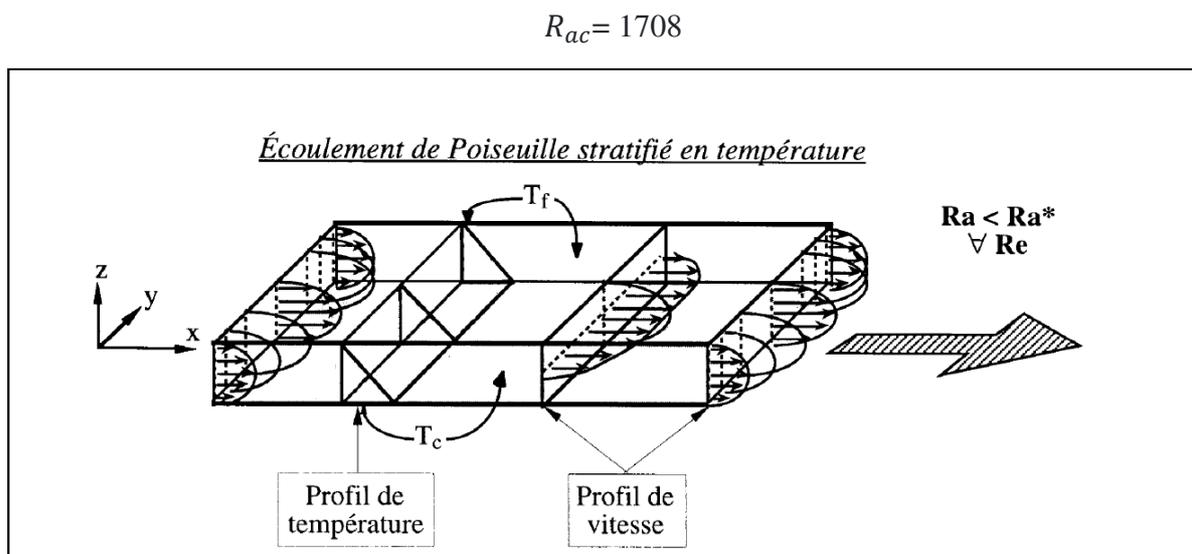


Figure 1.4 : Écoulement de Poiseuille purement conductif : Écoulement de base dans les études de stabilité linéaire temporelle [16]

Chapitre I Introduction aux fluides supercritiques

Au-delà de cette valeur, le flux de base devient instable et deux types de structures thermoconvectives peuvent apparaître :

- Des rouleaux transversaux avec des axes perpendiculaires à l'axe du tuyau, qui apparaissent pour faibles nombres de Reynolds et
- des rouleaux longitudinaux avec des axes parallèles à l'axe du tuyau, qui apparaissent pour les nombres de Reynolds relativement élevé.

Une représentation schématique de ces deux types de rouleaux est illustrée dans la Figure 1.5.

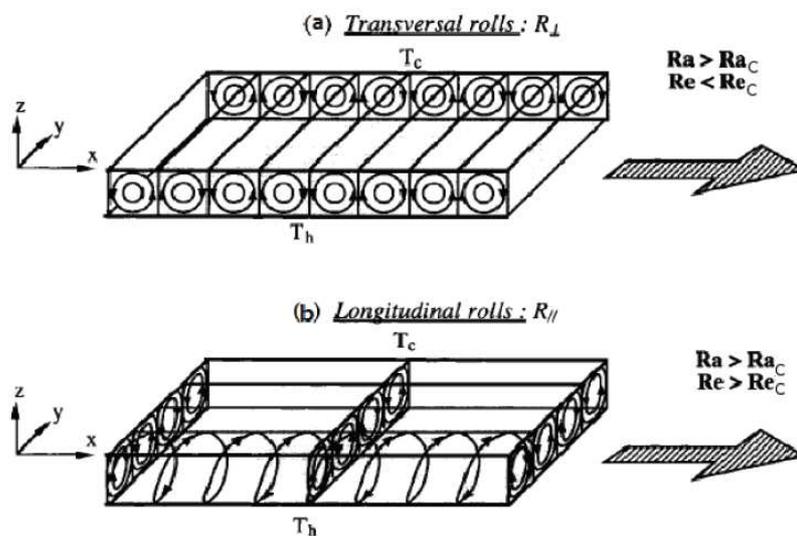


Figure 1.5 : Représentation schématique de deux types de rouleaux dans l'écoulement de Poiseuille – Rayleigh - Bénard : (a) Rouleaux transversaux ; (b) Rouleaux longitudinaux [16]

Chapitre II

Modélisation mathématique et méthode numérique

2.1 Introduction

Pour atteindre l'objectif souhaité dans ce mémoire, il est nécessaire de définir un modèle physique bien adapté pour établir une procédure numérique efficace, qui permettra de simuler tous les phénomènes mis en jeu. Dans ce chapitre, nous avons introduit les formules mathématiques ainsi que la méthode numérique employée. Le comportement d'un fluide est modélisé par les équations de Navier-Stokes, et l'équation de l'énergie ainsi que les conditions aux limites appropriées. La méthode numérique de la résolution utilisée est décrite ci-dessous en détail. Le code numérique est celui développé sur des étapes à fur et à mesure selon les problèmes étudiés par Isabelle Raspo [18] puis par Djilali Ameer et enfin par Joanna Dib [35].

2.2 Modélisation mathématique

Le modèle physique est constitué d'un canal 2D de hauteur $H = 1$ mm, avec un rapport hauteur / largeur $L = H = 10$. Le fluide transporté correspond au CO_2 supercritique soumis à la gravité. Initialement, le fluide est à une température uniforme légèrement plus élevée à la température critique, $T_i = (1 + \varepsilon) T_c$ (avec $\varepsilon \ll 1$), et à une densité moyenne égale à la densité critique ρ_c . De plus, le fluide traverse la cavité ouverte selon un profil de Hagen-Poiseuille. Ensuite, la température de la paroi inférieure est progressivement augmenté à $T_{ch} = T_i + \delta T$ à une distance H de l'entrée (Figure 2.1).

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 :

$$G_1 = \frac{h}{L} \quad \text{et} \quad G_2 = \frac{H}{L}$$

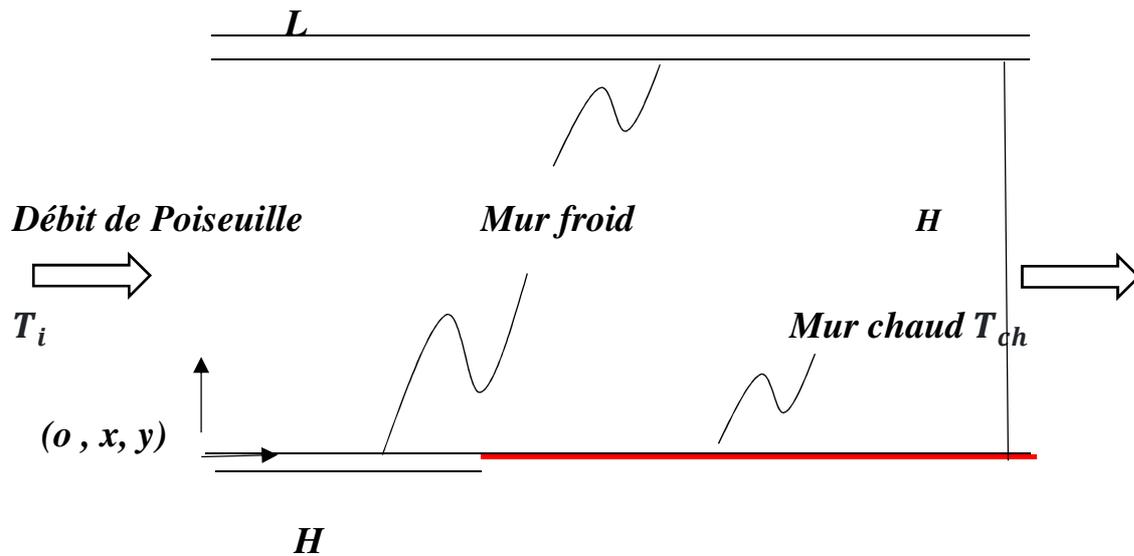


Figure 2.1 : Géométrie de canal avec des conditions aux limites thermiques supérieures et inférieures

Le fluide supercritique est modélisé par l'équation d'état de Peng-Robinson. Cette équation explique implicitement la divergence du coefficient de dilatation thermique β , la compressibilité isotherme χ et la chaleur spécifique à pression constante C'_p près du point critique du gaz-liquide.

