



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie Houari BOUMEDIENE
Faculté de Génie Mécanique & Génie des procédés



Mémoire

Pour l'Obtention du Diplôme de

MAGISTER

En: Génie Mécanique

Option : Aérodynamique & Conversion d'énergie

Par

Brahim ALIAT

**Effet de l'apesanteur sur l'accélération du
transport de chaleur par expansion de la
couche près de la paroi dans un fluide
supercritique**

Soutenue le 16 Mai 2011 devant la commission d'examen

M^r R. DIZENE

M^r N. DJENNAOUI

M^r A. BENTEBBICHE

M^r M. MENAA

Professeur à l'USTHB

Maître de conférences /A à l'USTHB

Maître de conférences /A à l'USTHB

Maître de conférences /A à l'USTHB

Président

Directeur de mémoire

Examineur

Examineur

Dédicaces

*Louange à mon cher ALLAH qui malgré mon état de santé
ma donner la force et l'endurance pour finaliser le travail et
le mémoire*

Je dédie ce modeste mémoire

A

*Mes chers et adorables parents qui ont beaucoup veillé sur
moi et soutenu et que je ne pourrai jamais assez remercier,*

Ma chère femme,

Mon cher frère, Mon beau frère,

Mes adorables Beaux parents, Mes belles sœurs,

Mes grands parents et qu'ALLAH leur donne une long vie,

Mes cousins, cousines et toute ma famille,

*Tous mes amis (es) de l'U.S.T.H.B ainsi des Groupes
SONELGAZ, SONATRACH et NAFTAL sans exception,
en particulier ABDEREZZAK, DJAMEL, ZOHEIR,
SI-SALAH, SBAA, GHANEM, ALI, HOUCEM,
SOFIANE, LAMRI, MOKHTAR, RABAH, FODIL,
AHMANE, SEDDIK et DAHOU.*

*Tous les enseignants qui ont contribué à ma formation PG
en particulier Mr DJENNAOUI, Mr DIZENE, Mr ATIF,
Mr BENTEBBICHE, Mr MENAA et M^{lle} FILALI.*

Brahim ALIAT

AVANT PROPOS

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé au sein du Laboratoire de Mécanique Avancée (LMA) de la Faculté de Génie Mécanique et Génie des Procédés – USTHB.

Je tiens tout d'abord à exprimer ma profonde gratitude à mon directeur de thèse, Monsieur Nabil DJENNAOUI, Maître de Conférences à l'U.S.T.H.B, de m'avoir confié ce travail et me faire bénéficier de ses qualités scientifiques et pour les conseils qu'il m'a prodigués.

Je suis très sensible à la confiance qu'il m'a témoignée depuis l'entame de ce sujet.

J'exprime aussi ma profonde gratitude à Monsieur Rabah DIZENE, Professeur à l'U.S.T.H.B, dont j'ai reçu un enseignement exemplaire, m'a fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire. Malgré ses très nombreuses responsabilités, il n'a jamais hésité à me confier des orientations et des conseils très utiles.

Monsieur Abdelhalim BENTEBBICHE, Maître de conférences à l'U.S.T.H.B, m'a fait l'honneur de juger ce travail malgré ses responsabilités. Qu'il me soit permis de lui exprimer ma sincère reconnaissance.

Je prie Monsieur Mohamed MENAA, Maître de conférences à l'U.S.T.H.B, d'accepter mes sincères remerciements pour avoir pris de son précieux temps afin d'examiner ce travail et de participer à ce jury.

Je tiens à lui exprimer ma profonde reconnaissance.

Par ailleurs, je suis très reconnaissant envers premièrement ma famille, mes beaux parents, ma femme, tous mes amis et mes collègues à l'université et à Sonelgaz qui m'ont régulièrement ou occasionnellement encouragé pour avancer ce mémoire.

J'exprimer mes sincères remerciements à tous ceux qui ont contribué à ma formation surtout mes enseignants du primaire, *CEM*, Lycée et de l'université.

SOMMAIRE

SOMMAIRE

Nomenclature	
Introduction générale.....	01
Etude bibliographique.....	04

CHAPITRE I : PHENOMENE CRITIQUE POSITION DU PROBLEME PHYSIQUE

I-1 Introduction	08
I-2 Propriétés des fluides supercritiques	08
I-3 Le point critique et stabilité thermodynamique	10
I-4 Les phénomènes critiques.....	12
I-4-1 Exposants critiques.....	13
I-4-2 Les modèles classiques.....	16
I-4-3 L'influence de la gravité et les anomalies de transport de la chaleur.....	17
I-4-3-1 Effet de la gravité.....	17
I-4-3-2 Transfert de chaleur	18
I-5 Effet piston	19
I-6 Les fluides supercritiques dans le domaine industriel	21
I-7 Les applications de la micropesanteur.....	26
I-8 Position du problème physique.....	26
I-9 Procédure de l'étude	28
I-10 Abaques de référence.....	31
I-11 Conclusion	31

CHAPITRE II : FORMULATION MATHEMATIQUE RESOLUTION NUMERIQUE

II-1 Introduction	32
II-2 Modèle mathématique et équation du problème	33
II-3-1 Discrétisation des équations.....	38
II-3-2 Déroulement du procédé de calcul (Algorithme PISO) :.....	40
a) Pas prédicteur pour la vitesse :	42
b) 1 ^{er} pas correcteur :	42
c) Pas prédicteur pour l'énergie :	43
II-4 La méthode PISO appliquée à notre problème.....	43
II-4-1 Mise en équation:	43
II-4-2 Discrétisation:	48
II-4-2-1 Discrétisation en temps :	48
II-4-2-2 Discrétisation en espace :	49

II-4-2-3 Grille à pas variable :	49
II-4-3 Résolution après discrétisation:	50
a) Pas prédicteur :	51
b) 1 ^{er} pas correcteur :	52
c) Pas prédicteur pour l'énergie :	57
d) Second pas correcteur :	58
II-5 Conclusion.....	61

CHAPITRE III : DISCUSSION DES RESULTATS

III-1 Introduction.....	62
III-2 Paramètres de l'étude.....	63
III-3 Résultats et discussions.....	64
a. Pas de temps fixe, T_0 variable :	64
b. T_0 fixe, pas de temps variable :	65
III-3-1 Résultats obtenus pour le CO_2 :	66
1) Evolution de la vitesse pour le CO_2 :	66
2) Evolution de la température pour le CO_2 :	66
3) Evolution de la pression pour le CO_2 :	66
III-3-2 Résultats obtenus pour le C_2H_2 :.....	69
1) Evolution de la vitesse pour le C_2H_2 :	69
2) Evolution de la température pour le C_2H_2 :	69
III-3-3 Résultats obtenus pour le C_2H_6 :.....	71
1) Evolution de la vitesse pour le C_2H_6 :	71
2) Evolution de la température pour le C_2H_6 :	71
3) Evolution de la pression pour le C_2H_6 :	72
III-3-4 Comparaison des résultats des trois fluides	74
a. Analyse dynamique:	74
b. Analyse thermique:	76
III-3-5 Résultats obtenus pour le H_2 :	78
1) Evolution de la vitesse pour le H_2 :	78
a. Pas de temps fixe, T_0 variable :	78
b. T_0 fixe, pas de temps variable :	78
2) Evolution de la température pour le H_2 :	78
a. Pas de temps fixe, T_0 variable :	78
b. T_0 fixe, pas de temps variable :	79
III-4 Approche du phénomène d'expansion.....	82
III-5 Conclusion	82

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale	83
Références bibliographiques	85
Annexes.....	91

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1 : Coordonnées du point critique de quelques corps	11
Tableau 1.2 : Propriétés au voisinage du (PC) avec les exposants associés	14
Tableau 1.3 : Comparaison des exposants critiques classiques et réels	17
Tableau 3.1: valeurs des constantes physiques utilisées.....	63
Tableau A 3.1: les propriétés du dioxyde de carbone.....	96
Tableau A 3.2: Les principales applications du dioxyde de carbone dans l'industrie.....	97
Tableau A 3.3: les propriétés de l'Acétylène.....	99
Tableau A 3.4: Les principales applications de l'Acétylène dans l'industrie.....	99
Tableau A 3.5: les propriétés de l'éthane.....	100
Tableau A 3.6: Les principales applications de l'éthane dans l'industrie.....	101
Tableau A 3.7: les propriétés de l'Hydrogène.....	102
Tableau A 3.8: Les principales applications de l'Hydrogène dans l'industrie.....	103

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1: Surface d'états d'un corps pur.....	09
Figure 1.2 : Diagramme P, T d'un corps pur.....	09
Figure 1.3 : Diagramme P, V d'un corps pur.....	10
Figure 1.4 : (a) les 2 phases (liquide et gaz) clairement apparentes (ménisque) pour le CO ₂ . (b) avec un accroissement de température, lorsque la température et la pression critiques sont atteintes, les phases (liquide et gaz) ne sont plus visibles, la phase supercritique apparaît (Laboratoire LCSG, Université de Leeds).....	12
Figure 1.5 : Représentation schématique du mécanisme de l'Effet Piston (Le niveau de gris symbolise la température).....	20
Figure 1.6 profils de Température, densité, pression et vitesse d'une cellule de 1 cm remplie de CO ₂ à la densité critique et à T _c +1K, et soumise sur sa paroi gauche à un flux de la chaleur de 1W/m ² pendant que la paroi droite est adiabatique	31
Figure 2.1 : Courbe de coexistence.....	32
Figure 2.2 : Evolution de la température à la paroi.....	33
Figure 3.1 : profil de la vitesse pour différentes températures initiales	64
Figure 3.2 : profil de la température pour différentes températures initiales.....	65
Figure 3.3 : profil de la vitesse pour différents pas de temps	65
Figure 3.4 : profil de la température pour différents pas de temps	66
Figure 3.5 : profil de la vitesse du CO ₂ dans la couche limite.....	67
Figure 4.6 : profil de la vitesse du CO ₂ dans le volume (Bulk).....	67
Figure 4.7 : profil de la température du CO ₂ dans le Bulk.....	68
Figure 4.8 : profil de la pression du CO ₂ dans la couche limite.....	68
Figure 4.9 : profil de la vitesse du C ₂ H ₂ dans la couche limite.....	69
Figure 4.10 : profil de la vitesse du C ₂ H ₂ dans le Bulk.....	70
Figure 4.11 : profil de la température du C ₂ H ₂ dans la couche limite Près de la paroi afin de préciser les minimums.....	70
Figure 4.12 : profil de la température du C ₂ H ₂ dans le Bulk.....	71
Figure 4.13 : profil de la vitesse du C ₂ H ₆ dans la couche limite.....	72
Figure 4.14 : profil de la vitesse du C ₂ H ₆ dans le Bulk.....	73
Figure 4.15 : profil de la température du C ₂ H ₆ dans la couche limite.....	73
Figure 4.16 : profil de la pression du C ₂ H ₆ dans la couche limite.....	74
Figure 4.17 : comparaison des profils de vitesse des trois fluides dans le Bulk.....	75
Figure 4.18 : comparaison des profils de pression des trois fluides dans le Bulk.....	75
Figure 4.19 : comparaison des profils de température des trois fluides dans le Bulk.....	76

Figure 4.20 : Zoom dans la couche limite près de la paroi des profils de température des trois fluides.....	77
Figure 4.21 : Zoom dans la couche limite près de la paroi des profils de densité des trois fluides.....	77
Figure 4.22 : profil de la vitesse de H ₂ dans la couche limite.....	79
Figure 4.23 : profil de la vitesse de H ₂ dans le Bulk.....	80
Figure 4.24 : profil de la température de H ₂ dans le Bulk.....	80
Figure 4.25 : profil de la vitesse de H ₂ dans le Bulk pour des t/ta varies entre 1,2 et 5.....	81
Figure 4.26 : profil de la température de H ₂ dans le Bulk pour des t/ta varies entre 1 et 2....	81
Figure A 5.1 : Courbe de pression de vapeur de CO ₂ . Le point critique est marqué par un point noir sur la courbe d'équilibre liquide-vapeur.	105
Figure A 5.2 : Courbe de pression de vapeur de l'acétylène. Le point critique est marqué par un point noir sur la courbe d'équilibre liquide-vapeur.	105
Figure A 5.3 : Courbe de pression de vapeur de l'éthane. Le point critique est marqué par un point noir sur la courbe d'équilibre liquide-vapeur.	106
Figure A 5.4 : Courbe de pression de vapeur de l'hydrogène. Le point critique est marqué par un point noir sur la courbe d'équilibre liquide-vapeur.	107

NOMENCLATURE

Lettres latines	Signification
A	Amplitude critique
a	Constante de l'équation de Van Der Waals
b	Covolume (équation de Van Der Waals)
c'_{01}	Vitesse du son dans le gaz parfait équivalent
c'_0	Vitesse du son dans le fluide supercritique
c	Célérité du son
C_p	Capacité calorifique à pression constante
C_v	Capacité calorifique à volume constant
e	Energie
F	Energie libre
L	Distance d'écoulement du fluide
P	Pression
P^*	Pression au premier pas correcteur
P^{**}	Pression au deuxième pas correcteur
P_c	Pression critique
P_r	Nombre de Prandtl
q	Terme source d'énergie
S	Entropie
S_i	Source de quantité de mouvement
t	Temps
t_a	Temps acoustique
t_d	Temps diffusif
T	Température
T^*	Température au pas prédicteur
T^{**}	Température au deuxième pas correcteur

T_c	Température critique
U	Energie interne
u	Vitesse du fluide
u^*	Vitesse au pas prédicteur
u^{**}	Vitesse au premier pas correcteur
u^{***}	Vitesse au deuxième pas correcteur
v	Volume spécifique
v_c	Volume critique
V	Volume
x	Abscisse
z	Variable d'espace intérieur

Lettres grecques	Signification
ε	Epaisseur de la couche limite thermique pour le gaz parfait
η	Viscosité dynamique
γ	Rapport des chaleurs spécifiques pour le gaz parfait
Γ	Rapport des chaleurs spécifiques pour le gaz réel
κ	Coefficient de diffusion thermique
λ	Conductivité thermique
μ	Distance au point critique
μ_s	Viscosité de cisaillement
ν_0	Viscosité cinématique
ω	Paramètre de perturbation
ρ	Densité
ρ^*	Densité au premier pas correcteur
ρ^{**}	Densité au deuxième pas correcteur
ρ_c	Densité critique
τ	Temps d'homogénéisation thermique pour le fluide supercritique
τ_1	Temps de diffusion thermique
τ_2	Temps de relaxation
ξ	Longueur de corrélation
χ_T	Coefficient de compressibilité thermique
σ_{ij}	Tenseur des contraintes

Indices, exposants et notations particulières	Signification
$()^i$	Variables dimensionnées
$()^n$	Variables au pas de temps n
$()^{n+1}$	Variables au pas de temps n+1
$()_i$	Variables au point de discrétisation i
$(\tilde{ })$	Variable intérieure
$()_t$	Dérivée première d'une variable par rapport au temps
$()_x$	Dérivée première d'une variable par rapport à x
$()_{xx}$	Dérivée seconde d'une variable par rapport à x

ABREVIATION

Abréviation	Signification
ASES	Aerosol Solvant Extraction System
Br	Brôme
C	Carbon
C ₂ H ₂	Acétylène
C ₂ H ₆	Ethane
CO	Monoxyde de Carbone
CO ₂	Dioxyde de Carbone
CVD	Chemical Vapor Deposition
EP	Effet Piston
ESA	European Space Agency
FSC	Fluide Supercritique
GAS	Gaseous Anti Solvant
H ₂	Hydrogène
ISS	International Space Station
Lox	Oxygène Liquide
LTMPF	Low Temperature Microgravity Physics Facility
MAP	Microgravity Application Promotion
NASA	National Aeronautics and Space Administration
O ₂	Oxygène
PC	Point Critique
PISO	Pressure Implicit with Splitting of Operators
RESS	Rapid Expansion of Supercritical Solution
RG	Renormalisation Group

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

La maîtrise des techniques et technologies complexes donnant accès à l'espace est jugée de plus en plus nécessaires par les grandes puissances industrielles mondiales pour renforcer leur position de prééminence [01]. D'où un intérêt croissant pour l'expérimentation en apesanteur. Cet attrait repose sur les critères suivants : possibilité de mesurer avec précision certains paramètres thermophysiques inaccessibles en pesanteur normale (Coefficients de tension superficielle ou de transport) [02] ; possibilité de mettre en évidence et d'observer des comportements hydrodynamiques originaux (Instabilités d'un nouveau type) [03] ; possibilité d'étudier l'évolution de certains processus (solidification, croissance cristalline) [04] ; exploration de certaines régions des diagrammes de phases (verre).

Les missions spatiales américaines et soviétiques (Apollo, Skylab Soyouz, Salyout 4 et Salyout 5) sont à l'origine des expériences réalisées en apesanteur (1975) [01]. Par la suite sont apparus les programmes soviétiques d'élaboration de matériaux en microgravité à bord des stations spatiales Salyout 6 et Salyout 7 (1978-1982) puis le premier envoi en octobre 1983 du module pressurisé Spacelab par l'agence spatiale européenne. Actuellement, les russes poursuivent leur programme d'élaboration de matériaux à bord des satellites automatiques Photon et de la station orbitale Mir. Le projet européen Columbus prévoit des laboratoires permanents destinés à la réalisation d'expériences dont la répétitivité et la durée seront choisies à loisir.

L'expérimentation en microgravité ouvre deux volets de recherche. Un premier volet concerne l'étude des phénomènes physico-chimiques fondamentaux: Instabilités hydrodynamiques, transport de chaleur et de matière. Dans ce cas, le principal intérêt est de comprendre les mécanismes régissant ces phénomènes (structuration de la matière) [05] et [06]. Un second volet de recherche a trait à la technologie et peut aider à l'élaboration de nouveaux matériaux et à élucider les problèmes liés à la gestion des fluides à bord des systèmes en orbite (propulsion cryogénique, comportement des ergols dans les réservoirs, échangeurs thermiques). En pratique, l'apport de la microgravité peut se manifester par l'obtention de matériaux nouveaux ou améliorés pouvant intéresser l'industrie. De plus, la mesure précise de certains paramètres thermophysiques peut être d'un apport précieux pour l'optimisation de certains procédés d'élaboration au sol.

A cet égard, la mécanique des fluides est une discipline clé pour la compréhension et l'interprétation des expériences en microgravité. En effet cette discipline a joué un rôle de pionnier dans la résolution des systèmes d'équations aux dérivées partielles non-linéaires, et, en contraste avec les équations de base régissant les autres branches de la physique mathématique, celles gouvernant le mouvement des fluides sont non-linéaires, qu'on tienne compte ou pas de la viscosité et de la compressibilité. Les solutions exactes sont de ce fait rares pour les problèmes de mécanique des fluides.

Un moyen d'étudier les effets de l'apesanteur réside dans la simulation numérique des phénomènes mis en jeu. C'est dans ce cadre que se situe le principal volet de notre travail qui consiste à résoudre numériquement les équations de Navier Stokes instationnaires à faible nombre de Mach, ainsi que l'équation de conservation de l'énergie et une équation de conservation des espèces.

Le présent travail traite donc de l'étude numérique de la phase acoustique de la propagation d'une perturbation thermique de paroi, dans un fluide supercritique.

En première démarche, On traite la bibliographie relative aux travaux précédents sur la physique des fluides critiques en général et la mise en évidence de mécanismes nouveaux de transport de chaleur en particulier. Les fluides supercritiques font l'objet, depuis près d'un siècle, de plusieurs études dans des domaines très variés. En effet pour des températures et des pressions supérieures à celles du point critique, les notions de liquide et de gaz deviennent indissociables : le fluide supercritique devient aussi dense que le liquide tout en conservant certaines propriétés des gaz. Ce caractère intermédiaire des fluides supercritiques, s'il constitue parfois un avantage technique (croissance cristalline, fabrication de poudres fines, dépôts de films fins, extraction d'un polluant...), engendre en contrepartie un comportement hydrodynamique très complexe et souvent paradoxal.

Quand on s'approche du point critique, la diffusivité thermique tend vers zéro, et donc on s'attend à un temps très grand pour avoir une homogénéisation de la température du fluide. Or, c'est l'inverse qui a été observé par des expériences effectuées en microgravité, et qui montrent qu'en absence de la convection associée à la sédimentation, le transfert de chaleur est très rapide en s'approchant du point critique. Cet effet inattendu définit un mécanisme spécifique de transport qui pourrait être différencié des transports de chaleur classique comme la conduction, la convection ou le rayonnement. Il s'agit de l'Effet Piston ou convection thermo acoustique [07], [08] et [09] dû au chauffage adiabatique du fluide par l'expansion des couches limites thermiques hyper compressibles (la compressibilité isotherme tend vers l'infini au point

critique). Une problématique est ajoutée à ce qui était déjà dit, et qui sera détaillée dans le *Chapitre 1*, par ailleurs, cette problématique fait l'objet de l'étude relatée dans ce manuscrit.