La divergence de la conductivité thermique λ' est modélisée par la formule ci-dessous :

$$\lambda_b = \lambda_b [1 + \Lambda (T/T_c - 1)^{-0.5}]$$

Les paramètres physiques suivants de CO_2 ont été utilisés:

- $T_c = 304.13 \text{ K}$,
- $\rho_c = 467.8 \text{ Kg m}^{-3}$,

- $\lambda_b = 0.04412 W m^{-1} K^{-1}$,
- $\Lambda = 0.75$.

L'évolution du flux est régie par les équations instationnaires de Navier-Stokes en 2D couplées à l'équation d'énergie et les équations de Peng-Robinson. Ces équations sont résolues sous l'approximation du faible nombre de Mach [17] : La pression P est ainsi composée:

- d'une partie thermodynamique P_i constante dans l'espace et qui apparaît dans l'équation énergétique et dans l'équation d'état
- et d'une partie dynamique, P_{dyn} impliquée dans l'équation de la dynamique.

Cependant, l'approximation de base employée dans [17] est modifiée comme proposée dans [18] pour prendre en compte la stratification des fluides près du point critique de Ma^2 / Fr , où Ma et Fr sont respectivement les nombres Mach et Froud.

Nous avons choisi comme variables caractéristiques :

- T pour la température
- ρ_c pour la densité
- $\rho_c R T_c$ pour la pression avec $R = 188,92 J K g^{-1} K^{-1}$ la constante des gaz parfaits
- H pour longueur
- $U_{réf} = \sqrt{\beta' g' \delta T' H'}$ pour la vitesse avec g la gravité de la Terre
- $H/U_{réf}$ pour le temps
- λ_b pour la conductivité thermique
- La chaleur spécifique à volume constant C_v et la dynamique les viscosités μ ont été fixées à leurs valeurs de fond, contre $V_b = 472.313 J K g^{-1} K^{-1}$ et $\mu_b = 3.2702 \times 10^{-5} Pa s$

Les autres nombres sans dimension introduits sont le nombre Prandtl Pr , le nombre de Rayleigh Ra , le nombre de Mach Ma et le nombre de Froud Fr qui sont définis respectivement par :

$$\bullet \quad Pr = \frac{c_p' U_p'}{\lambda_p'} \quad (15)$$

$$\bullet \quad Ra = \frac{\beta' g' \rho_p'^2 H'^3 \delta T' c_p'}{\lambda_p' \mu_p'} \quad (16)$$

$$\bullet \quad Ma = \frac{U_{ref}'}{\sqrt{\gamma_0 R' T_c'}} \quad (17)$$

$$\bullet \quad Fr = \frac{U_{ref}'^2}{g' H'} \quad (18)$$

Dans la formule ci-dessus, les paramètres physiques β' et C_p' sont calculés pour l'état initial (T_i , ρ_i') de l'équation d'état.

La condition initiale dans $\Omega = [0, L/ H] \times [0,1]$ est :

$$\mu_i(x, y) = 1.5 Re \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} [1 - (2y - 1)^2] \quad (19)$$

Avec

$$\mu_i(x, y) = 0$$

Où Re est le nombre de Reynolds défini par

$$Re = \rho_i' U_{mean}' H' / \mu_b'$$

Avec U_{mean}' est la vitesse moyenne à l'entrée.

$$T_i(x, y) = 1 + \varepsilon \quad (20)$$

Et, comme cela a été proposé dans [18], la stratification du fluide est prise en compte conduisant à la condition initiale de masse volumique et de pression :

$$\rho_i(x, y) = K_2 \frac{e^{-K_2 y}}{1 - e^{-K_2}} \quad (21)$$

$$P_i(x, y) = P_{th} + P_{hyd}(y) \quad (22)$$

Avec :

$$K_1 = \frac{1 + \varepsilon}{(1 - b)^2} - \frac{2a(1 + b)\alpha(T_i)}{(1 + 2b - b^2)}$$

$$K_2 = \gamma_0 \frac{Ma^2}{FrK_1}$$

$$P_{th} = \frac{1 + \varepsilon}{1 - b} - \frac{a\alpha(T_i)}{1 + 2b - b^2}$$

$$P_{hyd}(y) = K_1 \left[K_2 \frac{e^{-K_2 y}}{1 - e^{-K_2}} - 1 \right]$$

Sur les parois du canal, la condition d'adhérence à la paroi est prescrite pour la vitesse. La paroi supérieure ($y = 1$) est conservée à la température initiale T_i . La paroi inférieure ($y = 0$) est chauffée suivant l'équation (23). Afin d'éviter une discontinuité du profil de la température, la condition aux limites suivante est imposée pour $0 \leq x \leq L / H$:

$$T(x, 0, t) = T_i + \delta T [th(2x - 2) - th(-2)] / [th(18) - th(-2)] \quad (23)$$

Cette condition aux limites permet une transition continue entre la zone d'entrée froide pour $0 \leq x \leq 1$ et la zone chaude pour $1 \leq x \leq L = H$. A l'entrée du canal ($x = 0$), la température est maintenue à sa valeur initiale T_i et un profil parabolique est imposé à la vitesse.

$$T(0, y, t) = T_i = 1 + \varepsilon$$

$$\mu(0, y, t) = 1.5 \text{Re} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} [1 - (2y - 1)^2] \quad (24)$$

A la sortie du canal ($x = L / H$), la condition aux limites de type Orlandi est prescrite pour toutes les variables,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{Re} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad \text{avec } \phi = T, \mu, \mathbf{v} \quad (25)$$

2.3 Les équations dimensionnelles du problème

Le fluide est considéré comme compressible et obéit à une équation d'état, à savoir qu'il est à la fois visqueux, newtonien et conducteur de chaleur. Les équations décrivant l'évolution bidimensionnelle de la configuration donnée dans le paragraphe précédent sont:

❖ **Équation de continuité**

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t'} + \nabla \cdot \rho' \bar{V}' = 0 \quad (26)$$

❖ **Équation de conservation de quantité de mouvement**

$$\rho' \frac{D\bar{V}'}{Dt'} = \rho' \bar{g}' - \nabla P' + \mu' \nabla^2 \bar{V}' \quad (27)$$

❖ **Équation de conservation d'énergie**

$$\rho' c'_p \frac{DT'}{Dt'} = \nabla \cdot k' \nabla T' + \beta' T' \frac{DP'}{Dt'} + \mu' \phi \quad (28)$$

L'Opérateur ∇ est un vecteur est défini comme suit :

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} i + \frac{\partial}{\partial y} j$$

Et :

$$\frac{D}{Dt} = \mu \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial t}$$

ϕ est la fonction de la dissipation définie en deux dimensions comme suit :

$$\phi = 2 \left[\left(\frac{\partial \mu}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial \mu}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 - \frac{2}{3} \frac{\partial \mu}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}$$

❖ Équation d'état

$$\rho' = \rho'_2 + \rho'_c \chi'_{T'_2} (P' - P'_2) - \rho'_c \beta'_{P'_2} (T' - T'_2) \quad (29)$$

Avec

- ρ' est la densité du fluide
- T' le champ de température
- P' la pression

2.4 Équations adimensionnelles

Dans ce paragraphe, nous développerons les équations sans dimension dont les paramètres caractéristiques étaient basés sur des études antérieures [19, 20] en tenant compte du filtrage acoustique. Les champs sans dimension sont écrits comme suit (le choix du temps dépendra du problème étudié) :

$$\rho = \frac{\rho'}{\rho'_c} \quad (30)$$

$$P = \frac{P'}{T'_c R'_0 \rho'_c} \quad (31)$$

$$T = \frac{T'}{T'_c} \quad (32)$$

$$X = \frac{X'}{L'} \beta_{P2} = \beta'_{P2} T'_c \quad (33)$$

$$\chi_{T2} = \chi'_{T2} (T'_c R'_0 \rho'_c) \quad (34)$$

$$\bar{V} = \frac{\bar{V}'}{C'_0} \quad (35)$$

Les quantités indicées « 0 » sont prises pour le cas de gaz parfait :

- $C'_0 = \sqrt{\gamma R' T'}$ est la vitesse du son prise à la température T'_c .
- $\gamma_0 = \frac{C'_{p0}}{C'_{v0}}$ est le rapport des chaleurs spécifiques
- R'_0 est la constante des gaz parfaits.