Le traitement numérique des équations de Navier-Stokes couplées à celles de l'énergie et de l'état (décrit dans le *Chapitre 2*) régissant l'écoulement confiné de plusieurs gaz supercritiques soumis à une perturbation thermique. L'étude consiste à déterminer l'évolution des variables thermomécaniques au cours du temps et à mettre en évidence de nouveaux mécanismes de transport de chaleur en l'absence de gravité, en dehors de la diffusion. Dans ce cadre, on fait la mise en équation du problème étudié en utilisant une méthode numérique avec des algorithmes robustes, efficaces et relativement précis. Nous avons fait le choix de la méthode des différences finies afin de discrétiser et de résoudre les différentes équations avec un algorithme de couplage vitesse pression PISO [10]. L'écriture des conditions aux limites permet la description des phénomènes mis en jeu. Le code numérique utilisé est ensuite présenté.

Le *Chapitre 3* est le dernier, présente les résultats issus des simulations numériques. On propose alors une interprétation qualitative et quantitative des phénomènes observés à partir des résultats obtenus.

Étude

Bibliographique

ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE

L'étude des phénomènes critiques a commencée depuis plus de 180 années par des observations de la phase supercritique par (*Cagniard de la Tour, 1822*) et le point critique de CO₂ (*Andrews, 1869*) [11]. Bientôt par la suite, (*Van der Waals, 1873*) a développé son équation d'état et l'a appliquée au point critique liquide-gaz. Cela a été étendu plus tard pour décrire une grande gamme des autres points critiques observés dans les systèmes solides (*Landau, 1937; Brout, 1965*). Le concept du paramètre d'ordre ([12] paramètre extensif nul dans la phase la plus désordonnée et non nul dans la phase ordonnée) a été introduit par (*Landau, 1937*). Ce champ classique ou moyen a fait des suppositions inoffensives apparemment que l'énergie libre dans la région critique avait une expansion analytique dans le paramètre d'ordre et ces fluctuations thermodynamiques pourraient être négligées. La minimisation de cette énergie libre a menée à une équation d'état et à des prédictions explicites pour les exposants critiques caractérisant le comportement singulier des propriétés thermodynamiques au point critique.

Pendant que des techniques expérimentales plus précises étaient développées, il est devenu évident que le comportement des systèmes réels était contradictoire avec les prédictions de ce modèle. (*Guggenheim, 1945*) a démontré cette difficulté en prouvant que la forme de la courbe de coexistence d'un système fluide n'est pas parabolique comme été prédit par la théorie. Sur le côté théorique, (*Onsager, 1944*) a obtenu la solution exacte du modèle bidimensionnel_2D_le modèle d'*Ising* montre également le comportement singulier sensiblement différent. Cette solution prédit que la chaleur spécifique dans le zéro champ magnétique divergera logarithmiquement au point critique, contrairement à la prédiction de la théorie du champ moyen qui admette seulement une discontinuité d'étape. Dans les années suivantes, les expériences de (*Buckingham et Fairbank, 1961; Voronel et al, 1964; Moldover et al, 1965*) appuyer par les calculs numériques (*See, Fisher, 1964*), pour un réexamen ont menées à l'hypothèse d'échelle de (*Widom, 1965*) affirmant que le potentiel thermodynamique à proximité d'un point critique est une fonction homogène généralisée afin de définir des rapports entre les exposants critiques a associé aux différentes quantités singulières. Aussi, le concept d'universalité a été introduit, en combinant les points critiques des différents systèmes dans des classes discrètes ayant le même comportement singulier par (*Kadanoff, 1966; Griffiths et Charron, 1970*).

Une découverte importante est obtenue avec l'application du groupe technique de Renormalisation_RG_ à la théorie des phénomènes critiques par (*Wilson, 1971*), et collègues (*Wilson et Fisher, 1972; Wilson et Kogut, 1972*). Cette approche a établi la base théorique

pour les lois d'échelle et les concepts de l'universalité qui utilisent les idées de phase-espace des flux et des points fixes. En combinant les idées RG avec les méthodes théoriques du champ, de nouveaux outils computationnels ont été développés qui ont confirmés des premiers résultats et ont menés à beaucoup de prédictions supplémentaires.

L'approche RG évite la supposition de l'analyticité et la remplace par un modèle des effets thermodynamiques croissants de fluctuation. La théorie a aussi été étendue pour décrire le comportement de propriétés dynamiques telles que la conductivité thermique et la viscosité près du point critique (*Halperin et al, 1976*). (*Wilson, 1971*) a également noté que la méthode RG pourrait être employée pour décrire des corrections d'échelle. (*Wegner, 1972*) a utilisé cette approche pour déterminer la forme des corrections au comportement asymptotique de la loi d'échelle tant qu'on s'éloigne loin du point critique.

Dans des périodes plus récentes, il s'est apparu clairement que la détermination du comportement asymptotique limiteur de diverses propriétés thermophysiques exige des mesures de précision très étroites aux transitions de phase de second ordre où la phase ordonnée transforme d'une manière continue en phase désordonnée. Des mesures en solides près des points critiques magnétiques sont compromises par les imperfections d'impureté et en cristal, alors que la pesanteur tord la densité locale et gêne des mesures dans les fluides purs (*Voronel et Gitterman, 1965 ; Levelt Sengers et al, 1977*). Dans les fluides, beaucoup de mesures au sol ont été effectuées sur des échantillons de petite taille verticale pour réduire au maximum les effets de la pesanteur. Cependant, si la taille d'échantillon est trop petite, les effets de la taille finie deviennent importants pendant la transition est atteinte. Ainsi, dans les systèmes pleins (solides ou liquides), les mesures deviennent sensiblement tordues près du point critique. L'interprétation des mesures de précision plus loin à partir de la transition doit également prendre en considération des corrections non-asymptotiques. Ces problèmes l'ont rendu difficile d'exécuter des expériences précises pour examiner des prédictions théoriques modernes des phénomènes critiques avec haute précision.

L'effet de la pesanteur près du point critique liquide-gaz a été ré-revue par (*Moldover et al, 1979*). Ces chercheurs ont conclu que, dans l'espace, une amélioration de la résolution de la température de trois à quatre ordres de grandeur était réalisable avant que les effets de pesanteur soient encore devenus grands, selon les détails de l'expérience. Les efforts prendre l'avantage d'un environnement de gravité spécifique faible ont commencé au milieu des années 80 par les fusées-sondes qui ont fourni une période très courte environ six minutes de pesanteur réduite. Avec le développement de la navette spatiale en 1981, des études plus ambitieuses de réduire la pesanteur ont pu être réalisées pendant les vols de durée de deux semaines. Plus récemment, la station spatiale MIR de la Russie a permis à des études de long-durée d'être réalisées.

Plus récemment, des modèles théoriques détaillés ont été développés pour décrire le croisement du comportement asymptotique près du point critique au comportement du champ moyen et ce, dans le cas des propriétés statiques (*Bagnuls et Bervillier, 1985; Dohm, 1985, 1987; Bagnuls et al, 1987; Schloms et Dohm, 1989*) et pour les propriétés dynamiques (*Dohm et Folk, 1980, 1981*).

De nouvelles méthodes numériques sont apparues afin de résoudre les équations qui ont trait à ces problèmes. Ainsi, (*Chenoweth et Paolucci, 1986*), [13] ont utilisé un procédé de filtration afin d'étudier la convection dans une cavité contenant un gaz; soumise à un fort gradient de température. (*Issa, 1986*) a proposé l'algorithme PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators) pour résoudre les équations de Navier-Stokes dans le cadre de réactions chimiques de surface [10]. Cet algorithme a été appliqué à certains problèmes thermoacoustiques tels que les interactions entre la croissance cristalline et la compressibilité de la phase mère [04] [14], ou bien les écoulements générés dans les gaz parfaits par des sources de chaleur volumétriques [15].

Ce domaine de recherche a très peu évolué du point de vue numérique du fait que les méthodes classiques habituellement utilisées pour les écoulements compressibles, ont très montré leurs limites dans leur application aux écoulements à faible nombre de Mach (*Djennaoui, 1990*).

La mise en évidence de ce processus par l'étude numérique, confortée par les résultats de l'étude analytique a été confirmée par les résultats d'expériences en apesanteur [16]. En effet, (*Djennaoui, 1990*) l'étude asymptotique a permis de retrouver les mêmes profils originaux, et les seules différences observées sont essentiellement dues à des phénomènes du second ordre. Ce type d'étude pourra s'étendre à d'autres fluides principalement les cryogènes dont on doit assurer un contrôle thermique rigoureux. L'hydrogène liquide constitue, en ce sens un bon exemple de fluide très instable vis-à-vis de la plus infime perturbation thermique et dont il faudra assurer le stockage en apesanteur dans les meilleures conditions de sécurité [17].

Beaucoup d'organismes gouvernementaux se sont engagés dans des accords coopératifs de développer et d'employer des équipements de vol en raison du besoin continu d'un appareil très sophistiqué même plus coûteux pour réaliser des études en microgravité (*Zappoli et al, 2003*). En quelques années, l'ISS la Station Spatiale Internationale devrait être accompli, en accordant davantage de long-durée aux études. Plusieurs groupes ont organisés et développés des installations pour les futures études des phénomènes critiques sur l'ISS. Ces dernières années, les États-Unis d'Amérique NASA ont fourni le placement et la consolidation pour le développement de la Facilité physique de microgravité des basses températures LTMPF pour l'opération sur l'ISS. De futures investigations sur la transition lambda de ^4He , le point critique liquide-gaz de ^3He , et le point tri-critique ^3He - ^4He sont prévues pour que ce service examine de diverses prédictions de la théorie RG.

La dynamique du changement de phase du volume et des systèmes de taille finie également a été explorée dans des expériences bien contrôlées près des points critiques (*Weichman et al, 2003*). Un comportement bien plus complexe d'affichage de ces résultats qu'est vu dans les propriétés statiques, alors que les résultats ne suivent pas les prévisions d'échelle et de l'universalité, on s'attend à ce qu'ils obéissent des généralisations de ces concepts.

La recherche expérimentale moderne sur des phénomènes critiques statiques vise à examiner la théorie de RG non seulement dans le régime asymptotique mais également dans le régime de croisement, où les corrections aux contributions d'échelle et d'origine rivalisent d'une façon complexe. Près du point critique, la théorie prévoit que l'énergie libre, qui est généralement une fonction de deux variables indépendantes, peut être exprimée comme fonction universelle d'échelle d'une variable mesurée et d'une origine non critique. Il est important de noter que cette propriété simple de l'universalité de deux facteurs d'échelle est valide pour les systèmes isotropes comme des fluides mais pas pour les systèmes anisotropes avec la symétrie non cubique (*Chen et Dohm, 2004*). Dans le cas idéal, les expériences en microgravité visent à déterminer avec précision les exposants et les amplitudes critiques dans la région asymptotique pour examiner les prévisions théoriques les plus centrales. Une fois que les valeurs asymptotiques sont connues, le comportement de croisement pour un fluide donné peut être déterminé et comparé aux théories de croisement.

Les spécificités thermodynamiques des fluides supercritiques engendrent des comportements dynamiques (*Pierre Carlès, 2006*) surprenants et souvent paradoxaux. Par exemple, leur compressibilité est très grande bien que leur masse volumique soit en même temps très élevée, ce qui les rend intermédiaires entre des liquides et des gaz. En particulier, ils sont le siège d'un quatrième mode de transport de la chaleur, l'effet piston, couplage thermoacoustique découvert en 1990 et qui gouverne entièrement la relaxation de la température sur des échelles de temps bien plus courtes que la diffusion ou la convection naturelle.

Sur la base de ce qui précède, une étude numérique concerne plusieurs fluides à leurs états critiques, soumis à une perturbation thermique fait l'objet de l'étude illustrée dans ce mémoire, afin de savoir le comportement thermoacoustique de ces fluides.

L'étude numérique réalisée au préalable tient compte seulement du CO₂ supercritique [17], alors que dans notre travail, nous allons étendu l'étude numérique à des fluides qui ont la température critique proche de celle du CO₂, tels que l'éthane C₂H₆ et l'acétylène C₂H₂, puis à des fluides qui ont la température critique loin de celle du CO₂ tel que l'hydrogène H₂.

Chapitre I

Phénomène Critique

Position du Problème Physique

CHAPITRE I

PHENOMENE CRITIQUE

POSITION DU PROBLEME PHYSIQUE

I-1 Introduction

L'objectif de ce *Chapitre* est de donner d'une part une brève présentation des fluides supercritiques, des différentes représentations thermodynamiques de l'état supercritique, quelques principaux comportements dynamiques particuliers qu'un fluide supercritique est susceptible de présenter, ainsi que quelques méthodes classiques pour calculer les propriétés de ces fluides, afin de familiariser la compréhension de la notion des phénomènes critiques. Et, d'autre part une description du phénomène d'apesanteur (microgravité), ses effets physiques (précisément sur le transport de chaleur) ; la mise en évidence de l'effet piston, le domaine d'application de la micropesanteur. Enfin la présentation du problème physique de ce travail et la procédure de l'étude, et on termine par quelques abaques de référence.

I-2 Propriétés des fluides supercritiques

Un corps pur, est un système constitué d'une seule espèce chimique, qui peut exister en équilibre thermodynamique, dans des états physiques différents : gazeux, liquide, solide ; on dit aussi sous différentes phases, lesquelles sont des parties homogènes qui ont même propriétés physiques et chimiques, ses états d'équilibre étant définis par la donnée de deux variables d'état. Les plus naturelles de ces variables sont par exemple la pression et la température, ou la pression et la densité (au sens de la masse volumique), on peut aussi choisir n'importe quel couple incluant des fonctions d'état telles que l'énergie interne ou l'entropie.

La distinction entre ces différents états physiques se fait facilement, mais on peut se trouver dans des situations plus difficiles pour distinguer entre un liquide et un gaz ; c'est lorsque le composé pur est sous pression et que le ménisque habituel séparant le liquide de la phase gazeuse est non visuel. C'est une réelle continuité entre ces deux phases, et qui représente un état de fluide appelé *fluide supercritique*. Ce résultat a été trouvé depuis 1822 par le Baron Cagniard de la tour [18], qui avait observé, qu'en chauffant de l'éther, de l'alcool ou de l'eau dans des tubes fermés (volume constant), un accroissement de quantité de liquide se produisait tout d'abord, suivi à plus haute température d'une disparition graduelle et totale de tout le liquide et le gaz, remplacés par une unique phase homogène. Il étudiait entre autre l'influence des températures sur la vaporisation des liquides et il déterminait le point critique de l'éther, de l'alcool et de l'eau.

Faraday et Gibbs ont aussi remarqué dans les résultats de leurs expériences le signe d'une réelle continuité entre les états liquides et gazeux. Ce n'est qu'avec les travaux d'Andrews [19] et puis la thèse de van der Waals en 1873 [20] 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'états d'un corps pur en fonction des trois variables thermodynamiques : pression, volume et température (P, V, T) (Figure 1.1).

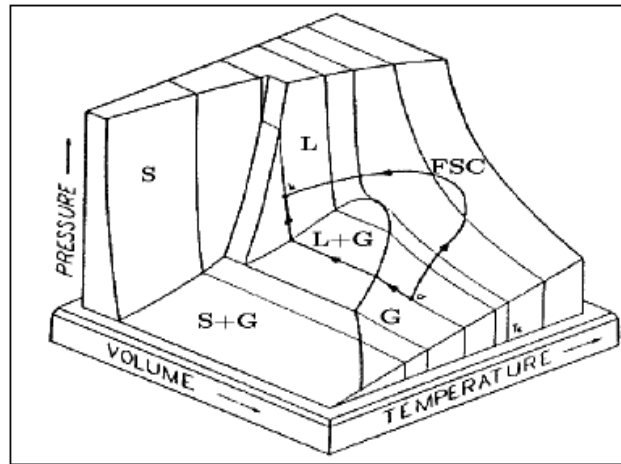


Figure 1.1: Surface d'états d'un corps pur [21]

S = phase Solide G = phase Gazeuse L = phase Liquide FSC = Fluide Supercritique

La projection de ce diagramme sur les plans (pression P et température T) (Figure 1.2), donne le classique diagramme de phases dans lequel on sépare trois zones correspondantes aux trois phases usuelles de la matière : Solide, Liquide et Gazeuse, séparées les unes des autres par des *Courbes de Coexistence*.

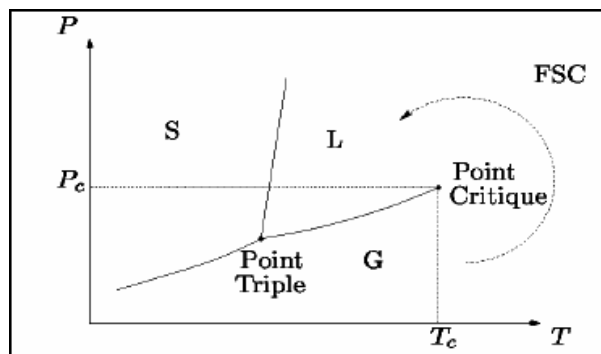


Figure 1.2 : Diagramme P, T d'un corps pur [21]

I-3 Le point critique et stabilité thermodynamique

La courbe de coexistence Liquide-Vapeur se termine par un maximum et donc les phases liquides et gaz ne sont pas totalement disjointes, mais on peut au contraire passer continûment de l'un à l'autre sans traverser la ligne de transition de phase en passant par la phase intermédiaire nommée phase *supercritique* (Figure 1.3). Le sommet de la courbe de vaporisation a été nommé par Andrew [19] « Point Critique » en raison de son caractère singulier. Ce point est repéré par les coordonnées notées P_c , ρ_c , T_c qui sont respectivement, la pression, la densité et la température critiques de ce corps. Ce point critique est défini comme un point où on perd la stabilité mécanique. On peut interpréter cette instabilité d'après la Figure 1.3 par :

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

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_T (T_c, P_c) = 0 \quad (\text{Point d'inflexion sur l'isotherme critique}) \quad (I.2)$$

$$\left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3}\right)_T (T_c, P_c) > 0 \quad (\text{Stabilité le long de l'isotherme critique de part et d'autre du point critique}) \quad (I.3)$$

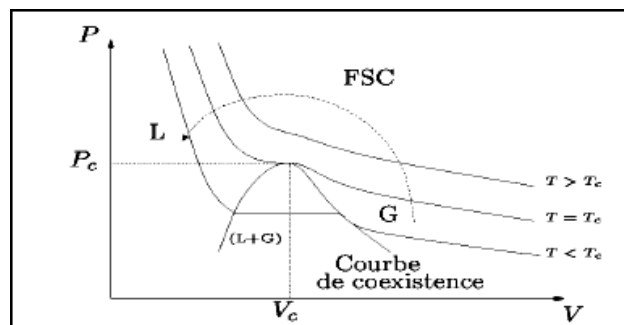


Figure 1.3 : Diagramme P, V d'un corps pur [21].

Les fluides supercritiques peuvent être décrits comme des fluides ayant une pression et une température supérieure à celles du point critique (PC). En raison de leur caractère intermédiaire entre les liquides et les gaz, ils possèdent des propriétés parfois paradoxales, qui tantôt rappellent celles des gaz par leur compressibilité et tantôt celles des liquides par leur densité.

Pour avoir une idée des coordonnées critiques de ces fluides, on cite dans le tableau ci-dessous celles de quelques corps.

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	3.316	0.114	41.45

Tableau 1.1 : Coordonnées du point critique de quelques corps [22].

Contrairement à la courbe de coexistence Liquide-Vapeur, la courbe de coexistence Liquide-Solide est probablement infinie. Personne n'a en fait jamais pu identifier de point critique sur cette courbe, et de nombreux chercheurs pensent actuellement que les liquides et les solides ont des propriétés de symétrie trop profondément différentes pour permettre l'existence d'un point critique Liquide-Solide. Il n'y'a donc pas de continuité des états liquides et solides, alors que c'est le cas pour les états liquide et gaz. L'existence d'un tel point marque la naissance d'un nouvel état (ou plus exactement la fin de la différenciation de deux états de corps pur suggère intuitivement une modification abrupte et profonde des caractéristiques du corps en question). Par exemple, sur la *Figure 1.3*, les isothermes tendent à s'aplatir localement au voisinage du point critique (T=T_c) avec (∂P/∂V)_T qui tend vers zéro quand on s'approche du point critique. Cette propriété est associée au fait que la stabilité mécanique d'un fluide pur est caractérisée par la concavité de son énergie libre F (F=U-TS, U désigne l'énergie interne et S l'entropie) en fonction du volume.