L'échelle de temps d'effet piston [20] peut également être considérée comme le temps caractéristique, bien qu'il n'ait pas été utilisé dans ce travail. L'ordre de grandeur de cette échelle de temps de l'effet piston a été calculé par une analyse asymptotique par [21] :

$$t'_{ref} = \frac{\varepsilon_T^{3/2}}{Pr_0} t'_{d0} \quad (36)$$

Avec :

- $t'_{d0} = \frac{L'^2}{K'_0}$ le temps de diffusion de la chaleur
- $Pr_0 = \frac{v'_0}{K'_0}$ le nombre de Prandtl.

Afin de développer les équations filtrées sans dimension avec un faible nombre de Mach lié à la propriété du fluide, il est indispensable de procéder à une structure temporelle multi-échelles, c'est-à-dire que la vitesse et le temps caractéristiques ne sont pas explicitement liés :

$$V'_{ref} = C'_0$$

Et

$$t'^{vis}_{ref} = \frac{L'^2}{V'_0}$$

Les équations sans dimension s'écrivent alors:

❖ Équation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{M} \nabla (\rho \bar{V}) = 0 \quad (37)$$

❖ Équation de la quantité de mouvement

$$\rho \left[\frac{\partial \bar{V}}{\partial t} + \frac{1}{M} (\bar{V} \cdot \nabla) \bar{V} \right] = - \frac{\gamma_0^{-1}}{M} \nabla P + \left[\Delta \bar{V} + \frac{1}{3} \nabla (\nabla \cdot \bar{V}) \right] - \frac{M}{Fr} \rho \bar{J} \quad (38)$$

❖ Équation d'énergie

$$\rho \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{M} \bar{V} \Delta T \right) = \frac{\beta_{p2}}{\gamma_0} T \frac{dP}{dt} + \frac{1}{\rho_r} + Ec \phi \quad (39)$$

❖ Équation d'état

$$\rho = \rho_2 + \chi_{T2} (P - P_2) - \beta_{P2} (T - T_2) \quad (40)$$

Avec les nombres sans dimension caractéristiques suivants :

- $Fr = \frac{(v'_0/L')^2}{L'g'}$ (Nombre de Froude)
- $Pr = \frac{v'_0}{k'_0}$ (Nombre de Prandlt)

- $Ma = \frac{v_0'}{c_0'}$ (Nombre de Mach)
- $Ec = \frac{c_0'^2}{T_c' c_p'}$ (Nombre d'Eckert)

Le système d'équations (37-40) contient 6 nombres sans dimension (F_r , P_r , M , Ec , χ_{T2} et β_{P2}). 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 à point critique). Il convient de noter que la mise à l'échelle ci-dessus est juste pour nous établir les équations dans l'approximation des nombres de Mach faibles.

Remarque:

Pour une proximité de point critique donnée, ces nombres sont constants. Ce ne sont pas des paramètres de contrôle. Nous utilisons simplement le zoom pour calculer l'équation avec une méthode d'approximation à faible nombre de Mach.

2.5 Méthodes numériques

2.5.1 Schéma temporel et approximation spatiale

Les équations (15)- (18) sont discrétisées en temps avec un schéma semi-implicite du second ordre : Les termes convectifs sont évalués par un schéma d'Adams-Bashforth, un schéma d'Euler vers l'arrière du second ordre est utilisé pour la discrétisation des dérivées temporelles, et les termes diffusifs comme le terme de source d'énergie $-T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho (\nabla \cdot \mathbf{V})$ est traité implicitement.

La condition aux limites de sortie (25) est également discrétisée en utilisant le même schéma du second ordre, conduisant à une condition aux limites de Dirichlet pour les variables au pas de temps courant $n + 1$. L'approximation spatiale est effectuée en utilisant une méthode de collocation de Chebyshev avec des points de Gauss-Lobatto.

Pour le calcul des termes convectifs, les dérivées sont calculées dans l'espace spectral et les produits sont effectués dans l'espace physique; la connexion entre les espaces spectral et physique est réalisée grâce à un algorithme FFT. En revanche, les matrices de différenciation spectrale sont utilisées pour les dérivées dans les termes diffusifs.

2.5.2 Algorithme numérique

A un pas de temps donné, les équations discrètes sont couplées en raison du traitement implicite de l'énergie impliquant $\nabla \cdot V$. Cependant, il est possible de découpler complètement la solution de l'équation d'énergie et calculer le champ dynamique par calcul par rapport à la seule connaissance de la vitesse [22,23].

En utilisant l'équation d'énergie et l'équation de continuité, la formule de la divergence de la vitesse sera écrite sous la forme suivante :

$$\nabla \cdot V = \frac{\frac{dP_{th}}{dt} + \frac{\gamma_0}{Pr_0} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\rho, P_{th}} \frac{1}{\rho} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}}}{\left[\begin{array}{cc} \rho \left(\frac{\partial F}{\partial \rho} \right)_{T, P_{th}} & + (\gamma_0 - 1) \frac{T}{\rho} \\ \times \left(\frac{\partial P_{th}}{\partial T} \right)_{\rho} & \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\rho, P_{th}} \end{array} \right]} \quad (41)$$

Avec :

$$\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\rho, P_{th}} = -\frac{1}{1-\rho b} + \frac{\alpha \rho}{1+2b\rho-b^2\rho^2}$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \rho} \right)_{T, P_{th}} = -\frac{T}{(1-b\rho)^2} + \frac{2\alpha\alpha(T)(1+b\rho)\rho^2}{(1+2b\rho-b^2\rho^2)^2}$$

$$T \left(\frac{\partial P_{th}}{\partial T} \right) = P_{th} + P_{hyb} - \alpha \left(T \frac{d\alpha}{dT} - \alpha \right) \times \frac{\rho^2}{1+2b\rho-b^2\rho^2}$$

Dans le cas d'un système ouvert, par exemple ici, la pression thermodynamique P_{th} est également constante en temps. Par conséquent, la dérivée temporelle dP_{th} / dt disparaît dans l'équation (41). L'équation (41) est résolue en deux étapes consécutives:

- Premièrement, les variables thermodynamiques sont calculées à l'aide d'un algorithme itératif [22, 23].
- Puis la résolution de l'équation de Navier-Stokes par la méthode de projection améliorée développée par [25].

Ces deux étapes seront décrites en détail ci-dessous :

2.5.2.1 Première étape: calcul de $(T, \rho, \nabla.V)$

Au pas de temps $n + 1$, l'équation d'énergie discrète peut être écrite comme une équation de Helmholtz, son coefficient est λ^{n+1} et ρ^{n+1} . La densité et la conductivité thermique sont divisées en une partie constante à $t = 0$, et une partie liée au temps. Par conséquent, les termes liés au temps sont considérées comme des termes sources, et l'équation d'énergie peut être écrite comme une équation de Helmholtz à coefficient constant.

La diagonalisation complète des opérateurs de Helmholtz à coefficients constants est effectuée pour toute l'étape de prétraitement. Puis, à chaque pas de temps, l'équation de Helmholtz résolvant le problème se résume aux produits matriciels, ce qui entraîne une nécessité de solution sur les supercalculateurs.