La condition de stabilité s'écrit alors :

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T = -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T > 0 \tag{I.4}$$

La valeur asymptotiquement nulle de (∂P/∂V)_T au point critique correspond donc à une perte de stabilité mécanique du fluide monophasique. Au dessous du point critique, le corps pur se sépare en deux phases distinctes qui retrouvent individuellement l'équilibre mécanique, et vu l'égalité de leur potentiel chimique, la stabilité thermodynamique est vérifiée.

En fait, pour qu'un fluide mono-constituant reste thermiquement et mécaniquement stable, il faut que sa compressibilité isotherme :

$$\chi_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right) = \left(V \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)\right)^{-1} \tag{I.5}$$

Soit positive, c'est à dire qu'un accroissement de pression entraîne une diminution de volume.

Dans la même perspective, dire que la dérivée seconde de l'énergie libre par rapport au volume devient nulle au point critique (équation (I.4)) revient à dire que la compressibilité du fluide γ est infinie, ce qui correspond à des fluctuations locales très rapides de la densité lorsqu'une variation isotherme de la pression est effectuée. Quand la grandeur caractéristique de ces fluctuations locales de la masse volumique atteint la longueur d'onde de la lumière d'observation, cela induit un phénomène d'*opalescence* au point critique (voir *Figure 1.4*).

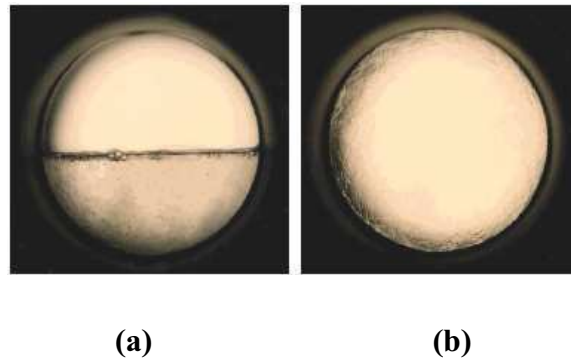


Figure 1.4 : (a) les 2 phases (liquide et gaz) clairement apparentes (ménisque) pour le CO₂. (b) avec un accroissement de température, lorsque la température et la pression critiques sont atteintes, les phases (liquide et gaz) ne sont plus visibles, la phase supercritique apparaît (*Laboratoire LCSG, Université de Leeds*) [21].

Après cette brève présentation du point critique, on peut se contenter à définir ce point comme un point singulier, dont quelques propriétés du fluide présentent des comportements asymptotiques divergents ou évanescents.

I-4 Les phénomènes critiques

Comme on vient de le voir, un fluide proche de son point critique a une compressibilité isotherme qui tend vers l'infini. D'autres propriétés ont aussi le comportement singulier. Parmi ces quantités, on peut citer la capacité calorifique à pression constante C_p (voir relation de Mayer généralisée, §1.4.1), la capacité calorifique à volume constant C_v , la conductivité thermique λ ou la longueur de corrélation ζ qui mesure l'extension spatiale des fluctuations de densité. En revanche, la diffusivité thermique κ ou la célérité du son C tendent vers zéro (voir §1.4.1).

La tension de surface (dans le domaine diphasique) tend aussi vers zéro, ce qui peut se traduire par la grande similitude des phases liquide et gaz 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 que l'on nomme *Phénomènes Critiques* ; ils constituent les différents mécanismes par lesquels le fluide supercritique se prépare à la transition de phase à l'approche du point critique.

I-4-1 Exposants critiques

Les phénomènes critiques reposent en grande partie sur la notion d'Exposants Critiques, et de lois d'Echelles [23]. On caractérise la divergence des paramètres de transport en donnant cinq informations : le paramètre considéré (\mathbf{X}), un chemin particulier sur la surface d'état pour approcher le point critique (\mathbf{C}), une variable caractérisant la proximité au point critique (\mathbf{r}), une amplitude nommée amplitude critique (\mathbf{A}) et un exposant de divergence critique (\mathbf{e}). La singularité en question est alors exprimée, pour une valeur de \mathbf{X}_c finie (l'indice \mathbf{c} indique une valeur prise au point critique), sous la forme de la loi asymptotique suivante:

$$\left| \frac{\mathbf{X} - \mathbf{X}_c}{\mathbf{X}_c} \right| = \mathbf{A} \left| \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_c}{\mathbf{r}_c} \right|^{\pm \mathbf{e}}$$

La vitesse de convergence ou de divergence dépend de la façon dont on s'approche du point critique, il est donc très important d'avoir une précision sur le chemin \mathbf{C} .

Des études expérimentales ont mené à une caractérisation empirique assez précise des amplitudes et exposants critiques pour les divers paramètres qui divergent au point critique et pour les divers chemins qui s'en approchent. C'est la différence entre la valeur des exposants trouvée expérimentalement et celle prévue par l'analyse dimensionnelle qui a conduit les physiciens dès les années 1930 à réaliser qu'il se cachait quelque chose de fondamental derrière cette discordance. Ce n'est que dans les années 70 avec l'application aux phénomènes critiques de la théorie des Groupe de Renormalisation [24] (c'est une théorie qui a été développée en 1957 par K.G.Wilson), qu'un argument théorique a pu en fixer les valeurs. Il a été ainsi démontré que tous les fluides possédaient les mêmes exposants au point critique liquide-vapeur et en particulier que seuls deux de ces exposants étaient indépendants, la vitesse de n'importe quel paramètre sur n'importe quel chemin pouvant être déduite de ces deux-là seulement. De plus il a été prouvé que la donnée de seulement deux amplitudes propres au fluide suffisait à caractériser totalement son comportement critique. Cette réduction de la spécificité du fluide à seulement deux amplitudes critiques est désignée sous le nom d'*Universalité Critique*, cette universalité de comportement s'étend même au-delà des systèmes fluides.

La théorie des Groupes de Renormalisation prévoit que les comportements du système au voisinage du point critique sont identiques pour une même *Classe d'Universalité*, c'est à dire qu'on peut regrouper les différents systèmes physiques représentant des transitions de phase les plus variées, en un petit nombre de groupes nommé *Classe d'Universalité*, caractérisé par un certain ensemble de valeurs d'exposants. On définit les *Lois d'Echelle* comme des relations entre les exposants critiques. Cette loi présente un caractère d'universalité encore plus grand.

Les valeurs actuellement admises des exposants critiques universels sont présentées dans le *Tableau 1.2*. La divergence critique d'une propriété est définie selon un chemin thermodynamique spécifié. Si une quantité diverge pour un chemin donné, elle garde ce critère de divergence pour tout autre chemin ; et la correspondance entre un exposant d'une divergence le long de l'isochore critique (χ_T , C_v , ξ) et l'exposant de la même divergence le long d'un autre chemin (isotherme critique ou la courbe de coexistence par exemple), peut être déterminée facilement [24]. Par contre quand le chemin est plus complexe, il faut connaître une équation d'état qui représente 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	$\kappa_T = \Gamma \epsilon ^{-\gamma}$	$\gamma = 1.239 \pm 0.002$
Capacité calorifique à volume constant	Isochore critique	$C_v = A \epsilon ^{-\alpha}$	$\alpha = 0.110 \pm 0.003$
Ecart des densités du liquide et du gaz	Courbe de coexistence	$\rho_l - \rho_g = 2B \epsilon ^{-\beta}$	$\beta = 0.320 \pm 0.002$
Fonction de corrélation	Point critique	$h(r) = r^{2-d-\eta}$	$\eta = 0.031 \pm 0.004$
Longueur de corrélation	Isochore critique	$\xi = \xi_0 \epsilon ^{-\nu}$	$\nu = 0.630 \pm 0.001$
Ecart à la pression critique	Isotherme critique	$ \Delta P = D \Delta\rho ^\delta$	$\delta = 4.8 \pm 0.02$

Tableau. 1.2 -Propriétés au voisinage du (PC) avec les exposants associés [24]. Γ , A , B , ξ_0 et D sont les cofacteurs caractérisant la substance étudiée, $h(r)$ est la fonction de corrélation qui mesure la corrélation statique entre la densité en un point et la densité à une distance r de ce point. On note $\epsilon = \frac{T - T_c}{T_c}$.

On peut déduire aussi du tableau d'autres comportements asymptotiques, par exemple si on considère la relation de Mayer généralisée [25] :

$$C_p - C_v = -\frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T$$

Comme C_v diverge avec un exposant plus faible ($\alpha \approx 0.11$), et que $\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho$ est pratiquement constant à l'approche du point critique [26], C_p diverge comme la compressibilité isotherme avec un exposant ($\gamma \approx 1,24$).

Pour la célérité du son, elle s'écrit sous la forme suivante [27] :

$$C^2 = \frac{T_c}{\rho_c^2 C_v} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T$$

Elle tend vers zéro au point critique comme $\frac{1}{\sqrt{C_v}}$, avec un exposant égal à $\alpha / 2 \cong 0.05$.

La valeur quadratique moyenne des fluctuations de densité augmente très rapidement au voisinage du point critique, ce qui explique l'importante corrélation entre deux positions de deux particules différentes. La longueur de corrélation ξ diverge donc d'une façon significative au voisinage du point critique [23] :

$$\overline{[\rho(r) - \bar{\rho}]^2} \approx (\partial \rho / \partial P)_T \rightarrow \infty$$

Autrement dit, les particules fortement éloignées les unes des autres doivent être fortement corrélées pour provoquer un changement de densité d'une façon importante.

La viscosité de cisaillement $\mu_s \approx \mu_0 \Delta T^{-\eta}$ et la conductivité thermique $\lambda = \lambda_0 \Delta T^{-(\gamma-v-\eta)}$ ($\gamma-v-\eta > 0$) divergent toutes les deux au point critique, et cela peut être expliqué à l'aide des arguments issus de la thermodynamique et de la physique statique [24].

Pour la viscosité du volume, certains auteurs prédisent sa divergence [28] [29], mais d'autres [30] montrent que celle-ci n'a d'influence pratique sur le comportement du fluide qu'à des proximités extrêmes du point critique. La diffusivité thermique $\kappa = \lambda / \rho C_p$ tend vers zéro au voisinage du point critique, car C_p diverge plus vite que la conductivité thermique λ , ce qui fait que la relaxation de la température par diffusion thermique est extrêmement lente dans les fluides supercritiques.

I-4-2 Les modèles classiques

Le modèle de van der Waals, basé sur une équation d'état très connue [20], est le premier modèle qui a permis une description qualitative de l'équilibre des phases liquide-gaz et du comportement des fluides proche du point critique. Celui-ci s'avère être un bon outil pour l'interprétation des divergences critiques. C'est un cas particulier d'une classe de modèles plus vaste appelés *Les Modèles classiques* ou *les Modèles de 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 [31]. Leur nom « Champ Moyen » provient de la propriété commune de ces modèles et qui se base sur le fait que les interactions moléculaires n'agissent sur une molécule donnée que sous la forme d'un Champ Moyen, indépendant de la position de la molécule vis-à-vis de ses voisines. Cela était démontré par la physique statistique. Cette propriété ne permet pas de prendre en considération la répartition spatiale des molécules dans l'analyse des interactions moléculaires. Cette simplification abusive peut expliquer l'insuccès de ces modèles.

On considère une équation d'état d'un fluide, écrite sous la forme générale $P = f(T, \rho)$. Comme on vient de le préciser, l'hypothèse de champ moyen est associée au caractère analytique de la fonction f au point critique. On peut donc écrire, pour de petits écarts de température $\delta T = T - T_c$ et de densité $\delta \rho = \rho - \rho_c$:

$$\begin{aligned} P = P_c &+ \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^c \delta T + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T^c \delta \rho \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_\rho^c \delta T^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T \partial \rho} \right)_\rho^c \delta T \delta \rho + \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2} \right)_T^c \delta \rho^2 \right\} \\ &+ \frac{1}{6} \left\{ \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^3} \right)_\rho^c \delta T^3 + 3 \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^2 \partial \rho} \right)_\rho^c \delta T^2 \delta \rho + 3 \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T \partial \rho^2} \right)_\rho^c \delta T \delta \rho^2 + \left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3} \right)_T^c \delta \rho^3 \right\} + \dots \end{aligned}$$

L'indice supérieur c indique des quantités prises au point critique.

Si on se base sur les conditions critiques [équations (I.1)-(I.2)-(I.3)] le développement ci-dessus de la pression P devient :

$$\begin{aligned} P \cong P_c &+ \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^c \delta T + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_\rho^c \delta T^2 + \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T \partial \rho} \right)_\rho^c \delta T \delta \rho + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^3} \right)_\rho^c \delta T^3 \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T^2 \partial \rho} \right)_\rho^c \delta T^2 \delta \rho + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial T \partial \rho^2} \right)_\rho^c \delta T \delta \rho^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3} \right)_T^c \delta \rho^3 + \dots \end{aligned} \quad (I.6)$$

Par exemple pour déterminer l'écart 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 l'on obtient :

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

On remarque que cette valeur trouvée de δ est d'une part indépendante de la nature particulière de la fonction $P = f(T, \rho)$ donc de l'équation d'état; et d'autre part, elle est éloignée de la valeur expérimentale $\delta = 4.80$ (voir *Tableau 1.2*). De la même manière, on peut chercher à déterminer l'exposant γ de divergence de la compressibilité isotherme

$\left(\chi_T = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T \right)$ le long de l'isochore critique, si on dérive l'équation (I.6) membre à membre par rapport à ρ et on impose $\delta \rho = 0$, on a alors :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T \partial \rho} \right)_\rho^c \delta T + \dots \quad \text{d'où } \gamma = 1$$

D'une façon similaire on peut généraliser et déterminer les autres exposants critiques.

On présente dans le *Tableau 1.3* la différence entre les exposants réels et les exposants prédits par les modèles classiques. Cette différence a été très tôt reconnue comme un échec des théories classiques à décrire correctement les phénomènes critiques. L'exposant classique ν ne peut pas être déduit de considérations purement thermodynamiques comme celles développées ci-dessus, mais provient d'une analyse de physique statistique.

Exposants Classiques	Exposants Réels
$\gamma = 1$	$\gamma = 1.239 \pm 0.002$
$\alpha = 0$	$\alpha = 0.110 \pm 0.003$
$\beta = 1/2$	$\beta = 0.320 \pm 0.002$
$\delta = 3$	$\delta = 4.8 \pm 0.02$
$\nu = 1/2$	$\nu = 0.630 \pm 0.001$

Tableau 1.3 : Comparaison des exposants critiques classiques et réels [24].

I-4-3 L'influence de la gravité et les anomalies de transport de la chaleur

I-4-3-1 Effet de la gravité

Comme on vient de le voir dans les paragraphes précédents, les fluides supercritiques ont un comportement étrange car à la fois aussi denses que des liquides et compressibles comme les gaz. L'association de ces deux propriétés est à l'origine de nombreux problèmes expérimentaux liés à la gravité.

Un fluide compressible se stratifie, sous l'effet de gravité, en couches de différentes densités, comme l'atmosphère et les océans sur de grandes échelles. En présence de gravité Zappoli *et al.* [32] ont montré qu'en configuration chauffée par le côté, cet effet était toujours responsable au sol 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 de température, sous l'effet de la gravité. Les mécanismes de transport de masse et de la chaleur à grande échelle (échelle de la cellule par exemple) s'effectuent via les instabilités convectives, masquant ainsi les autres mécanismes de transport possibles. La gravité joue donc un rôle primordial 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 via les instabilités convectives ne s'effectue plus, on doit s'attendre alors à de sévères difficultés d'homogénéisation des systèmes critiques puisque les effets de diffusion thermique sont quasi-inexistants.

I-4-3-2 Transfert de chaleur

La divergence de la conductivité thermique nous laisse croire 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 la température dépend de la diffusivité thermique $(\lambda/\rho C_p)$ qui tend vers zéro au point critique liquide-vapeur. Le temps de relaxation τ_2 tend vers l'infini, on s'attend donc à ce que le transport de chaleur se fasse très lentement.

Ce phénomène désigné sous le nom de *Ralentissement Critique* (« Critical Slowing Down »), a poussé vers le développement des expériences spatiales visant à mesurer certains paramètres avec une plus grande précision, en l'absence de l'effet de gravité, afin de supprimer tout effet dû à la convection.

Les résultats expérimentaux [33] [34] 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.

I-5 Effet piston

Les expériences sur les fluides purs critiques en microgravité sont donc le seul moyen pour l'étude complète de tous les aspects des phénomènes hors équilibre.

En 1990, après les confirmations expérimentales en microgravité [33], trois équipes différentes indépendantes [07], [08] et [09] donnent l'explication de ce phénomène. Onuki *et al.* [08] y relève que l'équation de transfert de la chaleur $(\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T)$ qui est pertinente pour un fluide incompressible, non enfermé mais maintenu à pression critique, ne l'est plus quand il s'agit d'un fluide compressible maintenu dans un volume fixé. Dans ce dernier cas, un changement d'entropie en n'importe quel endroit dans le volume de fluide provoque un changement de pression qui est à son tour engendre un changement adiabatique de température dans tout le volume. Il souligne que ce phénomène a déjà été décrit dans la littérature, mais comme il est négligeable pour un fluide à compressibilité usuelle, il a malheureusement aussi été négligé dans l'étude des fluides proches de leur point critique.

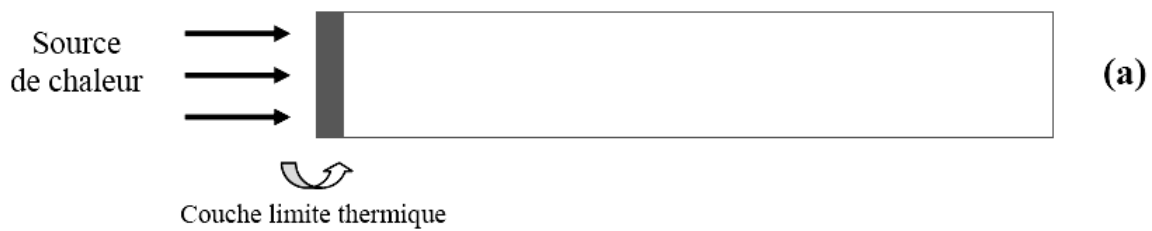
Dans un fluide incompressible, les variations d'énergie interne sont dues uniquement à des variations de température qui découlent du flux de chaleur imposé au fluide, alors que pour un fluide compressible, on doit tenir compte des variations adiabatiques de température et de densité dues aux variations de pression dans le temps [09]. Les effets adiabatiques sont dominants dans un fluide proche de son point critique, vu que sa compressibilité diverge.

Un nouveau mécanisme de transfert de la chaleur a été mis en évidence au sein des fluides supercritiques. Lorsqu'on soumet une cellule remplie de fluide critique à un chauffage local, seule la couche diffusif de fluide au voisinage de la paroi subira (par le seul transport diffusif) une augmentation de température. Cette couche peut se dilater d'autant plus facilement que le reste du volume de fluide est plus compressible. Elle agit comme un piston, provoquant une variation de pression qui se propage dans le fluide. La variation de pression est à son tour convertie en variation de température. Le reste du volume de fluide s'échauffe donc très rapidement et de manière homogène. Le processus impliqué est désigné sous le nom d'*Effet Piston* [07] et est directement lié à l'hyper-compressibilité et à la très faible diffusivité thermique des fluides proches de leur point critique.

L'équipe française [07] s'est basée essentiellement sur les méthodes de perturbation singulières appliquées aux équations de Navier-Stokes pour un fluide de van der Waals. Ils ont expliqué le mécanisme de l'Effet Piston de la façon suivante : lorsqu'on chauffe une paroi, la chaleur diffuse depuis sa source sur une faible épaisseur, le fluide soumis à cet échauffement se dilate fortement et comprime de façon isentropique le reste du fluide, qui subit alors une augmentation homogène de sa température. En fait le fluide dilaté contenu dans la couche limite agit comme un piston, entraînant la création d'un système d'ondes de compression qui se propagent dans tout le fluide; et la réponse première du système à une perturbation d'ordre thermique sur une faible épaisseur est donc mécanique. Le passage répétitif du champ acoustique continuellement produit, engendre l'apparition d'une vitesse faible du volume de fluide ainsi qu'une compression totale de tout le volume.

L'effet piston est alors le résultat d'un couplage thermomécanique, son développement dans une cellule confinée d'un fluide supercritique peut être expliqué suivant les schémas suivants :

-En microgravité, un fluide supercritique confiné dans une cellule est chauffé à l'une de ces extrémités, la chaleur amenée à l'extrémité diffuse dans une couche limite thermique de faible épaisseur, dans laquelle de très forts gradients de température apparaissent (*Figure 1.5.a*).



- La grande compressibilité du fluide provoquant la dilatation de la couche chaude, comprime d'une manière adiabatique le reste du fluide (*Figure 1.5.b*).



- La dilatation de la couche chaude agit comme un piston sur le reste du fluide d'où le nom de l'effet piston. On assiste à une augmentation rapide et homogène de la température dans toute la cellule (*Figure 1.5.c*).

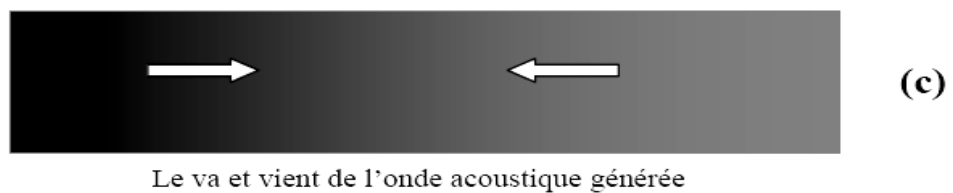


Figure 1.5 : Représentation schématique du mécanisme de l'Effet Piston (Le niveau de gris symbolise la température) [21].

En conclusion, par un mécanisme purement dynamique, un fluide qui diffuse très mal la chaleur peut néanmoins transporter de l'énergie thermique à très grande vitesse.

La relaxation de la température est donc de plus en plus rapide dans une cellule parfaitement isobare, lorsque l'on s'approche du point critique. Ce phénomène qui contraste avec le *Ralentissement Critique* de la diffusion est nommé l'*Accélération Critique* (« Critical Speeding Up »).

Un gradient de température résorbé dans la cellule, entraîne des gradients de densité, qui vont à leur tour être résorbés mais cette fois sur une échelle de temps plus longue qui est de l'ordre du temps de diffusion (ou de convection si elle est présente).

Le transport de chaleur a donc lieu sur l'échelle de l'Effet Piston (EP), mais il faut attendre un temps de l'ordre du temps de diffusion pour que le fluide redevient homogène et à l'équilibre.

Les résultats des simulations numériques présentés dans [32] ont ainsi permis d'informer l'hypothèse fautive selon laquelle l'EP disparaîtrait en présence de gravité.

En effet, cette dernière étude montre que l'EP n'est pas inhibé par la convection naturelle, mais au contraire il demeure le mécanisme de relaxation de la température plus rapide que la convection. Néanmoins, une autre étude expérimentale menée sur terre [35] a montré qu'une cellule de fluide critique non isolée ne subissait quasiment pas d'échauffement en comparaison de ce qui se produisait en microgravité, et l'analyse des processus intervenant dans cette configuration est présentée dans [36].

I-6 Les fluides supercritiques dans le domaine industriel

Les applications industrielles des fluides supercritiques (FSC) ont commencé depuis les années 40. A partir des années 70, elles ont pris un vrai essor à l'échelle industrielle [37] principalement dans les industries alimentaires.

Les FSC sont utilisés pour la confection de café décaféiné, de tabac sans nicotine, et d'alimentation pauvre en cholestérol. Ils constituent des solutions de remplacement avantageuses aux solvants industriels traditionnels, car les procédés à base des FSC consomment d'ordinaire beaucoup moins d'énergie que ceux qui utilisent des solvants organiques, et cela est dû au fait qu'avec les FSC on évite des températures élevées et les transitions de phases de la distillation et de la condensation. Les solvants organiques présentent des risques professionnels et environnementaux. Les meilleurs éléments d'entre eux sont hautement inflammables et toxiques, ce qui n'est pas le cas du dioxyde de carbone CO₂ supercritique largement utilisé dans l'industrie, car ce produit est métabolisé naturellement par des organismes vivants. Aucun risque donc de contamination dangereuse du lieu de travail ou de l'environnement, et aucun résidu toxique dans le produit fini. Le CO₂ supercritique se comporte bien à des températures qui préservent les composés biologiques sensibles à la chaleur, ce qui le rend particulièrement intéressant pour l'industrie agro-alimentaire, mais l'adoption de ces fluides sur une large échelle de la technologie se heurte à certains obstacles. On peut citer parmi ces obstacles, le coût initial élevé d'un équipement FSC, combiné à l'incapacité de prédire le comportement des substances ou préparations traitées aux FSC.

Afin de fixer correctement les conditions de fonctionnement d'un procédé, il convient de bien connaître le comportement du soluté dans la phase supercritique, l'évolution de la solubilité et de son état physique en fonction de la pression et de la température. Il faut aussi avoir une meilleure connaissance des phénomènes de transport au sein de ces fluides, ce qui permet d'avoir une meilleure optimisation de ces procédés, et de développer de nouvelles méthodes sur la base des connaissances théoriques, pour l'amélioration de la technologie FSC. C'est l'espoir de toute la communauté scientifique qui étudie ces fluides.

Les fluides supercritiques font d'excellents solvants, ils sont aussi utilisés dans l'industrie pour le nettoyage des pièces des machines et les textiles, pour décontaminer les sols, pour extraire et purifier de nombreux composés, ou encore dans le secteur des polymères et des cosmétiques. Leur intérêt et leur choix se basent sur une propriété de ces composés qui est le pouvoir de modifier leurs propriétés de façon continue sous l'action de la pression et/ou la température en contournant le point critique. Ceci permet de comprimer un gaz de faible densité en un liquide dense sans franchir la ligne d'équilibre liquide-gaz, donc sans qu'il y ait une discontinuité dans les propriétés physico-chimiques du milieu (*Figure 1.3*).

Cela supprime les inconvénients liés à l'existence d'une interface qui est particulièrement intéressante pour le séchage des structures microporeuses.

On peut citer d'autres grands travaux relatifs à la synthèse et l'élaboration des matériaux en milieux supercritiques qui est un développement récent comparé à d'autres applications comme dans l'extraction ou la séparation. Il faut rappeler que la première réaction de polymérisation en milieu supercritique a été découverte par le groupe ICI en 1933 [38] par la formation d'une cire solide blanche qui est caractérisé par la suite comme du polyéthylène [39]. Une grande partie de production de polyéthylène est synthétisée on ce moment par les procédés haute pression.

D'autre part, l'élaboration des matériaux à forte porosité est obligatoire pour leur intérêt dans différents domaines comme l'optique, l'isolation phonique et thermique,... etc.

La technique sol-gel est la plus utilisée en ce moment, son principe est le suivant :

Les particules formées dans une solution s'agrègent particulièrement pour former des amas lacunaires : c'est la formation d'un sol, ces amas remplissent tout l'espace de la solution en poursuivant la réaction, et la solution prend en masse pour donner un gel qui représente un réseau tridimensionnel de particules dans les pores dans lesquelles est emprisonné le solvant. Typiquement, à ce stade, le matériau a une porosité d'environ 90% [39]. Classiquement, une évaporation lente de la solution, produit aussi des tensions très importantes dues à l'interface liquide-gaz.

Ce type de séchage conduit à l'apparition de fissures qui peuvent provoquer une destruction du matériau. Ce problème est évité lorsqu'on utilise un séchage au-dessus du point critique du solvant, (en contournant le point critique selon le chemin inverse de celui représenté sur la *Figure 1.3*, car les forces capillaires sont absentes avec ce type de séchage, ce qui est expliqué par l'absence de l'interface liquide-gaz, et les tensions inter-faciales [40].

Pour l'élaboration des couches minces, les fluides supercritiques sont largement utilisés. Dans un procédé de préparation de couches minces par les fluides supercritiques, le précurseur est dissous en milieu fluide supercritique avant d'être déposé sous forme de film sur une surface dont la température permet la transformation chimique du précurseur.

Les méthodes classiques utilisées présentent de nombreux inconvénients. Parmi ces méthodes, on trouve la méthode CVD où les précurseurs volatils sont vaporisés sous pression réduite à des températures inférieures à leurs températures de décomposition, les vitesses de dépôt sont lentes. Le précurseur doit être volatil, et souvent on se heurte à sa toxicité élevée, ce qui n'est pas le cas pour les fluides supercritiques qui présentent moins de limitations puisqu'ils permettent l'utilisation de précurseurs non volatils, souvent peu toxiques et bon marché.

Cela permet à la fois d'élargir considérablement la nature des dépôts et faire ainsi de nombreuses combinaisons pour obtenir soit des métaux, soit des semi-conducteurs, soit des matériaux diélectriques.

D'autres types d'applications pour l'élaboration des solides divisés en utilisant les fluides supercritiques existent, comme l'atomisation et la précipitation par anti-solvant.

Pour le procédé RESS (Rapid Expansion of Supercritical Solution), le principe est le suivant : on dissout le produit dans un fluide supercritique sous pression, la solution ainsi formée subit une dépressurisation dans une buse à basse température et pression, ce changement brutal des conditions provoque une cristallisation (précipitation) rapide du mélange. Le produit final est exempt de solvant résiduel et l'on obtient des particules de taille submicronique.

Le coût énergétique du procédé réside essentiellement dans la compression du mélange initial et dans le chauffage de la buse, et lorsque des jets de fort débit sont employés, il peut être nécessaire de compenser également le refroidissement dû à la détente du fluide par un chauffage de l'enceinte de détente [41]. Un autre procédé GAS (Gaseous Anti Solvant), qui a pour objectif la diminution du pouvoir solvant d'un liquide, en lui ajoutant un anti-solvant dans lequel le produit à précipiter n'est pas soluble. Cela permet d'exploiter le faible pouvoir solvant des fluides et notamment du dioxyde de carbone, vis à vis de composés tels que les polymères, les protéines, ou bon nombre de composés biologiques.

Dans le procédé par anti-solvant, les composés sont dissous ou mis en suspension dans un solvant organique liquide. Cette phase organique est ensuite mise en contact avec l'anti-solvant qui présente une faible affinité pour le composé mais est miscible avec le solvant organique. Le contact entre la solution organique et le fluide anti-solvant peut être réalisé soit par addition progressive du fluide dans un volume initial de solution (mode batch auquel se réfère l'appellation GAS) soit par pulvérisation de la solution liquide dans la phase continue fluide (mode appelé ASES pour Aérosol Solvant Extraction System).

Les deux mécanismes qui gouvernent la nucléation et la croissance des cristaux, dans le système soluté/phase organique/anti-solvant fluide, sont la diffusion de l'anti-solvant dans la phase organique et l'évaporation du solvant dans le fluide anti-solvant.

La diffusion de l'anti-solvant diminue la valeur de solubilité à saturation du composé, tandis que l'évaporation du solvant augmente sa concentration. La précipitation a lieu quand la concentration locale devient supérieure à la concentration à saturation. On obtiendra des cristaux de petites tailles et faiblement dispersés lorsque le soluté est consommé principalement par nucléation, c'est à dire dans le cas de solutions concentrées ou de flux anti-solvant/solvant important.

A coté des produits pharmaceutiques, le GAS a été appliqué à la mise en forme de polymères, de précurseurs de catalyse, de protéines ou d'explosifs.

L'avantage de l'utilisation des fluides supercritiques dans l'élaboration de solides divisés, est leur pouvoir d'agir plus rapidement sur le système en utilisant des variations de pression (surtout dans le sens de la dépressurisation) plutôt que de jouer sur la température, les transferts thermiques étant bien plus lents que la propagation d'une onde de pression. D'autres avantages de ces fluides, dans le cas de procédés en milieu supercritique, la séparation fluide/solide se fait par retour à la pression atmosphérique, pour laquelle le fluide est gazeux. Le séchage du solide obtenu, est réalisé simultanément à la cristallisation et conduit à un produit sans solvant résiduel.

Un aperçu global sur les problèmes de combustion (en général) en microgravité peut se trouver dans [42]. Certaines situations rendues trop complexes par la présence de la gravité peuvent être reproduites dans des conditions idéales pour les problèmes tels que la combustion de gouttes sphériques en atmosphère en repos à l'infini, la combustion de plaques ou le problème d'onde de déflagration.

Le comportement d'une poche fluide à l'état supercritique et plongée dans un environnement à haute température est étudié par d'Almeida & Prud'homme [43]. Dans certains foyers de combustion, des gouttes liquides (de combustible ou de comburant) sont injectées dans une atmosphère très chaude et à pression supérieure à la pression critique du liquide. La

température initiale de la goutte est inférieure à la température critique. Ces gouttes apparaissent donc comme des poches fluides en mouvement et en expansion sans interface de changement de phase (état supercritique). Cette situation est assez représentative des moteurs cryogéniques (fusée Ariane) ou des moteurs diesels.

La vaporisation et la combustion de ces gouttes à haute pression a été étudiée numériquement par P.Haldenwang *et al.* [44] dans les conditions sous-critiques et supercritiques. Ils ont considéré une goutte isolée d'oxygène liquide (Lox) dans un environnement chaud et au repos rempli d'hydrogène. La goutte cryogénique chauffée par le gaz ambiant se vaporise pendant que sa température de surface augmente. Leur travail s'est principalement focalisé sur les conditions de température et pression ambiantes pour lesquelles l'interface disparaît durant l'évolution de la goutte, ce qui amènerait à dire que la surface de la goutte a effectivement atteint les conditions critiques.

Enfin, on pourrait aussi citer le stockage d'ergols dans les réservoirs des véhicules spatiaux.

En effet, lors de l'utilisation de carburant, la chute de pression occasionnée par le pompage du carburant est généralement compensée par la repressurisation du réservoir à l'aide d'un gaz neutre (par exemple l'Hélium). En situation de microgravité, la localisation de l'interface gaz-ergol n'est pas déterminée, d'où l'idée de stockage d'ergol sous forme supercritique qui présente l'avantage d'un stockage monophasique à densité plus importante. L'évaporation d'une goutte sous petites perturbations acoustiques (instabilités hautes fréquences) a été étudiée dans les foyers de combustion de fusées [45] [46]. Ils ont montré que la zone d'instabilité est plus grande pour une goutte de conductivité thermique finie et que, plus la fréquence de perturbation acoustique est grande, plus les évolutions thermiques internes à la goutte se produisent près de l'interface d'évaporation. Dans certains cas de ces combustions, les gouttes liquides (de combustible ou de comburant) sont injectées dans une atmosphère très chaude et à pression supérieure à la pression critique du liquide considéré. Ces gouttes apparaissent comme des poches fluides en mouvement et en expansion sans interface de changement de phase [47].

I-7 Les applications de la micropesanteur

La production industrielle de matériaux aux propriétés physiques améliorées fut, il y a vingt ans, un des éléments qui, avec les vols habités, présida à la mise en place des infrastructures orbitales. Ces recherches ont fait l'objet en grande majorité d'investissements publics, et n'ont pas donné lieu à des opérations commercialement rentables, le prix du lancement et des opérations à bord, même pour des véhicules automatiques et des produits à haute valeur ajoutée, ne permettant pas de dégager des marges suffisantes présentant un intérêt commercial. Par contre des échantillons de matériaux de références ont été obtenus et

l'attention de la communauté scientifique a été attirée sur des aspects négligés ou méconnus de la physique des matériaux, comme le rôle du transport convectif sur la sélection du régime de croissance d'un matériau à partir d'un bain fondu. Les applications industrielles de la micropesanteur se sont alors tournées vers l'obtention d'informations, impossibles à obtenir au sol et d'intérêt pour l'amélioration des procédés industriels terrestres. C'est en ce sens que le programme Microgravity Application Promotion (MAP) de l'Agence Spatiale Européenne (ESA) présente un progrès pour les applications industrielles des recherches en micropesanteur. On peut regretter cependant que la participation financière industrielle soit souvent marginale. Une troisième voie nous paraît prometteuse qui est l'utilisation de l'infrastructure orbitale pour améliorer la gestion des fluides en orbite dont dépend très fortement le bon fonctionnement des systèmes spatiaux. Les recherches sur les problèmes de d'interface et de capillarité seront ainsi rapprochées des questions de ballonnement et de réservoirs à tension capillaire, que les questions de fluides critiques appliquées à la gestion des réservoirs de propergols supercritiques et que la dynamique des bulles sera associée aux transferts thermiques par boucle diphasique, tandis que ce qui concerne la dynamique et la rhéologie des mousses sera utile pour l'évaluation précise du reste d'ergol dans les réservoirs en fin de vie des satellites par exemple [48].

I-8 Position du problème physique

Dans le cas des fluides purs, les effets de la gravité sont très importants au voisinage du point critique et c'est précisément dans cette région qu'il y a des anomalies critiques dans différentes propriétés tel que la conductivité thermique et la capacité calorifique thermique entre autres [49] [23].

La micropesanteur caractérise l'état d'un corps tel que l'ensemble des forces gravitationnelles et inertielles aux quelles il est soumis présente une résultante et un moment négligeables comparativement à leurs valeurs à la surface terrestre. De ce fait, elle supprime la convection dans le cadre de l'étude de l'accélération du transfert de chaleur. On peut donc comprendre les mécanismes d'équilibre au voisinage du point critique et mettre en évidence les nouveaux processus de transport en éliminant les instabilités dues à la gravité [17].

L'état d'apesanteur se manifeste par différents effets sur le transport de chaleur dans les fluides embarqués dans les vaisseaux spatiaux: Des effets statiques en volume (disparition de la poussée d'Archimède et des phénomènes liés à la pression hydrostatique, disparition de la sédimentation et lévitation naturelle des corps) et par des effets dynamiques (disparition des phénomènes de convection naturelle). Alors que sur la terre le transport de matière et de chaleur est convectif, il est essentiellement diffusif en microgravité.

Toutefois le comportement des fluides dépend également des effets de tension superficielle aux surfaces libres et aux interfaces (convection capillaire ou effet Marangoni) et d'autres mécanismes [17]. Ces mécanismes qui restent incompris donnent de plus en plus lieu à des expérimentations dans l'espace.

De ce fait, un quatrième mode de transport de chaleur a récemment été mis en évidence dans les fluides supercritiques hyper-compressibles confinés. Il a été montré de manière théorique puis expérimentale qu'un accroissement de température sur la paroi d'une cellule remplie d'un fluide supercritique induit l'expansion violente de la couche limite thermique qui s'y développe, ce qui entraîne la compression adiabatique du reste du fluide (Effet Piston). Par cette compression, la modification pariétale de température affecte très rapidement l'ensemble du fluide, sur une échelle de temps beaucoup plus courte que la diffusion (phénomène de l'Accélération Critique). [50]

Lorsqu'on soumet une cellule remplie de fluide critique à un chauffage local, celui-ci s'échauffe très rapidement et de manière homogène. Le processus impliqué, qu'on a désigné sous le nom d'Effet Piston, est directement lié à l'hyper-compressibilité et à la très faible diffusivité thermique des fluides proches de leur point critique. Lorsque la chaleur diffuse depuis sa source sur une faible épaisseur, le fluide soumis à cet échauffement se dilate fortement et comprime de façon isentropique le reste du fluide, qui subit alors une augmentation homogène de sa température. [51]

Dans ce contexte, une première étude numérique exhaustive, dans le présent travail, de cet effet est réalisée pour le dioxyde de carbone pris comme référence suite à ce que le directeur de thèse a réalisé auparavant une étude sur ce dernier d'une part ; et d'autre part, pour confirmer les résultats des simulations issus du présent code de calcul à ceux issus des simulation de l'ancien code de calcul élaborer par le directeur de thèse.

Dans un premier temps, nous allons étudier deux fluides dont les points critiques sont très voisins de celui du CO_2 , afin de comparer les résultats issus des simulations, et après une recherche dans les tables thermodynamiques, nous avons décidé de choisir l'acétylène C_2H_2 et l'éthane C_2H_6 suite à ce que leurs points critiques sont très voisins de celui du CO_2 d'une part, et d'autre part, suite à leurs colossales utilisations dans le domaine industriel.

Ensuite, nous procéderons avec un fluide dont le point critique est très éloigné de celui du CO_2 , notamment un ergol embarqué tels que l'oxygène et l'hydrogène. Pour ce cas, nous allons utiliser l'hydrogène sur la base de son point critique est suffisamment éloigné de celui du CO_2 d'une part, et d'autre part son utilisation prépondérante comme combustible propre non polluant.

L'objectif de ce travail est de comparer les résultats des simulations issus du nouveau code de calcul pour le CO₂ à ceux issus de l'ancien code de calcul pour le même fluide à son état critique (élaborer par le directeur de thèse lors de sa préparation du mémoire de Magister) ; par la suite, de comparer les résultats issus des simulations des différents fluides, à leurs états critiques, à ceux du dioxyde de carbone (pris comme référence dans cette étude) qui sont trouvés par le nouveau code de calcul.