Plus précisément, T , ρ et $\nabla \cdot V$ sont calculés à l'aide de l'algorithme itératif suivant:

1. Les variables T^{k-1} , ρ^{k-1} et $(\nabla \cdot V)^{k-1}$ sont initialisées au pas de temps n précédent.
2. La température T^k est obtenue par la solution de l'équation de Helmholtz

$$\frac{\gamma_0}{Pr_0} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \lambda_i \Delta T^k - \frac{3}{2\gamma t} \rho_i T^k = (\rho^{k-1} - \rho_i) \times \frac{3T^{k-1} - \gamma_0}{2\gamma t} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \nabla [(\lambda^{k-1} - \lambda_i) \nabla T^{k-1}] + (\gamma_0 - 1) T^{k-1} \times \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho^{k-1} (\nabla \cdot V)^{k-1} - \rho^{k-1} \times \left(\frac{4T^n - T^{n-1}}{2\gamma t}\right) + AB(\rho V \cdot \nabla)^{n, n-1} \quad (42)$$

$$AB(\phi)^{n, n-1} = 2\phi^n - \phi^{n-1} \quad (43)$$

3. La conductivité thermique λ^k est mise à jour.
4. La densité ρ^k est calculée à partir de l'équation d'état.
5. La divergence de vitesse $(\nabla \cdot V)^k$ est calculée par l'éq. (41).

Les étapes 2 à 5 sont répétées jusqu'à ce que la convergence soit obtenue sur la température et la densité. Le critère de la convergence utilisé est $\text{Max}(\text{Res } T, \text{Res } \rho) < 10^{-11}$, avec $\text{Res } \phi = \text{Max} [(\phi^k - \phi^{k-1}) / \phi^{k-1}]$ pour $\phi = T, \rho$.

2.5.2.2 Deuxième étape: calcul de (V, P_{dyn})

Lors du démarrage de la résolution des équations de Navier-Stokes, la divergence de la température, celles de la densité et de la vitesse au pas de temps $n+1$ sont connus. Raison pour

laquelle, nous employons un algorithme de type projection pareil à ceux développés pour la solution des équations de Navier-Stokes incompressible en tenant compte de certaines modifications. Dans ce mémoire, nous avons fait appel à la méthode de projection modifiée proposée par [25] et analysée en détail dans [26]. Il a été montré en particulier que le calcul de la pression améliore la précision de la pression et permet également de réduire la vitesse de glissement en comparaison avec d'autres méthodes de projections. La méthode de projection modifiée consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes selon les trois étapes successives comme suit :

❖ Calcul d'une pression préliminaire

Tout d'abord, un préliminaire de la pression \overline{P}^{n+1}_{dyn} est calculé à partir de l'équation de Poisson dérivée de l'équation de la quantité de mouvement discrétisée:

$$\Delta \overline{P}^{n+1}_{dyn} = \nabla \cdot \left[-AB(\rho V \cdot \nabla V)^{n,n-1} + \rho^{n+1} \times \left(\frac{4V^n - V^{n-1}}{2\gamma t} \right) + \frac{1}{3} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \nabla (\nabla \cdot V)^{n+1} - \frac{1}{Fr} (\rho^{n+1} - \rho_i) e_y \right] + \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \nabla (\nabla \cdot V)^{n+1} + \frac{3}{2\gamma t} \left(\frac{3\rho^{n+1} - 4V^n + \rho^{n-1}}{2\gamma t} \right) \quad (44)$$

Les conditions aux limites de Neumann sont obtenues par la normale projection normale de la quantité de mouvement sur la frontière :

$$\frac{\partial \bar{P}_{dyn}^{n+1}}{\partial n} = n \cdot \left\{ -AB(\rho V \cdot \nabla V)^{n,n-1} + \rho^{n+1} \times \left(\frac{-3W^{n+1} + 4V^n - V^{n-1}}{2\gamma t} \right) + \frac{4}{3} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \nabla \cdot (\nabla \cdot V)^{n+1} - \frac{1}{Fr} (\rho^{n+1} - \rho_i) e_y - \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} AB[\nabla (\nabla \cdot V)^{n,n-1}] \right\} \quad (45)$$

Où W^{n+1} représente la condition aux limites de la vitesse au pas de temps $n + 1$ avec :

$$W^{n+1} = \frac{2\gamma t}{3} \left[\frac{4V^n - V^{n-1}}{2\gamma t} - Re \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \frac{\partial V^n}{\partial x} \right]$$

❖ Calcul d'une vitesse prédite V^*

Le champ de vitesse prédit V^* est calculé implicitement à partir de l'équation de moment avec le gradient de la pression préliminaire au lieu de celle de la pression réelle P_{dyn}^{n+1} . La vitesse prédite satisfait donc au problème suivant :

$$= \left\{ \begin{array}{l} \rho^{n+1} \frac{3V^* - 4V^n + V^{n-1}}{2\gamma t} + AB(\rho V \cdot \nabla V)^{n,n-1} \\ - \nabla \bar{P}_{dyn}^{n+1} + \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \Delta V^* + \frac{1}{3} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \nabla (\nabla \cdot V)^{n+1} \\ - \frac{1}{Fr} (\rho^{n+1} - \rho_i) e_y \text{ Dans } \Omega \end{array} \right. \quad (46)$$

$$V^* = W^{n+1}$$

Ici encore, nous devons résoudre les équations de Helmholtz avec des coefficients impliquant ρ^{n+1} pour chaque composante de la vitesse. Quant à l'équation énergétique, la

densité ρ^{n+1} est divisée en une partie constante et une partie dépendante du temps. Les équations de Helmholtz à coefficients constants sont résolues itérativement pour les composantes de la vitesse. La convergence est atteinte lorsque $\text{Max}(\text{Res } u, \text{Res } v)$ est strictement inférieur 10^{-13} . Ce critère est rempli après trois ou quatre itérations.

❖ **Étape de correction**

Le champ de vitesse ayant convergé V^* est alors corrigé en prenant en compte le gradient de la pression au pas de temps courant $n+1$ pour que le champ de vitesse final satisfasse la continuité. Cette correction est effectuée par la solution du problème de Poisson suivant pour la variable intermédiaire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta\phi = \Delta.(\rho^{n+1}V^*) + \frac{3\rho^* - 4\rho^n + \rho^{n-1}}{2\gamma t} \\ \frac{\partial\phi}{\partial x} = 0 \text{ dans } \partial\Omega \end{array} \right. \quad (47)$$

Il faut noter que le problème de Poisson-Neumann ci-dessus doit remplir une condition de compatibilité pour pouvoir être résolu en raison de la condition de Dirichlet non homogène pour la vitesse prédite V^* à la sortie du canal. Une renormalisation de V^* à la limite de sortie a donc été effectuée avant la solution du problème de Poisson-Neumann telle que proposée dans [27]. Le champ de vitesse réel et la pression au pas de temps courant $n + 1$ sont finalement calculés dans $\Omega \cup \partial\Omega$ par les formules suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} V^{n+1} = V^* - \frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla\phi \\ P_{dyn}^{n+1} = \bar{P}_{dyn}^{n+1} + \frac{3}{2\gamma t} \phi \end{array} \right. \quad (48)$$

Chapitre III

Simulations et résultats numériques

Comme évoqué dans le chapitre précédent, la configuration est constituée d'une cavité ouverte 2D de hauteur H et de longueur $L=10H$ traversée par un flux de fluide parfait dans un premier temps, ensuite dans un second temps par un fluide composé de CO_2 supercritique (voir la Figure 3.1).

Initialement, le fluide satisfait un écoulement de Hagen-Poiseuille établie vitesse moyenne U_{moy} et est à une température uniforme $T_i = T_c + 1\text{K}$ et à une densité moyenne égale à la densité critique ρ_c . Ensuite, la température de la paroi inférieure du canal est progressivement augmentée pendant une phase de chauffage jusqu'à la valeur $T_{ch} = T_i + \delta T$ à partir d'une distance de l'entrée égale à H , alors que la paroi supérieure est maintenue à la température initiale.

Afin d'éviter une discontinuité de la température sur la paroi inférieure, on utilise la condition aux limites

$$T_{ch}(x) = T_i + \delta T \left[\text{th}\left(\frac{2x}{H} - 2\right) - \text{th}(-2) \right] \left[\text{th}(18) - \text{th}(-2) \right]$$

pour $0 \leq x \leq L$ qui permet de passer de façon continue de la zone froide pour $0 \leq x \leq H$ à la zone chaude $H \leq x \leq L$.