I-9 Procédure de l'étude

L'étude de la réponse d'un fluide supercritique à une perturbation thermique permet d'explorer le transport de chaleur en absence de gravité et ouvre un volet prometteur à un large spectre d'applications technologiques, dont la perspective d'élaboration de nouveaux matériaux et la compréhension des mécanismes liés à la gestion des fluides embarqués au cours des missions spatiales et dans les vols paraboliques (propulsions cryogéniques, comportement des ergols dans les réservoirs, échangeurs thermiques). Dans ce contexte, la microgravité offre un environnement idéal car les propriétés du fluide au voisinage de son point critique sont particulièrement intéressantes : ainsi sa diffusion thermique est très faible tandis que sa compressibilité augmente considérablement comparativement au gaz parfait. Ceci permet d'éliminer les deux modes principaux de transfert de chaleur, par conduction et par convection.

Cependant, en supposant que l'équation d'état est celle de Van der Waals, le transport de chaleur est très fortement accéléré par rapport au mode purement diffusif et est dominé par la compressibilité qui assure le transfert d'énergie thermique en énergie cinétique.

La résolution des équations de Navier-Stokes non linéaires, en mode compressible et à faible nombre de Mach met en évidence un nouveau mécanisme de transport dit effet piston dont l'originalité repose sur de nouvelles notions de la thermodynamique au voisinage du point critique : la couche près de la paroi chauffée (couche limite thermique) se comprime d'abord, puis elle se dilate et pousse le fluide à la manière d'un piston.

L'effet Piston se manifeste par une onde qui fournit de l'énergie au volume au sein duquel elle se déplace et assure ainsi un transport thermique sur des temps courts devant l'échelle diffusive. Cette particularité est due au fait que les principales différences entre le gaz parfait et le gaz de Van Der Waals sont que la diffusivité thermique est dix fois plus faible et la compressibilité quinze fois plus importante pour le gaz de Van Der Waals [17]. De ce fait, si l'on chauffe la paroi d'un récipient contenant le fluide critique, on emmagasine une énergie par chauffage dans une fine couche près de cette paroi de faible extension, qui a tendance à se dilater de façon importante (forte compressibilité). Par suite, il y a génération d'une onde de pression dans le système [52], [53], [54].

La mise en évidence de ce phénomène [07] encore mal connu, a été possible grâce à l'étude d'un code permettant de traiter les cas d'écoulements très compressibles à faible nombre de Mach. Son but est l'étude de la réponse à un gradient de température, d'un fluide supercritique (gaz carbonique) très compressible, peu diffusif et sans effet de gravité.

Les équations de Navier-Stokes non-linéaires, à une dimension, sont résolues à l'aide d'une nouvelle méthode de résolution numérique appelée PISO pour Pressure Implicit with Splitting of Operators [10].

L'équation d'état considérée est celle de Van Der Waals, [20] ceci afin de mettre en évidence les effets induits par la très forte compressibilité de ces fluides sur l'évolution des propriétés thermodynamiques et dynamiques. Les résultats sont présentés sur les deux échelles de temps, acoustique et diffusive; et les mécanismes intervenant dans le transport de chaleur sont minutieusement analysés.

En se plaçant à 1 K de la température critique, on observe un nouveau mécanisme de transport de chaleur par détente et recompression d'une fine couche limite dans laquelle est emmagasinée l'énergie thermique apportée au fluide par chauffage de l'une de ses parois. Le couplage thermomécanique, dû à la forte compressibilité du fluide, permet l'expansion de ce même fluide sous l'effet de perturbations thermiques localisées, générant ainsi, un champ de vitesse libre.

L'équilibre final est atteint plus tard par diffusion. Cependant, on insiste sur le fait que le couplage thermomécanique est entièrement responsable de l'état d'équilibre précoce, en un temps qui représente seulement 1% du temps de diffusion. Cette accélération du processus de transport thermique devrait être encore plus prononcée lorsque le système est plus près de son point critique. Ce qui est en apparence contradiction avec le ralentissement classiquement observé près du point critique.

Cette accélération du processus d'équilibre thermique près du point critique a également été observée, lors d'une approche purement thermodynamique, en absence d'écoulement, par H. Boukari [09] et A. Onuki [08].

Ainsi, en contraste avec les fluides incompressibles pour lesquels il n'y a pas de force motrice en l'absence de gravité, les fluides compressibles peuvent générer un écoulement, dans les mêmes conditions. C'est pourquoi, l'on a étudié la convection thermoacoustique dans les gaz parfaits, essentiellement en vue d'applications spatiales (expériences embarquées). La généralisation à un mélange binaire a été aussi réalisée (réponse d'une interface gaz-solide à une telle perturbation) [15].

Kassoy [55] a, auparavant, déjà étudié l'écoulement généré par l'addition de chaleur aux parois d'une cellule contenant un fluide au repos. Il a démontré, à partir de développements asymptotiques raccordés, que la couche thermique créée près de la paroi chaude se détend sur les temps acoustiques et agit comme un piston. Le champ acoustique généré dans le volume fournit les conditions initiales pour les solutions du problème, sur l'échelle de temps de conduction, trouvées à l'aide d'une analyse à échelle de temps multiple.

De même, il a été montré que, lorsque l'apport de chaleur est suffisamment important et rapide, des ondes de chocs de faible et forte intensité peuvent être générées dans le volume de la cellule considérée [56] [57]. Cet effet devrait être plus prononcé lorsque la chaleur diffuse lentement et que le système est compressible, donc près du point critique des fluides [34] [49]. Notons que ce, phénomène ne devrait pas être visible sur terre, car masqué par les effets importants dus à la gravité [58].

Plus récemment, la réponse d'un gaz parfait, confiné dans une cellule monodimensionnelle, à un champ d'accélération homogène, dépendant du temps, et à une source de chaleur volumétrique a été étudiée analytiquement [14], [15].

Cependant, ce domaine de recherche a très peu évolué du point de vue numérique du fait que les méthodes classiques habituellement utilisées pour les écoulements compressibles, ont très vite montré leurs limites dans leur application aux écoulements à faible nombre de Mach.

C'est pourquoi, de nouvelles méthodes numériques sont apparues afin de résoudre les équations qui ont trait à ces problèmes. Ainsi, Chenoweth et Paolucci, [13] ont utilisé un procédé de filtration afin d'étudier la convection dans une cavité contenant un gaz, soumise à un fort gradient de température. En 1986, Issa a proposé l'algorithme PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators) pour résoudre les équations de Navier-Stokes dans le cadre de réactions chimiques de surface [10]. Cet algorithme a été appliqué à certains problèmes thermoacoustiques tels que les interactions entre la croissance cristalline et la compressibilité de la phase mère [04] [14], ou bien les écoulements générés dans les gaz parfaits par des sources de chaleur volumétriques [15].

D'autre part, il semblerait que l'effet Piston ait la même importance sur terre qu'en apesanteur. En effet, de récentes expériences sur terre montrent une accélération du transport de chaleur [16]. L'interprétation du phénomène est cependant compliquée du fait de l'existence de la gravité terrestre.

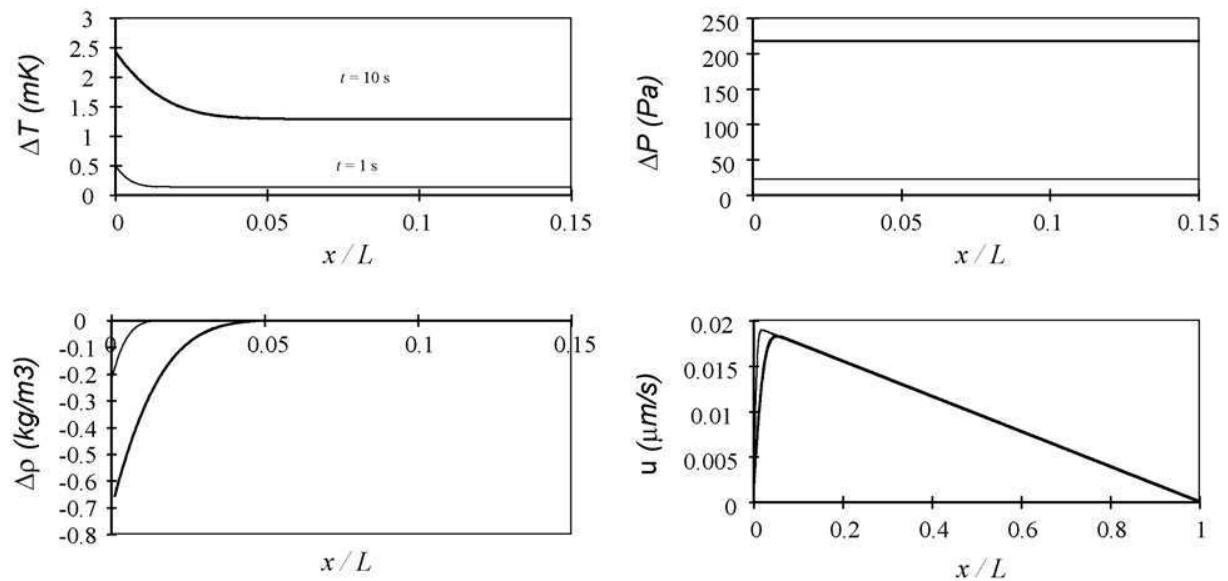
I-10 Abaqués de référence


Figure 1.6 profils de Température, densité, pression et vitesse d'une cellule de 1 cm remplie de CO₂ à la densité critique et à $T_c + 1\text{K}$, et soumise sur sa paroi gauche à un flux de la chaleur de 1W/m^2 pendant que la paroi droite est adiabatique.[59]

I-11 Conclusion

Les fluides supercritiques sont à la fois denses et très compressibles, lorsqu'on s'approche du point critique, par suite ils constituent une catégorie de fluides dont les mécanismes originaux de transfert de masse et de chaleur sont encore mal appréhendés. D'où la nécessité de réaliser des études plus poussées en absence de gravité. Ces fluides sont de plus en plus utilisés dans l'industrie et prisés grâce aux procédés moins coûteux et beaucoup plus propre que ceux utilisant des solvants et autres produits chimiques.

L'effet Piston se manifeste par une onde qui fournit de l'énergie au volume au sein duquel elle se déplace et assure ainsi un transport thermique sur des temps courts devant l'échelle diffusive.

La microgravité permet d'éliminer l'influence du champ de gravité terrestre. De ce fait, elle supprime la convection dans le cadre de l'étude de l'accélération du transfert de chaleur dans le but de comprendre les mécanismes d'équilibre au voisinage du point critique et de mettre en évidence les nouveaux processus de transport en éliminant les instabilités dues à la gravité.

Les résultats issus des simulations du CO₂ sont ensuite confrontés à ceux retrouvés par les travaux du directeur de thèse [17], puis les résultats des autres fluides près de leurs points critiques seront comparés aux résultats du CO₂, étude qui constitue la base de ce travail.

Chapitre II

Formulation mathématique

Résolution Numérique

CHAPITRE II

FORMULATION MATHÉMATIQUE

RÉSOLUTION NUMÉRIQUE

II-1 Introduction

Cette étude porte sur l'évolution des échanges de chaleur au sein d'un gaz supercritique. C'est-à-dire qu'on observe l'évolution temporelle d'une perturbation thermique qui maintient le fluide au dessus de la courbe dite de coexistence (figure 2.1). En effet, l'absence de convection naturelle, induite par la micropesanteur, ajoutée aux spécificités thermodynamiques du fluide critique, engendre des processus originaux de transport thermique. Plusieurs grandeurs thermodynamiques présentent alors des comportements singuliers le long d'un chemin supercritique. Ces grandeurs nous intéressent particulièrement pour caractériser le transport thermique.

Le fluide confiné entre deux parois est initialement au repos et en équilibre thermodynamique. Seule l'une des deux parois est soumise à une élévation de température et l'on étudie l'évolution thermique pour plusieurs températures initiales du milieu. Le problème considère des coefficients de transport constants.

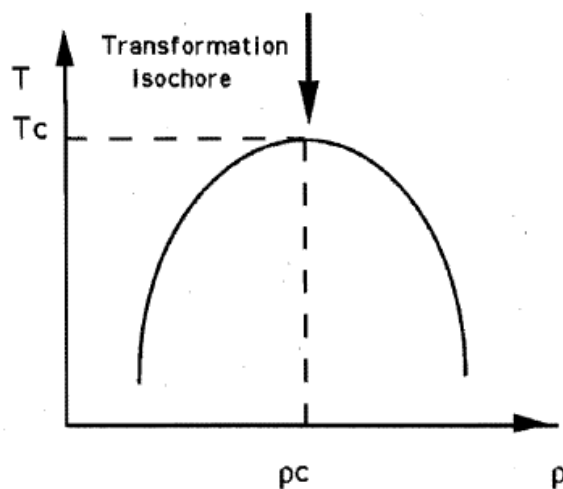


Figure 2.1 : Courbe de coexistence.

II-2 Modèle mathématique et équation du problème

Les fluides étudiés sont le dioxyde de carbone (CO_2), l'éthane (C_2H_6), l'acétylène (C_2H_2) et l'hydrogène (H_2) cloîtrés chacun dans une enceinte à part. Ils sont considérés visqueux, compressibles et newtoniens.

Les lois complémentaires sont choisies constantes (ν : viscosité cinématique, λ : conductibilité thermique).

La longueur et la hauteur du réservoir sont très grandes par rapport à sa largeur L ce qui nous suggère une étude monodimensionnelle. L'une des deux faces est soumise à la perturbation thermique, tandis que l'autre est maintenue à la température initiale. Les parois latérales sont adiabatiques. Le réservoir ne subit aucune accélération.

L'évolution de la température à la paroi chauffée, est linéaire (figure 2.2) et lente : Elle varie sur la même échelle de temps que la diffusion de la chaleur.

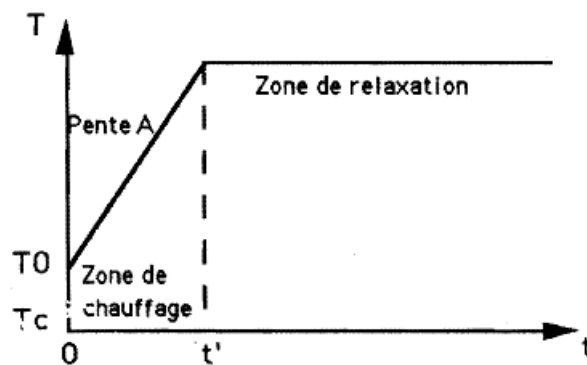
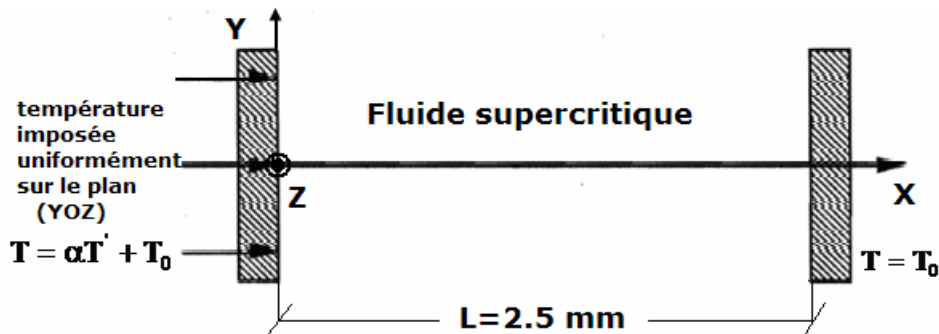


Figure 2.2 : Evolution de la température à la paroi.

L'étude du problème revient donc à considérer un fluide entre deux plans parallèles et infinis (pas d'effets de parois suivant les axes y et z) :



- Hypothèses :

- Les variables du problème sont :

$$\begin{aligned} u &= u(x,t) : \text{Vitesse.} \\ P &= P(x,t) : \text{Pression.} \\ T &= T(x,t) : \text{Température.} \\ \rho &= \rho(x,t) : \text{Densité.} \end{aligned}$$

- Les fluides sujets de cette étude sont considérés compressibles, visqueux, newtonien et conducteur.
- Les forces gravitationnelles sont considérés négligeables en apesanteur.
- Initialement, les fluides sont au repos et en équilibre thermodynamique.

Les équations qui régissent l'écoulement sont celles de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Dans le cas d'un fluide compressible, visqueux, newtonien, conducteur et en l'absence de gravité, ces équations s'écrivent en écoulement monodimensionnel :

- Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \quad (\text{II-1})$$

- Equation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{4}{3} \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (\text{II-2})$$

- Equation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_v T) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho C_v u T) = -\frac{\partial}{\partial x}(P u) + \frac{4}{3} \eta \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right) \quad (\text{II-3})$$

Les lois de conservation sont complétées par l'équation d'état décrivant le cas d'un gaz réel :

- Equation d'état de Van Der Waals:

$$(p + a\rho^2)(1 - b\rho) = \rho RT \quad (\text{II-4})$$

Cette équation ne décrit pas correctement le comportement de la vitesse du son mais donne un coefficient de compressibilité infini, à travers son caractère non-linéaire, lorsque l'on se rapproche du point critique. De ce fait, on peut appréhender les mécanismes dus à la forte compressibilité du fluide.

Enfin, comme pour tout problème physique, la résolution est assujettie à des conditions initiales et aux frontières :

*** Conditions aux limites du problème :**

$$u(x=0, t) = u(x=L, t) = 0$$

$$T(x=0, t) = T_0 + f_1(t)$$

$$T(x=L, t) = T_0 + f_2(t)$$

Avec : $f_1(t)$ et $f_2(t)$ se sont des fonctions linéaires qui représentent les rampes de chaleur sur les deux parois, leurs valeurs numériques sont données en kelvin par seconde.

*** Conditions initiales :**

$$u(x, t=0) = 0$$

$$T(x, t=0) = T_0$$

$$P(x, t=0) = P_0$$

$$\rho_0(x, t=0) = \rho_0$$

Les parois situées en $x=0$ et $x=L$ sont initialement à la même température T_0 . Le fluide est au repos et en équilibre thermodynamique et l'étude est réalisée avec $L = 2.5 * 10^{-3}$ m [07].

*** Paramètres du problème :**

Les principaux paramètres déterminants sont les suivants :

- Temps acoustique t_a :

C'est le temps mis par une onde acoustique qui se propage dans le fluide, aux conditions critiques, pour parcourir la distance L séparant les deux parois.

$$t_a = \frac{L}{c_0} \quad (t_a = 11.5 \mu\text{s}, \text{ dans ce cas pour le CO}_2)$$

- Temps de diffusion t_d :

Il représente le temps caractéristique de propagation de la chaleur pour le gaz parfait.

$$t_d = \frac{L^2}{\kappa} \quad (t_d = 157 \text{ s}, \text{ dans le cas considéré pour le CO}_2)$$

Où κ est la diffusivité thermique définie par :

$$\kappa = \frac{\lambda}{\rho C_p}$$

Les temps longs sont les temps de l'ordre de grandeur du temps de diffusion.

A partir de ces deux temps t_a et t_d , on définit un petit paramètre qui représente l'épaisseur de la couche limite thermique pour le gaz parfait :

$$\varepsilon = P_r \frac{t_a}{t_d}$$

Où $P_r = \nu / \kappa$ est le nombre de Prandtl pour le gaz considéré :

$P_r = 3.1$, dans le cas du dioxyde de carbone.

On définit par ailleurs le paramètre qui caractérise la distance qui sépare la température initiale de la température critique :

$$\mu = \frac{T_0 - T_c}{T_c}$$

Dans le cadre de notre étude, les températures initiales sont proches de la température critique et μ vérifie :

$$\mu \ll 1$$

D'autre part, la compressibilité isotherme est définie par :

$$\chi_T = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T$$

Avec :

$$\lim_{T \rightarrow T_c} \chi_T = \infty$$

II-3 Résolution Numérique

Lorsqu'un problème tel que le notre se présente, il s'agit de choisir la méthode de résolution numérique convenable pour résoudre le système d'équations qui décrit le phénomène. Dans notre cas, deux types de méthodes sont adaptées : éléments finis et différence finies.

Les éléments finis sont employés dans les cas où la géométrie du milieu est complexe. Leur mise en œuvre est généralement difficile du fait que les problèmes de mécanique des fluides traités par cette méthode nécessitent des logiciels coûteux.

La méthode des différences finies est plus facile à mettre en œuvre du fait notamment qu'on puisse facilement faire les modifications nécessaires à des cas particuliers d'écoulements.

II-3-1 Discrétisation des équations

Le système d'équations précédentes ((II-1) à (II-4)) traduit en notation tensorielle, dans un repère cartésien s'écrit :

* **Conservation de la masse :**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (\text{II-5})$$

* **Conservation de la quantité de mouvement :**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_i \quad (\text{II-6})$$

* **Conservation de l'énergie :**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j e) = \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i \sigma_{ij}) + Q \quad (\text{II-7})$$

* **Equation d'état :**

$$\rho = P \Phi (\rho, T) \quad (\text{II-8})$$

Avec :

e : Energie.

σ_{ij} : Tenseur des contraintes.

S_i : Source de quantité de mouvement.

\dot{q}_j : Flux diffusif d'énergie.

Q : Source extérieure d'énergie.

La mise en œuvre de la méthode est simplifiée quand on se place dans les conditions du problème, c'est à dire en monodimensionnel. Ce qui permet d'écrire le système sous la forme discrétisée suivante (schéma d'Euler implicite) :

- Equation de conservation de la masse :

$$\frac{1}{\delta t} (\rho^{n+1} - \rho^n) + \nabla(\rho u)^{n+1} = 0 \quad (\text{II-9})$$

- Equation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{1}{\delta t} \{ (\rho u)^{n+1} - (\rho u)^n \} = H(u^{n+1}) - \nabla P^{n+1} + S \quad (\text{II-10})$$

- Equation de conservation de l'énergie :

$$\frac{1}{\delta t} \{ (\rho e)^{n+1} - (\rho e)^n \} = G(e^{n+1}) - \nabla(Pu)^{n+1} + J(u^{n+1}) + Q \quad (\text{II-11})$$

Avec :

∇ : Opérateur de discrétisation associé à d / dx qui est une combinaison linéaire des valeurs aux différents nœuds de la grille autour du point considéré.

H : Opérateur associé à la discrétisation des flux diffusif et convectif de moment sous forme linéarisée.

G : Opérateur associé à la discrétisation des flux diffusif et convectif d'énergie sous forme linéarisée.

$$\text{Soit : } H(u) = A_m u_m \quad ; \quad G(e) = B_m e_m$$

Les indices correspondent aux numéros des nœuds de la discrétisation.

En faisant apparaître la partie centrale de ces opérateurs, on obtient un nouveau système et de cette façon, on améliore la stabilité :

$$H(\mathbf{u}) = A_0 \mathbf{u} + H'(\mathbf{u}) \quad ; \quad G(\mathbf{e}) = B_0 \mathbf{e} + G'(\mathbf{e})$$

Les coefficients A_0 et B_0 sont associés aux termes diagonaux des équations considérées.

Le système devient :

$$\frac{1}{\delta t} (\rho^{n+1} - \rho^n) + \nabla(\rho \mathbf{u})^{n+1} = 0 \quad (\text{II-12})$$

$$\left(\frac{1}{\delta t} - \frac{A_0}{\rho^{n+1}} \right) \rho^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} = H'(\mathbf{u}^{n+1}) - \nabla P^n + S_i + \frac{\rho^n \mathbf{u}^n}{\delta t} \quad (\text{II-13})$$

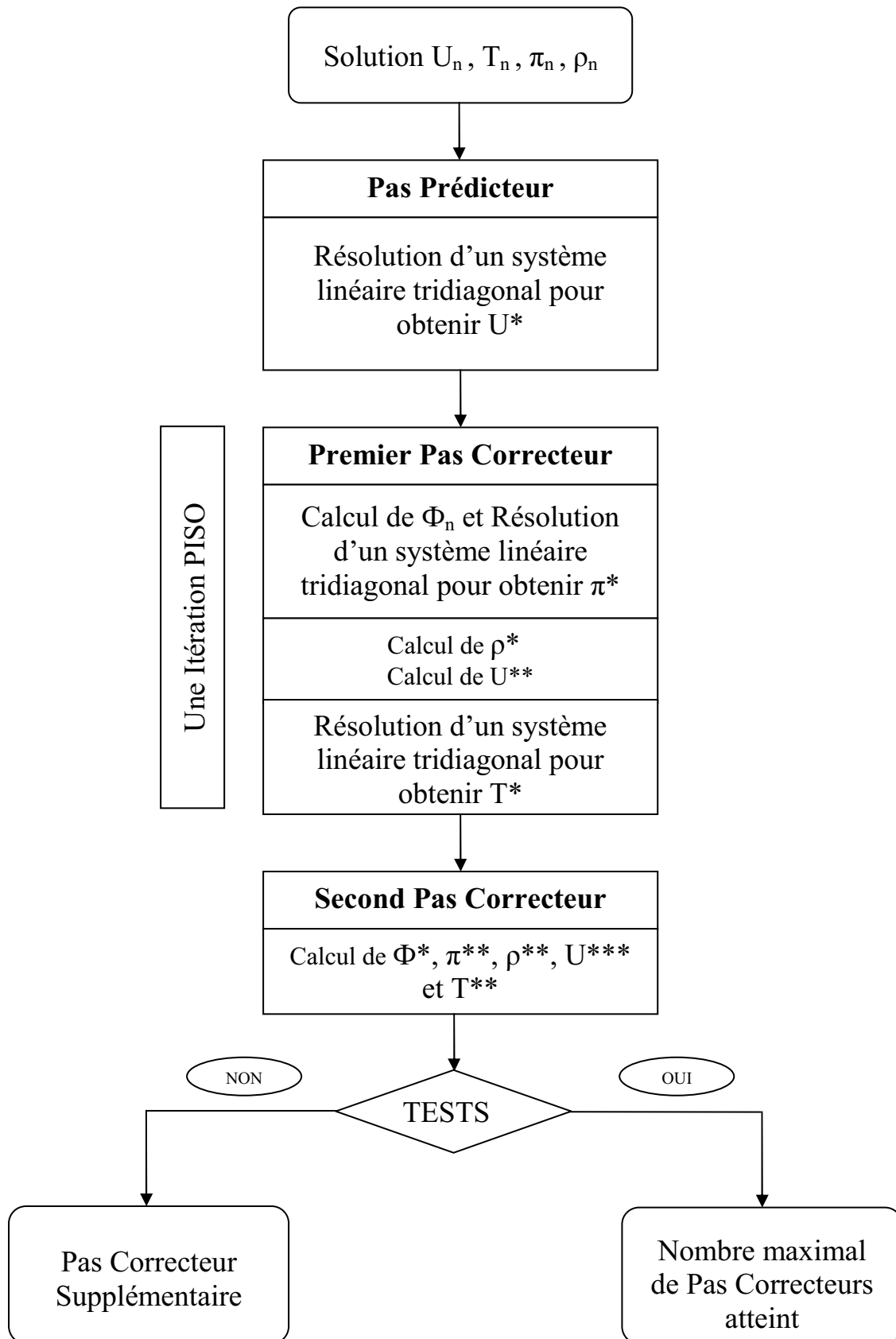
$$\left(\frac{1}{\delta t} - \frac{B_0}{\rho^{n+1}} \right) \rho^{n+1} \mathbf{e}^{n+1} = G'(\mathbf{e}^{n+1}) - \nabla(P\mathbf{u})^{n+1} + J(\mathbf{u}^{n+1}) + Q + \frac{\rho^n \mathbf{e}^n}{\delta t} \quad (\text{II-14})$$

II-3-2 Déroulement du procédé de calcul (Algorithme PISO) :

La méthode PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators) qui a été mise au point par Issa [10] au début des années quatre-vingt, est tout à fait adaptée à notre problème. Elle permet de traiter les écoulements instationnaires, compressibles et incompressibles, même à faible nombre de Mach.

Le trait essentiel de cette méthode tient à l'utilisation d'une série de pas décomposant la solution. Les opérations sur la pression et la vitesse (choisies comme variables indépendantes) sont découplées. Pour chaque équation, un pas prédicteur implicite est suivi de n pas correcteurs explicites, pour prendre en compte les évolutions des autres variables d'un pas de temps à l'autre.

L'organigramme suivant résume le principe de l'algorithme PISO, pour une itération dans le temps:



On peut alors décrire l'algorithme qui se déroule suivant les étapes suivantes :

a) Pas prédicteur pour la vitesse :

$$\left(\frac{1}{\delta t} - \frac{A_0}{\rho^n} \right) \rho^n u_i^* = H'(u_i^*) - \nabla P^n + S_i + \frac{\rho^n u^n}{\delta t} \quad (\text{II-15})$$

L'équation de la quantité de mouvement fournit le pas prédicteur pour la vitesse.

b) 1^{er} pas correcteur :

On part toujours de l'équation de la quantité de mouvement écrite sous forme explicite,

$$\left(\frac{1}{\delta t} - \frac{A_0}{\rho^n} \right) \rho^* u^{**} = H'(u^*) - \nabla P^* + S + \frac{\rho^n u^n}{\delta t} \quad (\text{II-16})$$

On lui soustrait l'équation du pas prédicteur et, en combinant avec l'équation de continuité et l'équation d'état,

$$\nabla(\rho^* u^{**}) = \frac{\rho^* - \rho^n}{\delta t} \quad (\text{II-17})$$

$$\rho^* = P^* \varphi(\rho^n, T^n) \quad (\text{II-18})$$

Il en résulte une équation implicite pour la pression,

$$\left[\nabla \left\{ \left(\frac{1}{\delta t} - \frac{A_0}{\rho^n} \right)^{-1} \nabla \right\} - \frac{\varphi(\rho^n, T^n)}{\delta t} \right] (P^* - P^n) = \nabla(\rho^n u^*) \quad (\text{II-19})$$

L'équation d'état permet de déterminer le champ prédicteur pour la densité (ρ^*).

L'équation de quantité de mouvement produit, à l'aide de ρ^* et P^* le premier champ correcteur pour la vitesse (u^{**}).

c) Pas prédicteur pour l'énergie :

L'équation de l'énergie est écrite sous forme implicite,

$$\left(\frac{1}{\delta t} - \frac{B_0}{\rho^*} \right) \rho^* e^* = G'(e^*) - \nabla(P^* u^{**}) + J(u^{**}) + \frac{\rho^n e^n}{\delta t} \quad (\text{II-20})$$

Connaissant e^* , on peut déterminer la température T^* .

Pour augmenter la précision du schéma, il est possible de faire autant de pas correcteurs que nécessaire. Cependant, on remarque que, au-delà du second pas correcteur on n'améliore plus tellement la précision du schéma. La précision de la méthode au bout de n pas correcteur est $O(\delta t^n)$.

II-4 La méthode PISO appliquée à notre problème

II-4-1 Mise en équation:

La résolution des équations se fait après normalisation. La température et la densité sont adimensionnées par rapport à leurs valeurs initiales, la pression l'est par rapport à celle du gaz parfait dans les mêmes conditions initiales. La vitesse est normalisée par rapport à la vitesse du son dans le gaz supercritique obéissant à l'équation d'état de Van Der Waals.

En admettant que les variables dimensionnées sont primées, les variables adimensionnelles reprennent les mêmes notations, soit

$$T = \frac{T'}{T_0}; \quad \rho = \frac{\rho'}{\rho_0}; \quad P = \frac{P'}{\rho_0 R T_0}; \quad x = \frac{x'}{L}; \quad u = \frac{u'}{c_0}; \quad t = \frac{c_0}{L} t'$$

Avec c_0 (cf. annexe 3), vitesse du son dans le CO_2 dans les conditions initiales,

$$c_0 = \left[1 + \frac{R}{1 - \frac{2a\rho'_0(1 - b\rho'_0)^2}{RT'_0}} \right] \left[\frac{RT'_0}{(1 - b\rho'_0)^2} - 2a\rho'_0 \right]$$

Après cette mise sous forme adimensionnelle, on obtient un nouveau système,

$$\rho_t + (\rho u)_x = 0 \quad (\text{II-21})$$

$$\rho u + \rho u u = -\frac{c_{01}^2}{\gamma c_0^2} P_x + \frac{4}{3} \varepsilon u_{xx} \quad (\text{II-22})$$

$$\rho T_t + \rho u T_x = -(\gamma - 1) \left(P + \frac{a \rho_0'^2}{P_{01}} \right) u_x + \varepsilon \left[\frac{\Gamma}{P_r} T_{xx} + \frac{4}{3} \gamma (\gamma - 1) \frac{c_0^2}{c_{01}^2} u_x^2 \right] \quad (\text{II-23})$$

$$P = \rho \left[\frac{T}{1 - b \rho_0' \rho} - \frac{a \rho_0'^2}{\rho_0' R T_0'} \rho \right] \quad (\text{II-24})$$

Avec :

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} : \text{Rapport des capacités calorifiques à pression constante et à volume}$$

constante pour le gaz parfait équivalent.

Γ : rapport des capacités calorifiques à pression constante et à volume constant pour le gaz supercritique de Van Der Waals (cf. annexe 4).

c_{01} : vitesse du son pour le gaz parfait dans les conditions initiales.

A partir de là, la méthode de PISO peut être mise en œuvre.

Pour passer du pas de temps n , dont la solution est connue, au pas de temps $n+1$ dont la solution n'est pas connue, on procède en plusieurs étapes. Le déroulement des opérations s'effectue de la manière suivante:

(1) Pas prédicteur:

Cette étape permet de calculer un nouveau champ de vitesse u^* à partir de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. On obtient un système d'équations linéaires en employant un schéma de différences finies semi-implicite :

$$\left(\rho^n u^*\right)_t + \left(\rho^n u^n u^*\right)_x = -E \Pi_x^n + \frac{4}{3} \varepsilon u_{xx}^* \quad (\text{II-25})$$

Avec :

$$E = \frac{c_{01}^2}{\gamma c_0^2}$$

En discrétisant le premier terme par rapport au temps, soit :

$$\left(\rho^n u^*\right)_t = \frac{\rho^n u^*}{\delta t} - \frac{\rho^n u^n}{\delta t} \quad (\text{II-26})$$

L'équation précédente devient :

$$\frac{\rho^n}{\delta t} u^* + \left(\rho^n u^n u^*\right)_x - \frac{4}{3} \varepsilon u_{xx}^* = -E \Pi_x^n + \frac{\rho^n u^n}{\delta t} \quad (\text{II-27})$$

Les discrétisations des dérivées premières et secondes qui interviennent dans cette équation, en font un système tridiagonal qui sera résolu par un algorithme spécifique (méthode du pivot). On obtient un champ de vitesse intermédiaire qui ne vérifie ni l'équation de continuité, ni celle de conservation de l'énergie, ni celle d'état pour les valeurs de ρ , T et Π calculées au pas de temps n . On doit donc calculer séparément des champs intermédiaires de ces grandeurs en fonction des quantités intermédiaires obtenues.

(2) **Premier pas correcteur :**

L'équation de conservation de la quantité de mouvement est maintenant écrite sous forme explicite en supposant que l'on connaît les nouveaux champs intermédiaires ρ^* et Π^* , soit :

$$\frac{\rho^* u^{**} - \rho^n u^n}{\delta t} + (\rho^n u^n u^*)_x = -E \Pi^*_x + \frac{4}{3} \varepsilon u^*_{xx} \quad (\text{II-28})$$

Par soustraction de l'équation (II-27) du pas prédicteur, de cette dernière équation, on obtient :

$$\rho^* u^{**} - \rho^n u^n = -E \delta t (\Pi^* - \Pi^n)_x \quad (\text{II-29})$$

Et, grâce à l'équation de continuité, écrite sous la forme suivante :

$$\frac{\rho^* - \rho^n}{\delta t} + (\rho^* u^{**})_x = 0 \quad (\text{II-30})$$

On arrive à éliminer le terme en u^{**} de l'équation (II-29) ; d'où l'écriture suivante :

$$E \delta t (\Pi^* - \Pi^n)_{xx} = \frac{\rho^* - \rho^n}{\delta t} + (\rho^n u^*)_x \quad (\text{II-31})$$

Nous obtenons ainsi une équation à deux inconnues (Π^* et ρ^*). Nous éliminons ρ^* à l'aide de l'équation d'état écrite sous la forme suivante :

$$\rho^* = \Pi^* \Phi(\rho^n, T^n) \quad (\text{II-32})$$

Par commodité, on note :

$$\Phi^n = \Phi(\rho^n, T^n)$$

Ce qui donne pour l'équation (II-31) l'expression suivante :

$$\left(\frac{-\Phi^n}{\delta t} + \delta t E \Delta_{xx} \right) (\Pi^* - \Pi^n) = (\rho^n u^*)_x \quad (\text{II-33})$$

Où Δ_{xx} désigne l'opérateur de dérivée seconde en x .

Pour déterminer les nouveaux champs intermédiaires u^{**} , Π^* et ρ^* , on calculera d'abord Π^* à partir de l'équation précédente (II-33) (système linéaire tridiagonal) puis ρ^* à l'aide de l'équation (II-32) et enfin u^{**} de l'équation (II-29).

Par suite, on procède au calcul de la température intermédiaire correspondante, à partir de la forme implicite de l'équation de conservation de l'énergie qui s'écrit:

$$\frac{\rho^* T^* - \rho^n T^n}{\delta t} + (\rho^* u^{**} T^*)_x = -(\gamma - 1) \Pi^* u^{**} + \varepsilon (\alpha T_{xx}^* + \beta u_x^{**2}) \quad (\text{II-34})$$

$$\text{Où } \alpha = \frac{C_{p0}}{C_{v0}} P_r^{-1} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{4}{3} \gamma (\gamma - 1) \frac{c_0^2}{c_{01}^2}$$

Cette dernière équation se ramène également à un système tridiagonal qui permettra la détermination du champ T^* .

(3) Seconde pas correcteur :

On procède comme au premier pas correcteur, en utilisant cette fois-ci des champs intermédiaires. La première étape consiste à calculer un nouveau champ de vitesse u^{***} avec la forme explicite de l'équation de conservation de la quantité de mouvement:

$$\frac{\rho^{**} u^{***} - \rho^* u^{**}}{\delta t} + (\rho^n u^n u^{**})_x = -E \Pi_x^{**} + \frac{4}{3} \varepsilon u_{xx}^* \quad (\text{II-35})$$

Auparavant, on procédera au calcul de Π^{**} et ρ^{**} en employant la même technique d'élimination de u^{***} présentée pour le premier pas correcteur. On a alors:

$$E \delta t (\Pi^{**} - \Pi^*)_{xx} = \frac{\rho^{**} - \rho^*}{\delta t} + (\rho^* u^{**})_x \quad (\text{II-36})$$

Et

$$\rho^{**} = \Pi^{**} \Phi^* = \Pi^{**} \Phi(\rho^*, T^*) \quad (\text{II-37})$$

D'où l'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\rho^{**} T^{**} - \rho^n T^n}{\delta t} + (\rho^{**} u^{***} T^{**})_x = -(\gamma - 1) \Pi^{**} u^{***} + \varepsilon (\alpha T_{xx}^{**} + \beta u_x^{***2}) \quad (\text{II-38})$$

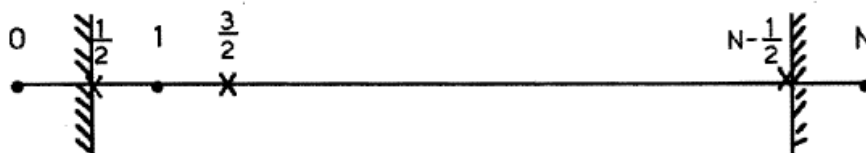
De cette manière, on peut construire une succession de pas correcteurs jusqu'à obtenir la solution la plus précise. En général, deux pas de correction suffisent amplement pour une précision en $O(\delta t^2)$. Dans le cadre de notre étude, les variations des quantités, très importantes en début d'application, nous imposent d'aller beaucoup plus loin en correction.

Au dernier pas correcteur, les solutions recherchées au pas de temps $n+1$ sont égalisées avec les dernières valeurs intermédiaires. Ainsi après deux pas correcteurs, on aura :

$$u^{n+1} = u^{***} \quad , \quad \rho^{n+1} = \rho^{**} \quad , \quad \Pi^{n+1} = \Pi^{**} \quad \text{et} \quad T^{n+1} = T^{**}$$

II-4-2 Discrétisation :

La discrétisation des différentes équations se fait par la méthode des différences finies sur une grille à schéma décalé.



Maillage à schéma décalé : • Points de pression et de densité.

x Points de vitesse et de température.

II-4-2-1 Discrétisation en temps :

La dérivée par rapport au temps est approximée par un schéma du 1^{er} ordre :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u^{n+1} - u^n}{\delta t}$$

II-4-2-2 Discrétisation en espace :

On utilise des schémas de discrétisation centrés du second 2nd ordre.