A la sortie, on applique une Condition d'Orlanski (voir la Figure 3.1). En effet, il est connu que les méthodes spectrales supportent mal toute forme de discontinuité qui génère systématiquement des oscillations numériques dans la solution calculée. Les études antérieures menées dans cette configuration pour des gaz parfaits, ont révélé des régimes d'instabilités convective et absolue suivant les valeurs de Re et de Ra .

Les résultats obtenus dans ce mémoire présentent des propriétés physiques comparatives entre un fluide parfait et un fluide supercritique afin de tirer l'importance d'utilisation de ces derniers dans l'industrie. Les simulations ont été effectuées pour un nombre de Reynolds fixe, $Re = 50.357$. Les champs de température instantanés à plusieurs reprises sont présentés afin de montrer l'évolution spatio-temporelle des structures thermoconvectives. D'autres paramètres tels que la densité et la vitesse sont aussi présentés.

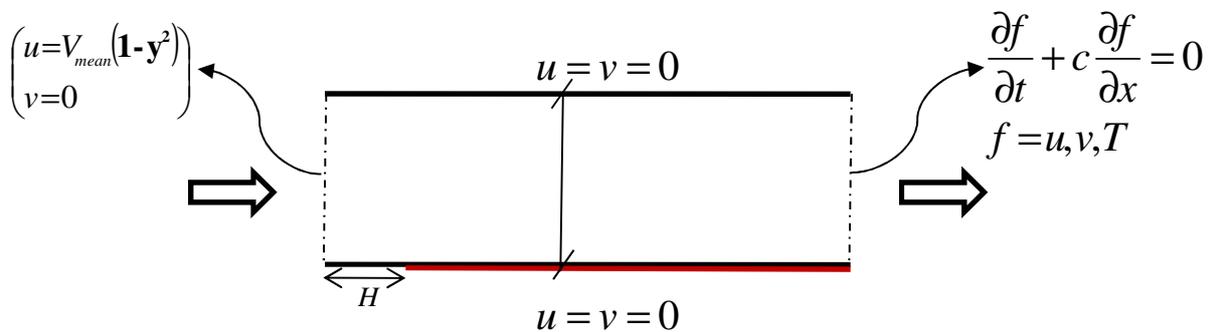


Figure 3.1 : Problème physique et conditions aux limites

Premièrement, le fluide considéré est un gaz parfait de masse volumique $\rho = 1 \text{ Kg/m}^3$ et une viscosité $\mu = 2.04 \text{E}^{-5} \text{ Pa.s}$, une conductivité égale à $\lambda = 0.020541 \text{ W/m.k}$ et un $C_p = 661.238 \text{ J/kg.k}$, ce qui correspond à un nombre de Prandtl $Pr = 0.65$ (voir le Tableau 3.1 et 3.2).

Le chauffage de la paroi inférieure a été fixé égal à $0,1 \text{ mK}$. Dans ce cas, le fluide a été fixé à 1 K -dessus de sa température critique, ce qui correspond à une distance sans dimension du point critique $\varepsilon = 3.288 \times 10^{-3}$. Dans le deuxième cas de calcul considéré, le fluide considéré est un fluide de CO_2 supercritique de masse volumique, de viscosité, de conductivité et de chaleur spécifique égales successivement : 467.8 Kg/m^3 , $3.27 \text{E}^{-5} \text{ Pa.s}$, 0.0441265 W/m.k et $42803.48043 \text{ J/kg.k}$, ce qui correspond à un nombre de Prandtl $Pr = 31.7$.

Chapitre III Simulation et résultats numérique

Comme le montre les tableaux 3.1 et 3.2, les calculs ont été effectués pour deux valeurs de chauffage $\delta T=0.1$ mK pour le fluide supercritique et 2.43 mK pour le fluide parfait (correspondant à 25 fois le chauffage du fluide supercritique). En raison de la divergence du coefficient de dilatation thermique β et de la chaleur spécifique isobare C_p près du point critique, ces petites augmentations de température induisent un grand nombre de Rayleigh égale à 5.23×10^6 pour le fluide supercritique. Cette propriété favorise un grand transfert thermique, d'où l'intérêt d'utiliser les FSC industriellement.

	β_i (K ⁻¹)	ρ (kg/m ³)	μ (Pa.s)	Chauffage δT	C_p (J/kg.k)	conductivite λ (W/m.k)
FSC	0.82199	467.8	3.27E-005	0.1	42803.48	0.0441265
FP	0.0032773	1	2.04E-005	2.43	661.23	0.020541

Tableau 3.1 : Tableau comparatif des propriétés thermodynamiques entre un fluide parfait (FP), un fluide supercritique (FSC) et l'air à 31°C

	T (K)	Epsilon	Gr	Re	Gr/Re ²	Pr	Ra=Gr*Pr
FSC	304.13	3.29E-003	1.65E+00 5	50.57	64.53	3.17E+01	5.23E+06
FP	304.13	3.29E-003	1.88E+00 5	50.57	73.41	0.6566	1.23E+05

Tableau 3-2 : Paramètres de calcul et nombres adimensionnels du problème étudié



t=1.26s



t=1.61s

t=5.66s

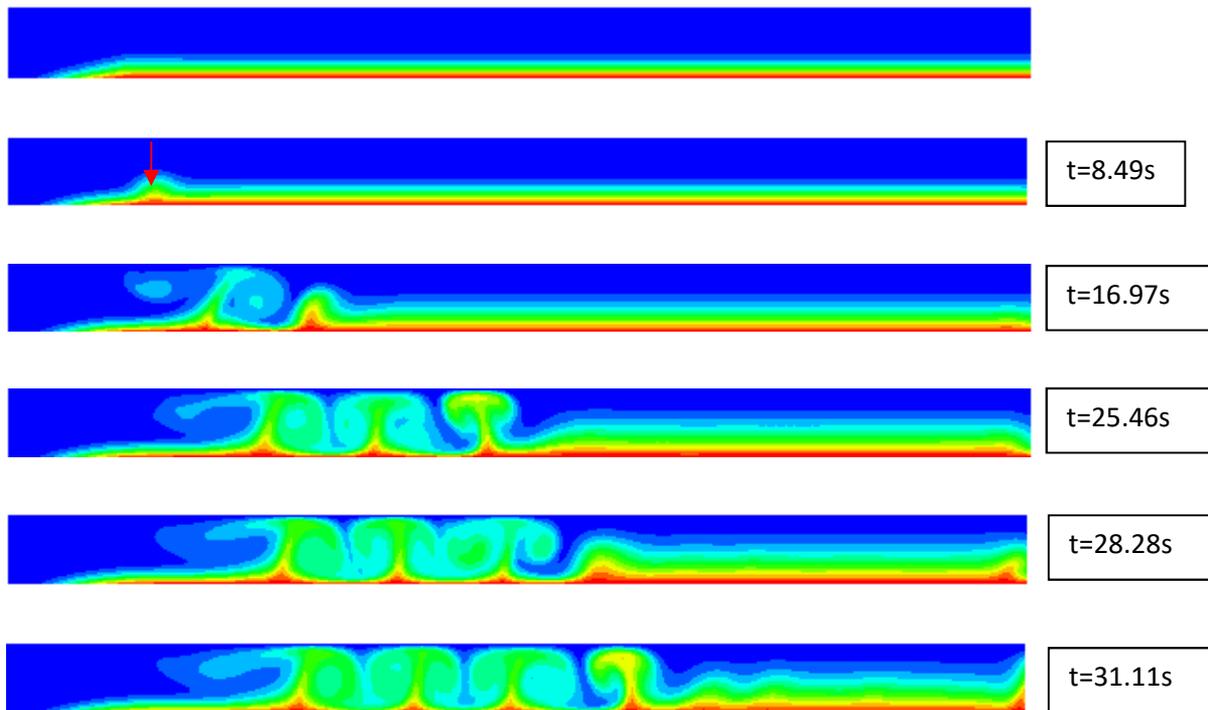


Figure 3.2 :Champs de température pour le cas du gaz parfait.

La figure 3.2 montre les champs de température pour plusieurs valeurs de δT recueillies à des moments différents de calcul. Dans tous les cas, l'instabilité apparaît sous la forme de panaches thermiques qui se développent sur la couche limite chaude. Ces structures sont similaires à celles obtenues antérieurement pour un fluide supercritique dans la configuration de Rayleigh-Bénard [28-35]. Cependant, dans une cavité fermée (voir Figure 3.3), la paroi du fond de chauffage induit un effet de Piston qui augmente de façon homogène la température et donne lieu à une seconde couche limite instable thermique sur la paroi supérieure froide. Ce n'est pas le cas dans une cavité ouverte, comme le montre la figure 3.2.

Les figures 3.3 et 3.4 représentent respectivement les champs de température et de la vitesse du fluide parfait prélevés à $t=31.11s$.

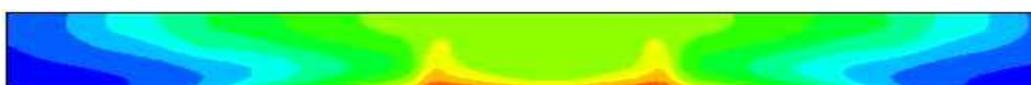


Figure 3.3 :Champ de température pour un FSC (Smahi et Al., CFM 2019)

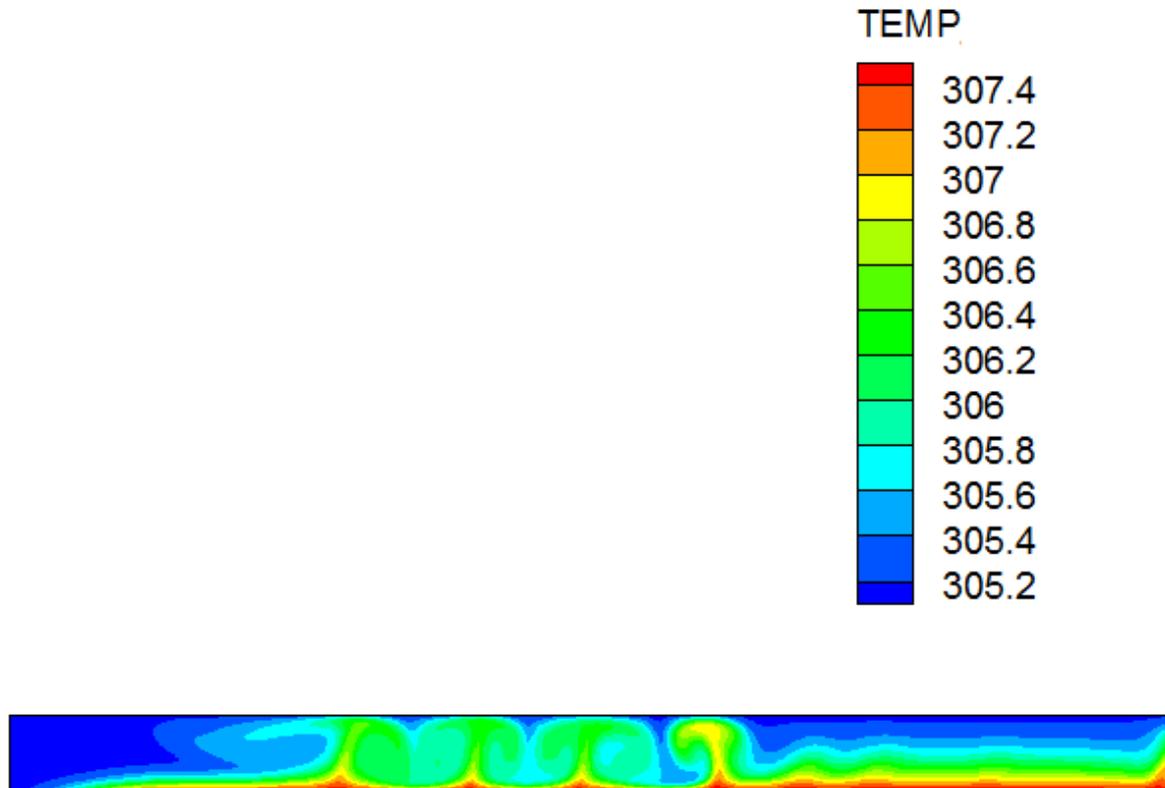


Figure 3.4 :Champ de température pour le fluide parfait à $t=31.11$.

La variation quantitative de la température sur la figure 3.4 montre que le chauffage de la cavité dans le cas d'un fluide parfait fait augmenter l'épaisseur de la couche limite chaude qui s'étend jusqu'à la paroi supérieure de la cavité.

La figure 3.5 montre également que ces structures thermoconvectives se manifestent sur toute la hauteur de la cavité.

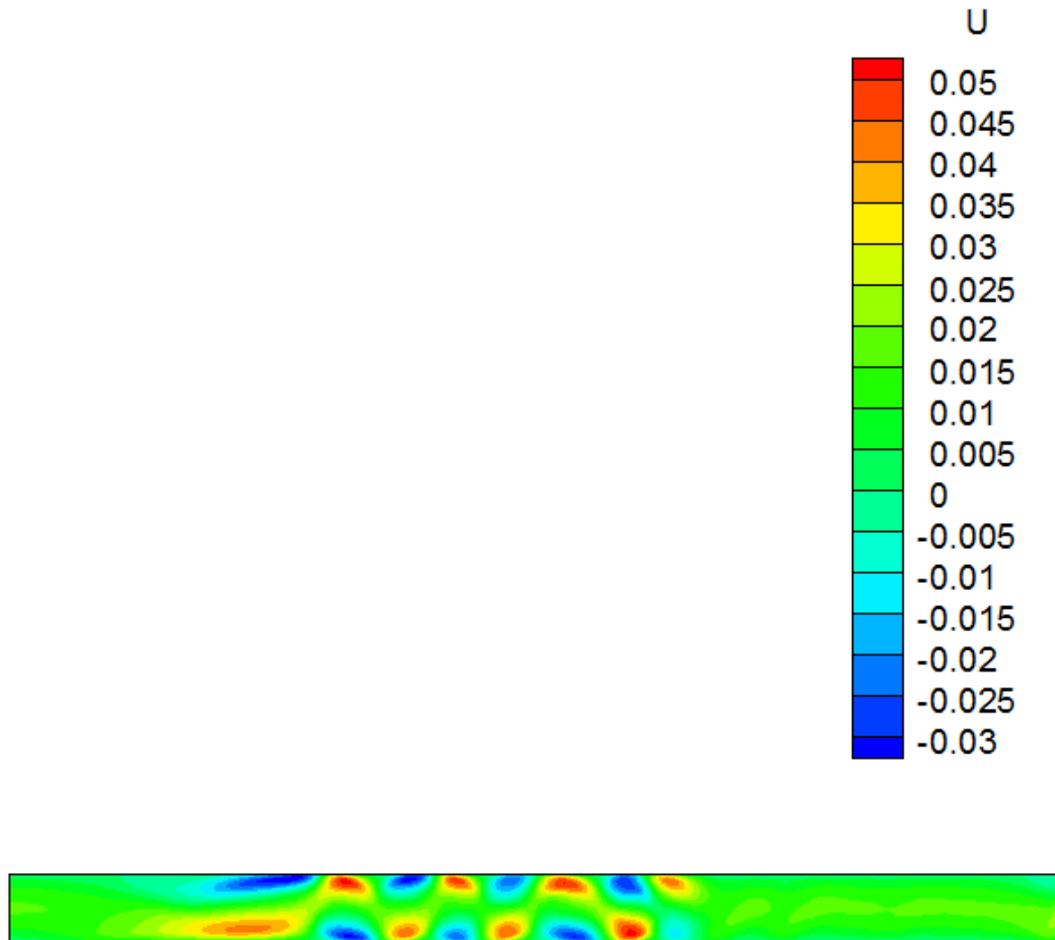


Figure 3.5 : Champs de vitesse du fluide parfait à $t=31.11s$.