- **Dérivée première d'une fonction f :**

$$\frac{df}{dx}(x_i) \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{2\Delta x}$$

- **Dérivée seconde d'une fonction f :**

$$\frac{d^2f}{dx^2}(x_i) \approx \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Pour les valeurs aux limites, on utilise un schéma de discrétisation décentré:

$$\frac{df}{dx}(x_i) \approx \frac{1}{2\Delta x} (3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2})$$

Ce schéma au second ordre est souvent utilisé pour approximer les dérivées normales aux frontières.

En fait les dérivées en espace ne seront pas exactement discrétisées de cette manière puisque, pour des raisons de stabilité, on emploie un maillage décalé et à pas variable. Ainsi pour le paramètre de vitesse u , on aura:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+3/2}^n - u_{i-1/2}^n}{2\Delta x}$$

II-4-2-3 Grille à pas variable :

L'intérêt de ce type de grilles est de concentrer un plus grand nombre de points dans les zones de forts gradients, c'est-à-dire, dans le cadre de notre étude, au niveau de la couche limite dont on doit impérativement tenir compte. Il s'agit donc de trouver une fonction telle que l'image d'une grille à pas constant soit la grille à pas variables désirée. La fonction adéquate est une bijection de $[0,1]$ sur $[0,1]$ définie de la manière suivante [07] :

$$\Psi(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tan\left(\frac{\pi\left(x - \frac{1}{2}\right)}{1+\beta}\right)}{\tan\left(\frac{\pi}{2(1+\beta)}\right)} \right)$$

Où β est un paramètre qui permet d'ajuster la répartition des points de la grille à pas variables. Il permet d'obtenir un maillage plus ou moins resserré sur les bords. Le choix du nombre de points détermine une grille à pas constants dont l'image par la fonction Ψ^{-1} est la grille à pas variables.

Ainsi le nombre de points contenu dans l'intervalle $[0 ; 5E-5]$, suivant la valeur de β est donné par le tableau suivant:

β	0,06	0,04	0,03	0,02	0,015	0,01
N	7	10	13	19	25	36

Lors de la discrétisation en espace, on fait donc une distinction entre les indices selon les grandeurs considérées (indice entier pour la pression et la densité et indice demi-entier ($i-1/2, i+1/2, \dots$) pour la vitesse et la température). On doit aussi tenir compte de la fonction Ψ pour exprimer les dérivées, soit l'introduction des formulations suivantes:

$$\frac{df}{dx} = \frac{df}{d\Psi} \frac{d\Psi}{dx}$$

Et

$$\frac{d^2f}{dx^2} = \frac{d^2f}{d\Psi^2} \left(\frac{d\Psi}{dx} \right)^2 + \frac{df}{d\Psi} \frac{d^2\Psi}{dx^2}$$

Les termes $\frac{d\Psi}{dx}$ et $\frac{d^2\Psi}{dx^2}$ ne dépendent que du maillage et sont donc calculés en même temps que celui-ci et une fois pour toutes. Cette méthode est plus simple que celle qui consiste à discrétiser toutes les équations différentielles directement, avec le maillage à pas variable.

II-4-3 Résolution après discrétisation:

En discrétisant les équations précédentes selon les schémas de discrétisation énumérés précédemment, on obtient de nouvelles équations à chaque étape d'application de la méthode PISO.

P et ρ sont calculées aux nœuds c'est-à-dire aux points $x_i, i = 0, N$

u et T sont calculées aux interfaces des nœuds c'est-à-dire aux points $x_{i+1/2}, i = 0, N-1$

Le nombre de nœuds choisis pour cette étude est de deux cent (200) nœuds $N=200$.

a) Pas prédicteur :

L'équation qui traduit la conservation de la quantité de mouvement s'écrit sous forme semi-implicite :

$$\frac{(\rho^n u^*)_{i+\frac{1}{2}} - (\rho^n u^n)_{i+\frac{1}{2}}}{\delta t} + \frac{(\rho^n u^n u^*)_{i+\frac{3}{2}} - (\rho^n u^n u^*)_{i-\frac{1}{2}}}{2\delta x} = -\frac{1}{\gamma} \frac{c_{01}'^2}{c_0'^2} \frac{(P_{i+1}^n - P_i^n)}{\delta x} + \frac{4}{3} \varepsilon \frac{\left(u_{i+\frac{3}{2}}^* - 2u_{i+\frac{1}{2}}^* + u_{i-\frac{1}{2}}^* \right)}{\delta x^2} \quad (\text{II-39})$$

Cette équation se met sous la forme suivante :

$$\alpha_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2}}^* + \alpha_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2}}^* + \alpha_{i+\frac{3}{2}} u_{i+\frac{3}{2}}^* = \frac{(\rho^n u^n)_{i+\frac{1}{2}}}{\delta t} - \frac{1}{\gamma} \frac{c_{01}'^2}{c_0'^2} \frac{(P_{i+1}^n - P_i^n)}{\delta x} \quad (\text{II-40})$$

$$i = 1, N-2$$

Avec :

$$\alpha_{i-\frac{1}{2}} = -\frac{(\rho^n u^n)_{i-\frac{1}{2}}}{2\delta x} - \frac{4}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x^2}$$

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\rho_{i+\frac{1}{2}}^n}{\delta t} + \frac{8}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x^2}$$

$$\alpha_{i+\frac{3}{2}} = \frac{(\rho^n u^n)_{i+\frac{3}{2}}}{2\delta x} - \frac{4}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x^2}$$

Avec les conditions aux limites suivantes :

$$u_{1/2}^* = u_{N-1/2}^* = 0$$

La résolution du système tridiagonal donne le champ de vitesse intermédiaire u^* qui ne vérifie aucune des équations. Les autres variables conservent les valeurs à l'itération n . Pour corriger cette première approximation, le pas prédicteur est suivi de pas correcteurs qui calculent les autres champs intermédiaires en fonction des quantités déjà obtenues.

b) 1^{er} pas correcteur :

L'équation de la quantité de mouvement discrétisée s'écrit alors sous la forme explicite suivante :

$$\frac{(\rho^* u^{**})_{i+\frac{1}{2}} - (\rho^n u^n)_{i+\frac{1}{2}}}{\delta t} + \frac{(\rho^n u^n u^{**})_{i+\frac{3}{2}} - (\rho^n u^n u^{**})_{i-\frac{1}{2}}}{2\delta x} = -\frac{1}{\gamma} \frac{c_{01}'^2}{c_0'^2} \frac{(P_{i+1}^* - P_i^*)}{\delta x} + \frac{4}{3} \varepsilon \frac{\left(u_{i+\frac{3}{2}}^{**} - 2u_{i+\frac{1}{2}}^{**} + u_{i-\frac{1}{2}}^{**} \right)}{\delta x^2} \quad (\text{II-41})$$

En application de la méthode PISO, on met les termes diagonaux à gauche et on rend tout ce qui est à droite explicite. On exprime aussi ρ^* sous forme explicite ($\rho^* = \rho^n$), l'équation devient alors :

$$\left(\frac{1}{\delta t} + \frac{8}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x^2 \rho_{i+\frac{1}{2}}^n} \right) (\rho^* u^{**})_{i+\frac{1}{2}} = \frac{(\rho^n u^n u^*)_{i-\frac{1}{2}} - (\rho^n u^n u^*)_{i+\frac{3}{2}}}{2\delta x} - \frac{1}{\gamma} \frac{c_{01}'^2}{c_0'^2} \frac{(P_{i+1}^* - P_i^*)}{\delta x} + \frac{4}{3} \varepsilon \frac{\left(u_{i+\frac{3}{2}}^* + u_{i-\frac{1}{2}}^* \right)}{\delta x^2} + \frac{(\rho^n u^n)_{i+\frac{1}{2}}}{\delta t} \quad (\text{II-42})$$

On retranche de cette équation l'équation (II-39) du pas prédicteur écrite sous la même forme. On obtient alors l'équation suivante :

$$\left(\frac{1}{\delta t} + \frac{8}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x^2 \rho_{i+\frac{1}{2}}^n} \right) (\rho^* u^{**} - \rho^n u^*)_{i+\frac{1}{2}} = -\gamma^{-1} \frac{c_{01}'^2}{c_0'^2} \frac{(\tilde{P}_{i+1} - \tilde{P}_i)}{\delta x} \quad (\text{II-43})$$

Avec : $\tilde{P}_i = P_i^* - P_i^n$

On pose :

$$\left(\frac{1}{\delta t} + \frac{8}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x^2 \rho_{i+\frac{1}{2}}^n} \right)^{-1} = \eta_{i+\frac{1}{2}}$$

L'équation (II-43) devient :

$$(\rho^* u^{**} - \rho^n u^*)_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{\eta_{i+\frac{1}{2}} c_{01}'^2}{\gamma c_0'^2} \frac{(\tilde{P}_{i+1} - \tilde{P}_i)}{\delta x} \quad (\text{II-44})$$

Et finalement :

$$(\rho^* u^{**} - \rho^n u^*)_{i+\frac{1}{2}} = -\xi_{i+\frac{1}{2}} \frac{(\tilde{P}_{i+1} - \tilde{P}_i)}{\delta x} \quad (\text{II-45})$$

$i = 1, N-2$

Avec :

$$\xi_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\eta_{i+\frac{1}{2}} c_{01}'^2}{\gamma c_0'^2}$$

▪ **Remarque :**

En suivant la méthode proposée par Issa [10], on obtient des expressions similaires à celle qu'il a établies. Ainsi l'équation issue de la différence entre le pas prédicteur et le pas correcteur s'écrit alors :

$$\left(\frac{1}{\delta t} - \frac{A_0}{\rho_{i+\frac{1}{2}}^n} \right) (\rho^* u^{**} - \rho^n u^*)_{i+\frac{1}{2}} = -\gamma^{-1} \frac{c_{01}^{\prime 2}}{c_0^{\prime 2}} \frac{(\tilde{P}_{i+1} - \tilde{P}_i)}{\delta x} \quad (\text{II-46})$$

Par analogie, on en déduit donc que :

$$A_0 = -\frac{8}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x^2}$$

Où A_0 représente le terme diagonal des flux diffusifs et convectifs dans l'expression de l'équation de conservation de la quantité de mouvement.

▪ **Equation de continuité :**

L'équation de continuité discrétisée s'écrit :

$$\frac{(\rho^* u^{**})_{i+\frac{1}{2}} - (\rho^* u^{**})_{i-\frac{1}{2}}}{\delta x} = -\frac{\rho_i^* - \rho_i^n}{\delta t} \quad (\text{II-47})$$

$i = 1, N-1$

Comme, on a d'après l'équation d'état : $\rho_i^* = \Phi_i^n P_i^*$ et $\rho_i^n = \Phi_i^n P_i^n$

$$i = 1, N-1$$

Avec : $\Phi_i^n = (T_i^n)^{-1}$

Et

$$\Phi_i^n = \left(\frac{T_i^n}{1 - b \rho_0 \rho_i^n} - \frac{a \rho_0^2}{P_{01}} \rho_i^n \right)^{-1} ; \text{ Pour le gaz de Van Der Waals.}$$

L'équation (II-47) devient :

$$\left(\rho^* u^{**}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\rho^* u^{**}\right)_{i-\frac{1}{2}} = -\delta x \frac{\Phi_i^n (P_i^* - P_i^n)}{\delta t} = -\delta x \frac{\Phi_i^n \tilde{P}_i}{\delta t} \quad (\text{II-48})$$

Reprenons l'équation (II-45) écrite sous la forme suivante :

$$\left(\rho^* u^{**}\right)_{i+\frac{1}{2}} = \left(\rho^n u^*\right)_{i+\frac{1}{2}} - \xi_{i+\frac{1}{2}} \frac{\left(\tilde{P}_{i+1} - \tilde{P}_i\right)}{\delta x} \quad (\text{II-49})$$

On peut alors l'écrire pour l'indice $(i-1/2)$:

$$\left(\rho^* u^{**}\right)_{i-\frac{1}{2}} = \left(\rho^n u^*\right)_{i-\frac{1}{2}} - \xi_{i-\frac{1}{2}} \frac{\left(\tilde{P}_i - \tilde{P}_{i-1}\right)}{\delta x} \quad (\text{II-50})$$

En remplaçant ces deux expressions (II-49 et II-50) dans l'équation de continuité (II-48), on obtient la forme suivante :

$$\left(\rho^n u^*\right)_{i+\frac{1}{2}} - \xi_{i+\frac{1}{2}} \frac{\left(\tilde{P}_{i+1} - \tilde{P}_i\right)}{\delta x} - \left(\rho^n u^*\right)_{i-\frac{1}{2}} - \xi_{i-\frac{1}{2}} \frac{\left(\tilde{P}_i - \tilde{P}_{i-1}\right)}{\delta x} = -\delta x \frac{\Phi_i^n \tilde{P}_i}{\delta t} \quad (\text{II-51})$$

D'où :

$$\xi_{i-\frac{1}{2}} \tilde{P}_{i-1} - \left(\xi_{i+\frac{1}{2}} + \xi_{i-\frac{1}{2}} - \frac{\delta x^2 \Phi_i^n}{\delta t}\right) \tilde{P}_i + \xi_{i+\frac{1}{2}} \tilde{P}_{i+1} = \delta x \left[\left(\rho^n u^*\right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\rho^n u^*\right)_{i-\frac{1}{2}} \right] \quad (\text{II-52})$$

$i = 1, N-1$

L'équation (II-45) est réécrite en remplaçant ρ_i^* et ρ_i^n par leurs expressions, soit :

$$u_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \Phi_{i+\frac{1}{2}}^n \left(P_{i+\frac{1}{2}}^* - P_{i+\frac{1}{2}}^n \right) = - \xi_{i+\frac{1}{2}} \frac{\left(\tilde{P}_{i+1} - \tilde{P}_i \right)}{\delta x} \quad (\text{II-53})$$

Cette équation s'écrit aussi :

$$u_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \Phi_{i+\frac{1}{2}}^n \tilde{P}_{i+\frac{1}{2}} = - \xi_{i+\frac{1}{2}} \frac{\left(\tilde{P}_{i+1} - \tilde{P}_i \right)}{\delta x} \quad (\text{II-54})$$

Soit encore :

$$u_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \Phi_{i+\frac{1}{2}}^n \left(\frac{\tilde{P}_{i+1} - \tilde{P}_i}{2} \right) = - \xi_{i+\frac{1}{2}} \frac{\left(\tilde{P}_{i+1} - \tilde{P}_i \right)}{\delta x} \quad (\text{II-55})$$

Les conditions aux limites pour l'équation d'état sont déduites de l'équation (II-55) écrite en $i = 0$ et $i = (N-1)$. La vitesse aux parois est imposée et donc toutes ses valeurs intermédiaires sont égales à la valeur fixée initialement.

Pour $i = 0$, on a alors :

$$u_{\frac{1}{2}}^{n+1} \Phi_{\frac{1}{2}}^n \left(\frac{\tilde{P}_1 + \tilde{P}_0}{2} \right) = - \xi_{\frac{1}{2}} \frac{\left(\tilde{P}_1 - \tilde{P}_0 \right)}{\delta x} \quad (\text{II-56})$$

Pour $i = (N-1)$, on a :

$$u_{N-\frac{1}{2}}^{n+1} \Phi_{N-\frac{1}{2}}^n \left(\frac{\tilde{P}_N + \tilde{P}_{N-1}}{2} \right) = - \xi_{N-\frac{1}{2}} \frac{\left(\tilde{P}_N - \tilde{P}_{N-1} \right)}{\delta x} \quad (\text{II-57})$$

Les conditions aux limites (II-56) et (II-57) qui sont de type Robin deviennent de type Newman dans le cas de parois imperméables.

Ce qui nous permet de déterminer les valeurs des pressions sur les parois amont et aval, soit, successivement:

$$\mathbf{u}_{\frac{1}{2}}^{n+1} = 0 \quad \tilde{\mathbf{P}}_0 = \tilde{\mathbf{P}}_1 \quad (\text{II-58})$$

Et

$$\mathbf{u}_{N-\frac{1}{2}}^{n+1} = 0 \quad \tilde{\mathbf{P}}_N = \tilde{\mathbf{P}}_{N-1} \quad (\text{II-59})$$

La résolution du système issu de l'équation (II-52) donne le champ de pression \mathbf{P}^* , puis ρ^* se déduit de l'équation d'état et \mathbf{u}^{**} de l'équation de quantité de mouvement.

c) Pas prédicteur pour l'énergie :

Le nouveau champ de température \mathbf{T}^* est calculé à partir de la forme implicite de l'équation de conservation de l'énergie. Cette équation discrétisée s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{(\rho^* \mathbf{T}^*)_{i+\frac{1}{2}} - (\rho^n \mathbf{T}^n)_{i+\frac{1}{2}}}{\delta t} + \frac{(\rho^* \mathbf{u}^{**} \mathbf{T}^*)_{i+\frac{3}{2}} - (\rho^* \mathbf{u}^{**} \mathbf{T}^*)_{i-\frac{1}{2}}}{2 \delta x} = -(\gamma-1) \Pi_{i+\frac{1}{2}}^* \frac{(\mathbf{u}_{i+\frac{3}{2}}^{**} - \mathbf{u}_{i-\frac{1}{2}}^{**})}{2 \delta x} \\ + \frac{4}{3} \varepsilon \gamma (\gamma-1) \left[\frac{(\mathbf{u}_{i+\frac{3}{2}}^{**} - \mathbf{u}_{i-\frac{1}{2}}^{**})}{2 \delta x} \right]^2 + \frac{\Gamma \varepsilon}{P_r} \frac{(\mathbf{T}_{i+\frac{3}{2}}^* - 2\mathbf{T}_{i+\frac{1}{2}}^* + \mathbf{T}_{i-\frac{1}{2}}^*)}{\delta x^2} \end{aligned} \quad (\text{II-60})$$

$$\text{Avec : } \Pi_{i+\frac{1}{2}}^* = \left(\mathbf{P}_{i+\frac{1}{2}}^* + \frac{a \rho_0^2 \rho_{i+\frac{1}{2}}^{*2}}{P_{01}} \right)$$

Cette équation peut se condenser sous la forme suivante :

$$\beta_{i-\frac{1}{2}} \mathbf{T}_{i-\frac{1}{2}}^* + \beta_{i+\frac{1}{2}} \mathbf{T}_{i+\frac{1}{2}}^* + \beta_{i+\frac{3}{2}} \mathbf{T}_{i+\frac{3}{2}}^* = \gamma_{i+\frac{1}{2}} \quad (\text{II-61})$$

$$i = 1, N-2$$

Avec :

$$\beta_{i-\frac{1}{2}} = -\frac{(\rho^* \mathbf{u}^{**})_{i-\frac{1}{2}}}{2 \delta x} - \frac{\Gamma \varepsilon}{P_r \delta x^2}$$

$$\beta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\rho_{i+\frac{1}{2}}^*}{\delta t} + \frac{2 \Gamma \varepsilon}{P_r \delta x^2}$$

$$\beta_{i+\frac{3}{2}} = \frac{(\rho^* u^{**})_{i-\frac{3}{2}}}{2 \delta x} - \frac{\Gamma \varepsilon}{P_r \delta x^2}$$

La résolution du système linéaire tridiagonal (II-61) donne le champ de température intermédiaire T^* .

d) Second pas correcteur :

On procède comme au premier pas correcteur, mais en utilisant les champs intermédiaires u^{**} , T^* , P^* et ρ^* comme valeurs de départ. Le calcul de u^{***} se fait alors avec la forme explicite de l'équation de quantité de mouvement. Cette équation discrétisée s'écrit de la manière suivante:

$$\frac{(\rho^{**} u^{***})_{i+\frac{1}{2}} - (\rho^n u^n)_{i+\frac{1}{2}}}{\delta t} + \frac{(\rho^n u^n u^{***})_{i+\frac{3}{2}} - (\rho^n u^n u^{***})_{i-\frac{1}{2}}}{2 \delta x} =$$

$$-\frac{1}{\gamma} \frac{c_{01}'^2}{c_0'^2} \frac{(P_{i+1}^{**} - P_i^{**})}{\delta x} + \frac{4}{3} \varepsilon \frac{\left(u_{i+\frac{3}{2}}^{***} - 2 u_{i+\frac{1}{2}}^{***} + u_{i-\frac{1}{2}}^{***} \right)}{\delta x^2} \quad (\text{II-62})$$