La figure 3.6 montre également que le nombre et le développement des structures thermo convectives sont différents par rapport au cas d'un fluide parfait.

Dans le cas d'un fluide supercritique, l'instabilité apparaît rapidement (à $t=0.38s$) sous la forme de panaches thermiques fines qui se développent sur la couche limite chaude. L'apparition dans le cas d'un fluide parfait est plus lente ($t=8.49s$) comme le montre la figure 3.2.

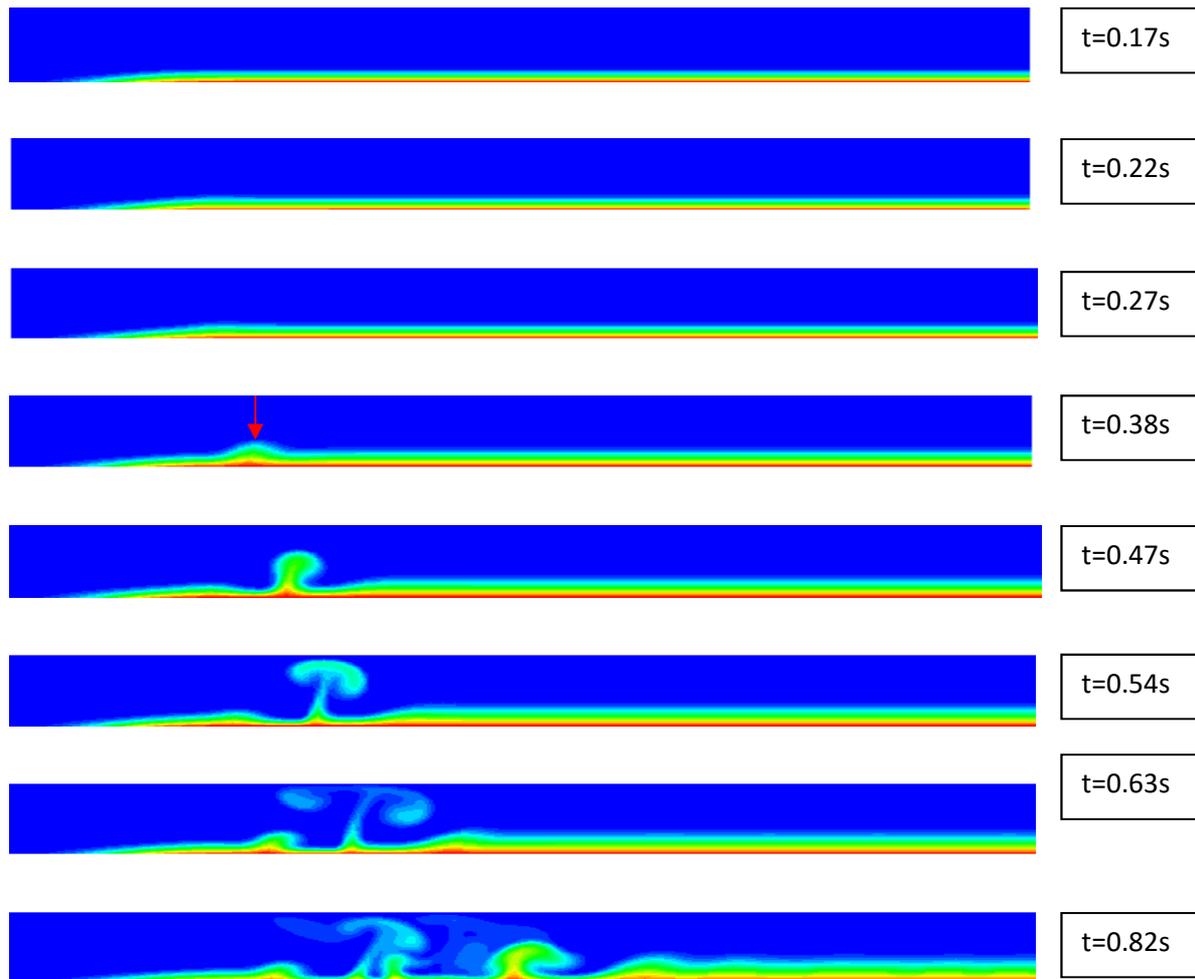


Figure 3.6 :Champ de température pour le cas du gaz supercritique en fonction du temps

La comparaison entre la densité du fluide parfait (a) et celle d'un fluide supercritique (b) dans la figure 3.7, montre clairement que les structures thermoconvectives apparaissent plutôt.

Pour le même nombre de Re , plus le nombre de Pr est grand (rapport Gr/Re^2) effectivement, plus les structures thermoconvectives se développent rapidement. Le temps que ces structures se déplacent en aval, de nouveaux panaches thermiques apparaissent continuellement vers le début de la zone chauffée et l'instabilité se propage dans toute la cavité.

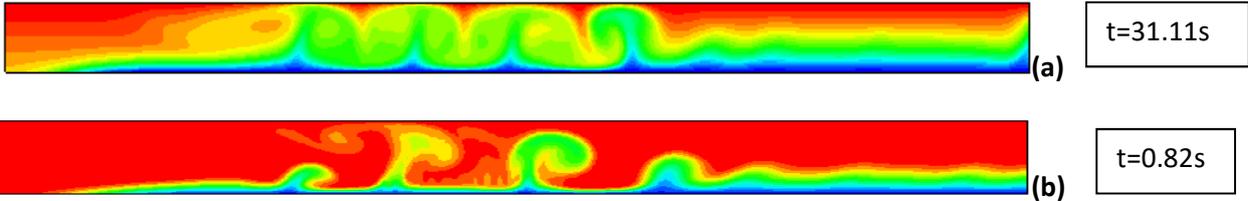


Figure 3.7 : Densité du fluide (a) cas du fluide parfait (b) cas du fluide supercritique

Conclusion et Perspectives

Dans ce mémoire, le problème de Poiseuille-Rayleigh-Bénard d'un fluide supercritique modélisé par l'équation d'état de Peng-Robinson, a été étudié et comparé avec le cas d'un gaz parfait pour un nombre de Reynolds $Re=50.57$.

Les champs de température obtenus dans une cavité ouverte révèlent l'existence d'instabilités thermoconvective s'apparaissant sous la forme de panaches thermiques, semblables à ceux observés précédemment dans les fluides supercritiques dans la configuration de Rayleigh-Bénard. Ces panaches thermiques se développent puis se déplacent en aval au cours du temps.

Ainsi, contrairement au cas des gaz parfaits, pour lesquels les structures thermoconvectives occupent toute la hauteur du canal, l'instabilité dans le cas fluide supercritique se développe sur la couche limite thermique bien le long de la zone chauffée. L'évolution temporelle des motifs indique que l'instabilité dépend du nombre de Rayleigh et du nombre de Prandtl. En conséquence, les résultats trouvés montrent que pour des chauffages très petits, on atteint rapidement des nombres de Ra très élevés d'où l'intérêt d'utiliser les FSC.

De toute évidence, les résultats présentés ici sont des résultats préliminaires et des simulations sont nécessaires pour confirmer le type de structures que nous avons obtenu. En particulier, les simulations seront effectuées pour déterminer le seuil d'instabilité convective pour différentes valeurs du nombre de Reynolds ainsi que le nombre de Reynolds pour la transition entre des rouleaux transversaux et les rouleaux longitudinaux. Des calculs tridimensionnels seront aussi envisagés.

Bibliographie

- [1] Anastas P., Warner J. C., Green chemistry theory and practice, Oxford, Oxford university press. (1998) 135.
- [2] Colonna P., La chimie verte. Lavoisier. 2006.
- [3] Badense E., Boutine O., Charbit G., Les fluides entre deux états : une alternative potentielle pour la préservation de l'environnement. Echos SC .2 (2005) 4.
- [4] Lumia G., Utilisation du CO₂ supercritique comme solvant de substitution. Techniques de l'Ingénieur.5 (2002) 1.
- [5] Hongyu C. J., Conception d'un dispositif microfluidique de synthèse en continu du poly (acide acrylique) en milieu hétérogène eau/CO₂ supercritique. Polymère. Université de Bordeaux. (2014) 173.
- [6] Charles-Cagniard C., Exposé de quelques résultats obtenu par l'action combinée de la chaleur et de la compression sur certains liquides, tels que l'eau, l'alcool, l'éther sulfurique et l'essence de pétrole rectifiée, Annales de chimie et de physique, (1822) 127.
- [7] Andrew T., Trans.Roy.Soc, (1869) 159.
- [8] Van der Wals J.D., Over de continuïteit van den gas en vloeïstoofstand .1873.
- [9] Garrabos Y., Le Neindre B., Subra P., Cansell F. and Pommier C., Fluides critiques et gravité, fluides supercritiques et matériaux. Fluides, Matériaux et Microgravité, Ann. Chim.17 (1992) 55.
- [10] Stanley H. E., Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena.1971.
- [11] Sengers J.V. and LeveltSengers J.M.H, Critical phenomena in classical fluids, inprogress in liquid physics, 1978.
- [12] Kreyszig E., Advanced engineering mathematics, Wiley & Sons INC. 1993.

- [13] Zappoli B., Amiroudine S., Carlès P. and Ouazzani J., Thermo acoustic and bouncy-driven transport in a square side-heated cavity filled with a near-critical fluid, *J. Fluid Mech.*,316 (1996) 53.
- [14] Nitsche K. and Straub J., The critical “hump“ of C_v under microgravity, result from the D-1 Spacelab experiment “Wärmekapazität”, *Proceeding of 6th European Symposium on Material Science under Microgravity Conditions*.1987.
- [15] Dahl D. and Moldover M. R., Thermal relaxation near the critical point, *Phys.*6 (1972).
- [16] Nicolas X., *Revue bibliographique sur les écoulements de Poiseuille-Rayleigh-Bénard : écoulement de convection mixte en conduites rectangulaires horizontales chauffées par le bas*, *Internat. J. Thermal Sciences* .41 (2002) 961.
- [17] Paolucci S., *On the filtering of sound from the Navier-Stokes equations*, Technical. 1982.
- [18] Raspo I., Bontoux P., and Zappoli B., An adaptation of the low mach number approximation for super critical fluid buoyant flows, *Comptes Rendus Mécanique* .333 (2005) 397.
- [19] Amiroudine S., Boutrouft K. and Zappoli B., The stabilizing effect of a Rayleigh-Taylor like instability in a supercritical fluid, *Phys. of Fluids*.17 (2005).
- [20] 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.
- [21] 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 (1990) 2264.
- [22] Ouazzani J. and Garrabos Y., A new numerical algorithm for low Mach number supercritical fluids, accessed October .2007
- [23] Raspo I. and Ouazzani J., *Un algorithme faible nombre de Mach pour la simulation des écoulements de fluides supercritique par des méthodes spectrales*, 2009.

- [24] Haldenwang P., Labrosse G., Abboudi S. and Deville.M, Chebyshev 3D spectral and 2D pseudo spectral solvers for the Helmholtz equation, *J. Comput. Phys.*55 (1984) 115.
- [25] Hugues S. and Randriamampianina, A, An improved projection scheme applied to pseudo spectral methods for the incompressible Navier-Stokes equations, *Int. J. Numer. Methods Fluids.* 28 (1998) 501.
- [26] Raspo I. Hugues S., Serre E., Randriamampianina A., and Bontoux.P, A spectral projection method for the simulation of complexthree-dimensional rotating flows, *Comput. Fluids*, 31 (2002) 745.
- [27] Le H. and Moin P., Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step, 1994.
- [28] Chiwata Y. and Onuki A, Thermal plumes and convection in highly compressible fluids, *Physical Review Letters*, Vol. 87, 2001, pp. 144301.
- [29] 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, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 442, 2001, pp. 119-140.
- [30] Furukawa A. and Onuki A., Convective heat transport in compressible fluids, *Physical Review E*, Vol. 66, 2002, pp. 016302.
- [31] Furukawa A., Meyer H., Onuki A. and Kogan A. B., Convection in a very compressible fluid: comparison of simulations with experiments, *Physical Review E*, Vol. 68, 2003, pp. 56301–56309.
- [32] Amiroudine S. and Zappoli B., Piston-effect-induced thermal oscillations at the Rayleigh-Bénard threshold in supercritical He, *Physical Review Letters*, Vol. 90, 2003, pp. 105301–105303.
- [33] Raspo I., Zappoli B. and Bontoux P., Unsteady two-dimensional convection in a bottom heated supercritical fluid, *comptes rendus de mécanique*, Vol. 332, 2004, pp. 353-360.

[34] Accary G., Raspo I., Bontoux P. and Zappoli B., Three-dimensional Rayleigh-Bénard instability in a supercritical fluid, *comptes rendus de mécanique*, Vol. 332, 2004, pp. 209-216.

[35] Smahi H., Ameer D., Dib J. and Raspo I., Numerical Study of Adsorption for Fluids Mixture near Critical Point in a Micro-cavity. CFM2019 Brest, France.2019

ملخص : الهدف من هذه الأطروحة هو نمذجة ومحاكاة نقل الحرارة في تدفق لسائل مائع فوق النقطة الحرجة يتدفق في تجويف ثنائي الأبعاد مفتوح بشكل جانبي ،من أجل دراسة كيف يمكن للخصائص المحددة للسوائل في المنطقة المجاورة للنقطة الحرجة للغاز السائل أن تعدل الظواهر التي لوحظت بالمقارنة مع الغازات المثالية. يتوافق التكوين الذي تم الاحتفاظ به للمحاكاة الرقمية مع حالة تدفق **Haguen-Poiseuille** المسخن من الأسفل (مشكلة **Poiseuille-Rayleigh-Bénard**) والتي تمت دراستها على نطاق واسع في الأدبيات الخاصة بالغازات المثالية. أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها وجود عدم استقرار في التفاعل الحراري يظهر في شكل أعمدة حرارية تمتد على كامل ارتفاع التجويف في حالة السائل المثالي وعلى الطبقة الساخنة في حالة الغاز فوق النقطة الحرجة. تُظهر دراستنا أيضًا أن هذه الهياكل الحرارية تظهر مبكرًا وتكون أسرع مما في حالة الغازات المثالية ، ومن هنا تأتي ميزة استخدام السوائل فوق الحرجة في العمليات الصناعية.

Résumé : L'objectif de ce mémoire est de modéliser et simuler le transfert thermique dans écoulement de fluide supercritique s'écoulant dans une cavité 2D ouverte latéralement, afin d'étudier comment les propriétés spécifiques des fluides au voisinage du point critique liquide-gaz peuvent modifier les phénomènes observés par rapport à un gaz parfait. La configuration retenue pour les simulations numériques correspond au cas d'un écoulement de Haguen-Poiseuille chauffé par le bas (problème de Poiseuille-Rayleigh-Bénard) qui a été largement étudié dans la littérature pour les gaz parfaits. Les résultats obtenus montrent l'existence d'instabilités thermoconvectives apparaissant sous la forme de panaches thermiques s'étalant sur toute la hauteur de la cavité dans le cas d'un fluide parfait et sur la couche limite chaude dans le cas d'un gaz supercritique. Notre étude montre aussi que ces structures thermoconvectives apparaissent plutôt et sont plus rapides que dans le cas des gaz parfaits, d'où l'intérêt d'utiliser les fluides supercritiques dans les procédés industriels.

Abstract: The aim of this master's thesis is to model and simulate flow and heat transfer in a supercritical fluid flowing into a laterally opened 2D cavity, in order to study how the specific properties of the fluids near of the liquid-gas critical point can modify the observed phenomena for perfect gases. The configuration chosen for the numerical simulations corresponds to the case of a bottom-heated Haguen-Poiseuille flow (Poiseuille-Rayleigh-Benard problem) which has been widely studied in the literature for perfect gases. The results show the existence of thermoconvective instabilities in the form of thermal plumes extending over the entire height of the cavity in the case of a perfect fluid and over the hot boundary layer in the case of a supercritical gas. Our study also shows that these thermoconvective