En transférant les termes diagonaux à gauche et en abaissant les indices des termes non-diagonaux des flux convectifs et diffusifs, on obtient l'équation suivante:

$$\left(\frac{1}{\delta t} + \frac{8}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x^2 \rho_{i+\frac{1}{2}}^{**}} \right) (\rho^{**} u^{***})_{i+\frac{1}{2}} = \frac{(\rho^n u^n u^{**})_{i-\frac{1}{2}} - (\rho^n u^n u^{**})_{i+\frac{3}{2}}}{2 \delta x}$$

$$-\gamma^{-1} \frac{c_{01}'^2}{c_0'^2} P_x^{**} + \frac{4}{3} \varepsilon \frac{\left(u_{i+\frac{3}{2}}^{**} + u_{i-\frac{1}{2}}^{**} \right)}{\delta x^2} + \frac{(\rho^n u^n)_{i+\frac{1}{2}}}{\delta t} \quad (\text{II-63})$$

Qui peut aussi s'écrire :

$$\left(\frac{1}{\delta t} + \frac{8}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x^2 \rho_{i+\frac{1}{2}}^{**}} \right) (\rho^{**} u^{***})_{i+\frac{1}{2}} = \frac{(\rho^n u^n u^{**})_{i-\frac{1}{2}} - (\rho^n u^n u^{**})_{i+\frac{3}{2}}}{2 \delta x} - \gamma^{-1} \frac{c_{01}^{\prime 2}}{c_0^{\prime 2}} \bar{P}_x^{**}$$

$$+ \frac{4}{3} \varepsilon \frac{\left(u_{i+\frac{3}{2}}^{**} + u_{i-\frac{1}{2}}^{**} \right)}{\delta x^2} + \frac{(\rho^n u^n)_{i+\frac{1}{2}}}{\delta t} - \frac{8\varepsilon}{3\delta x^2} \left(1 - \frac{\rho_{i+\frac{1}{2}}^*}{\rho_{i+\frac{1}{2}}^n} \right) u_{i+\frac{1}{2}}^{**} \quad (\text{II-64})$$

On soustrait à cette équation, l'équation du premier pas correcteur (II-42), ce qui donne la forme ci-dessous :

$$\eta_{i+\frac{1}{2}}^{*-1} \left[(\rho^{**} u^{***})_{i+\frac{1}{2}} - (\rho^* u^{**})_{i+\frac{1}{2}} \right] = \frac{\left(\rho^n u^n \bar{u} \right)_{i-\frac{1}{2}} - \left(\rho^n u^n \bar{u} \right)_{i+\frac{3}{2}}}{2 \delta x}$$

$$- \gamma^{-1} \frac{c_{01}^{\prime 2}}{c_0^{\prime 2}} \bar{P}_x + \frac{4}{3} \varepsilon \frac{\left(\bar{u}_{i+\frac{3}{2}} + \bar{u}_{i-\frac{1}{2}} \right)}{\delta x^2} - \frac{8\varepsilon}{3\delta x^2} \left(1 - \frac{\rho_{i+\frac{1}{2}}^*}{\rho_{i+\frac{1}{2}}^n} \right) u_{i+\frac{1}{2}}^{**} \quad (\text{II-65})$$

Avec : $\bar{P} = P^{**} - P^*$ et $\bar{u} = u^{**} - u^*$

▪ **Equation de continuité :**

L'équation de continuité discrétisée s'écrit :

$$\frac{(\rho^{**} u^{***})_{i+\frac{1}{2}} - (\rho^{**} u^{***})_{i-\frac{1}{2}}}{\delta x} = - \frac{\rho_i^{**} - \rho_i^n}{\delta t} = - \frac{(\rho_i^{**} - \rho_i^*) + (\rho_i^* - \rho_i^n)}{\delta t}$$

$$= - \frac{\Phi_i^* \bar{P}_i}{\delta t} - \frac{\Phi_i^* P_i^*}{\delta t} + \frac{\rho_i^n}{\delta t} = - \frac{\Phi_i^* \bar{P}_i}{\delta t} - v_i \quad (\text{II-66})$$

$i = 1, N-1$

Avec : $\bar{P}_i = P_i^{**} - P_i^*$ et $v_i = \frac{\Phi_i^* P_i^*}{\delta t} - \frac{\rho_i^n}{\delta t}$

La combinaison entre l'équation de continuité (II-66) et l'équation qui la précède dans le deuxième pas correcteur (II-65), donne l'équation de pression pour ce pas de correction :

$$\begin{aligned}
 & -\eta_{i-\frac{1}{2}}^* \gamma^{-1} \frac{c_{01}^{\prime 2}}{c_0^{\prime 2}} \bar{P}_{i-1} + \left(\eta_{i-\frac{1}{2}}^* \gamma^{-1} \frac{c_{01}^{\prime 2}}{c_0^{\prime 2}} + \eta_{i+\frac{1}{2}}^* \gamma^{-1} \frac{c_{01}^{\prime 2}}{c_0^{\prime 2}} + \frac{\delta x^2 \Phi_i^*}{\delta t} \right) \bar{P}_i - \eta_{i+\frac{1}{2}}^* \gamma^{-1} \frac{c_{01}^{\prime 2}}{c_0^{\prime 2}} \bar{P}_{i+1} = \\
 & -\delta x^2 v_i - \delta x \left((\rho^* u^{**})_{i+\frac{1}{2}} - (\rho^* u^{**})_{i-\frac{1}{2}} \right) \\
 & - \eta_{i+\frac{1}{2}}^* \left(\frac{4}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x} \left(\bar{u}_{i+\frac{3}{2}} + \bar{u}_{i-\frac{1}{2}} \right) - \frac{(\rho^n u^n \bar{u})_{i+\frac{3}{2}} - (\rho^n u^n \bar{u})_{i-\frac{1}{2}}}{2} - \frac{8}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x} \left(1 - \frac{\rho^*}{\rho^n} \right)_{i+\frac{1}{2}} \right) \\
 & + \eta_{i-\frac{1}{2}}^* \left(\frac{4}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x} \left(\bar{u}_{i+\frac{1}{2}} + \bar{u}_{i-\frac{3}{2}} \right) - \frac{(\rho^n u^n \bar{u})_{i+\frac{1}{2}} - (\rho^n u^n \bar{u})_{i-\frac{3}{2}}}{2} - \frac{8}{3} \frac{\varepsilon}{\delta x} \left(1 - \frac{\rho^*}{\rho^n} \right)_{i-\frac{1}{2}} \right)
 \end{aligned}$$

$i = 2, N-2$ (II-67)

La résolution du système tridiagonal fournit le champ de pression P^{**} . P^{**} et u^{***} sont calculées de la même façon qu'au premier pas correcteur. Le nouveau champ de température T^{**} est calculé à partir de l'équation de l'énergie en prenant les nouvelles valeurs des champs de pression, vitesse et densité (P^{**} , u^{***} et ρ^{**}).

Les pas correcteurs peuvent ainsi être enchainés jusqu'à l'obtention de la précision souhaitée. Généralement ces deux pas de correction suffisent à réaliser la précision désirée et on n'a pas besoin d'aller au-delà. A l'itération (n+1), les champs prennent les valeurs obtenues au dernier pas correcteur. La succession de m pas correcteurs donne une précision de l'ordre de δt^m .

II-5 Conclusion

Cette étude porte sur des fluides à l'état supercritique, ces derniers sont alors instables vis-à-vis de la moindre perturbation thermique.

L'apesanteur permet d'éliminer les effets dus à la gravité terrestre. Cependant, la compressibilité des gaz considérés tend vers l'infini. Afin de prendre en compte cet effet, l'équation d'état est supposée d'être celle de Van Der Waals.

Nous sommes donc en présence d'un écoulement compressible, en régime instationnaire, à faible nombre de Mach. Toutes ces spécificités nécessitent un traitement numérique adéquat.

A cet égard, l'algorithme PISO décrit ci-dessus est particulièrement adapté à notre problème, pour la résolution du système composé des différentes équations de conservation (masse, quantité de mouvement et énergie) et de l'équation de Van Der Waals.

Les différentes opérations sur la pression et la vitesse sont découplées à chaque étape. Chaque pas prédictif explicite est suivi d'un certain nombre de pas correcteurs. En général, il suffit de deux pas de correction pour assurer la précision désirée.

Chapitre III

Discussion des Résultats

CHAPITRE III DISCUSSION DES RESULTATS

III-1 Introduction

Une première étude numérique exhaustive de l'effet piston est réalisée dans ce mémoire pour le dioxyde de carbone, pris comme référence, car ce dernier est considéré comme étant le fluide supercritique le plus stable et qui garde cet état pendant une longue durée. Par ailleurs, toutes les études analytiques et expérimentales, réalisées jusqu'à maintenant par les équipes de recherche dans ce domaine, utilisent le CO₂ à cause de ses propriétés singulières idéales par rapport aux autres fluides supercritiques.

Dans un premier temps, nous allons présenter les profils de vitesse et de température obtenus par le directeur de thèse [17] ; ensuite, on présente les différents profils des différents paramètres étudiés pour le CO₂ à savoir :

- Le profil de la vitesse pour plusieurs températures initiales à pas de temps fixe.
- Le profil de la température pour plusieurs températures initiales à pas de temps fixe.
- Le profil de la pression pour plusieurs températures initiales à pas de temps fixe.

Et ce, afin de comparer les résultats obtenus pour CO₂ de notre étude à ceux obtenus par le directeur de thèse.

En suite, nous présentons les profils des différents paramètres étudiés pour les trois autres fluides à savoir :

- L'acétylène C₂H₂
- L'éthane C₂H₆
- L'hydrogène H₂

Enfin, nous allons exposer des profils comparatifs, des différents paramètres, des trois fluides à savoir, le dioxyde de carbone, l'acétylène et l'éthane; l'hydrogène sera exclu de cette comparaison suite à sa température critique très éloignée de celle du CO₂ et de celles des deux autres fluides.

III-2 Paramètres de l'étude

Nous notons que dans le cas des fluides étudiés, à savoir le dioxyde de carbone, l'éthane, l'acétylène et l'hydrogène, les valeurs des constantes physiques utilisées sont les suivantes :

PARAMETRES	CO ₂	C ₂ H ₆	C ₂ H ₂	H ₂
RAPPORT DES CHALEURS SPECIFIQUES (γ)	1,4	1,1933	1,2598	1,409
CONDUCTIVITE THERMIQUE (w/m.K)	0,0685	0,0179	0,0185	0.1683
VISCOSITE DYNAMIQUE (η) (Pa.s) ou (Kg.m ⁻¹ .s ⁻¹)	339.10 ⁻⁷	85.10 ⁻⁷	95,4.10 ⁻⁷	86,5.10 ⁻⁷
COEFFICIENT DE VAN DER WAALS a (J.m ³ /Kg ²)	189	615,13	658	4932,4
COVOLUME b (m ³ /Kg)	9,75.10 ⁻⁴	21,2.10 ⁻⁴	19,75.10 ⁻⁴	106,7.10 ⁻⁴
VITESSE DU SON DANS LE FLUIDE SUPERCRITIQUE (m/s)	228,66	199,06	241,51	426,44
VITESSE DU SON DANS LE GAZ PARFAIT (m/s)	284,03	317,95	353,04	445,79
MASSE SPECIFIQUE INITIALE (Kg/m ³)	341,88	157,11	168,78	3,124
PRESSION INITIALE DANS LE GAZ PARFAIT (Pa)	1,9701.10 ⁷	1,331.10 ⁷	1,6695.10 ⁷	0,0441.10 ⁷
TEMPERATURE INITIALE (K)	305.215	306,4	309,8	34,2
TEMPERATURE CRITIQUE (K)	304.215	305,4	308,8	33,2
PRESSION CRITIQUE (Pa)	7,3825.10 ⁶	4,884.10 ⁶	6,191.10 ⁶	13.10 ⁶
CONSTANTE DES GAZ PARFAITS (J/Kg.K)	188,9	276,5	319,3	4124,3
PRESSION INITIALE DANS LE FLUIDE SUPERCRITIQUE (Pa)	7,4603.10 ⁶	4,7742.10 ⁶	6,2994.10 ⁶	0,4077.10 ⁶
TEMPS ACOUSTIQUE (s)	0,10933.10 ⁻⁴	1,2559.10 ⁻⁴	0,10352.10 ⁻⁴	0,058625.10 ⁻⁴
TEMPS DE DIFFUSION DE LA CHALEUR (s)	1,8132.10 ³	1,1050.10 ³	8,9110.10 ³	1,7704
PARAMETRE D'ECHELLE (ϵ)	1,7346.10 ⁻⁷	1,0872.10 ⁻⁷	0,93620.10 ⁻⁷	25,972.10 ⁻⁷
COEFFICIENT DE DIFFUSION THERMIQUE (κ_0) (m ² /s)	3,4469.10 ⁻⁹	5,6562.10 ⁻⁹	0,70138.10 ⁻⁹	353,02.10 ⁻⁸
VISCOSITE CINEMATIQUE (ν) (m ² /s)	0,99158.10 ⁻⁷	5,4103.10 ⁻⁷	0,56525.10 ⁻⁷	27,689.10 ⁻⁷

Tableau 3.1: valeurs des constantes physiques utilisées.

III-3 Résultats et discussions

Les résultats sont issus des simulations numériques d'un code de calcul élaboré au préalable pour le dioxyde de carbone par le directeur de thèse, ensuite adapté dans notre travail au langage Fortran 90 et est développé pour les autres fluides objets de ce travail.

Ces résultats issus des simulations sont obtenus à partir de la compilation de ce code de calcul dans un micro ordinateur ayant les caractéristiques suivantes (processeur : Intel Core 2 Duo processor T 7500 de 2.2 GHz, 800MHz FSB, 4MB L2 cache ; RAM : 2 GB DDR2) dans un temps d'exécution variant de 10 à 40 secondes.

Nous avons traité les cas des gaz obéissant à l'équation de van Der Waals suivants :

- a) CO₂
- b) C₂H₂
- c) C₂H₆
- d) H₂

Deux échelles de temps présentent a priori un intérêt:

- L'échelle de temps acoustique au cours de laquelle la température augmente continuellement pendant qu'une couche limite se forme ($t_0 > t > t_a$).
- L'échelle de temps intermédiaire entre t_0 et t_d , qui se situe entre le moment de l'arrêt du chauffage et l'instant où l'équilibre thermique par diffusion est atteint ($t_d > t > t_0$).

Les résultats obtenus pour le CO₂ lors des travaux du directeur de thèse sont présentés comme suit :

a. Pas de temps fixe, T_0 variable :

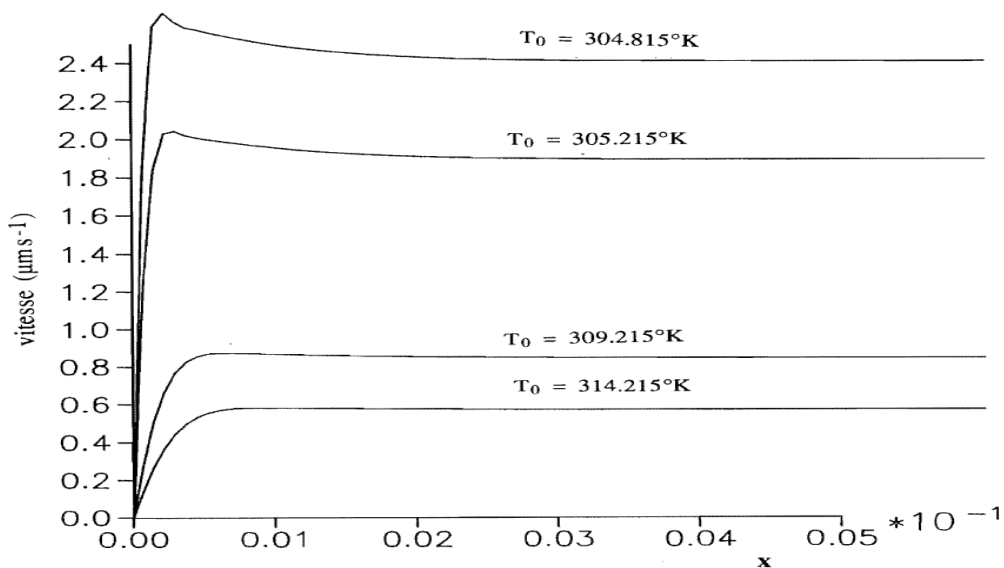


Figure 3.1 : Profil de vitesse dans la couche limite pour différentes températures initiales [17]

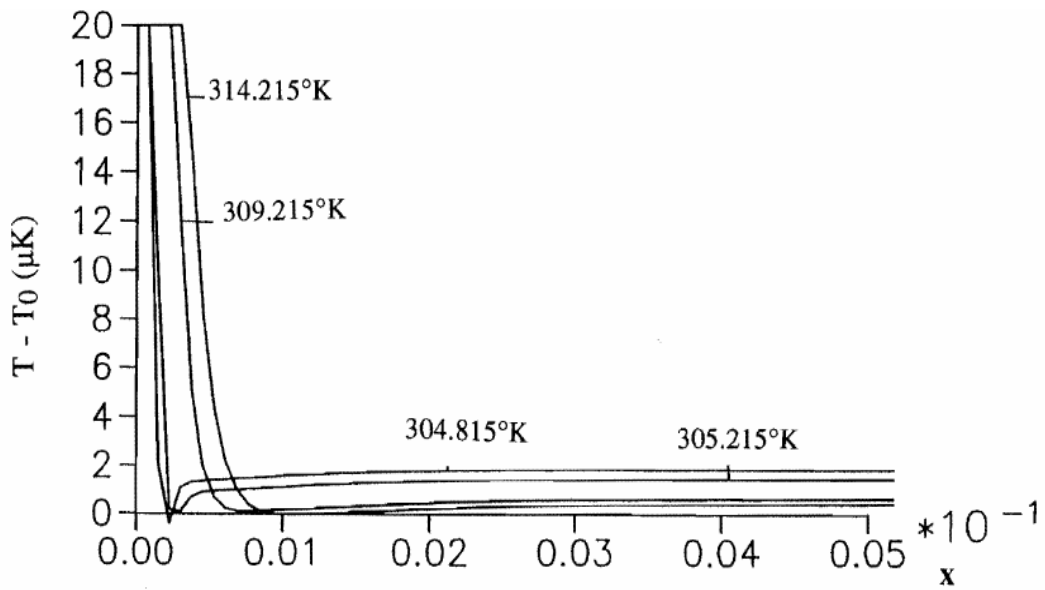


Figure 3.2 : Profil de la température dans la couche limite pour différentes températures initiales [17]

b. T_0 fixe, pas de temps variable :

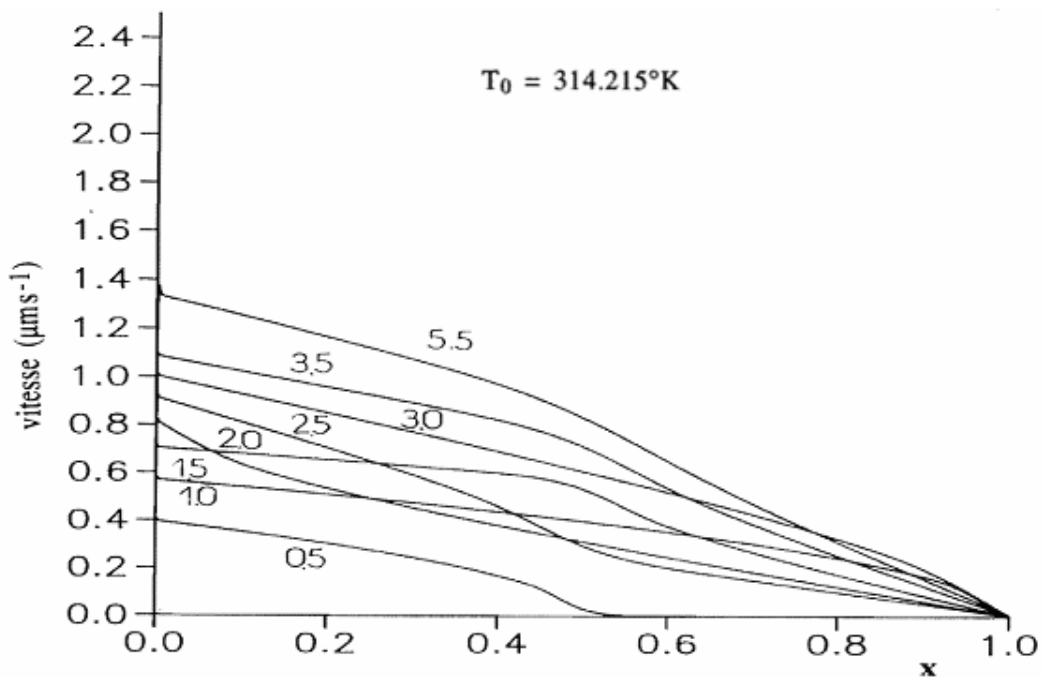


Figure 3.3 : Profil de vitesse dans la couche limite pour différents pas de temps [17]

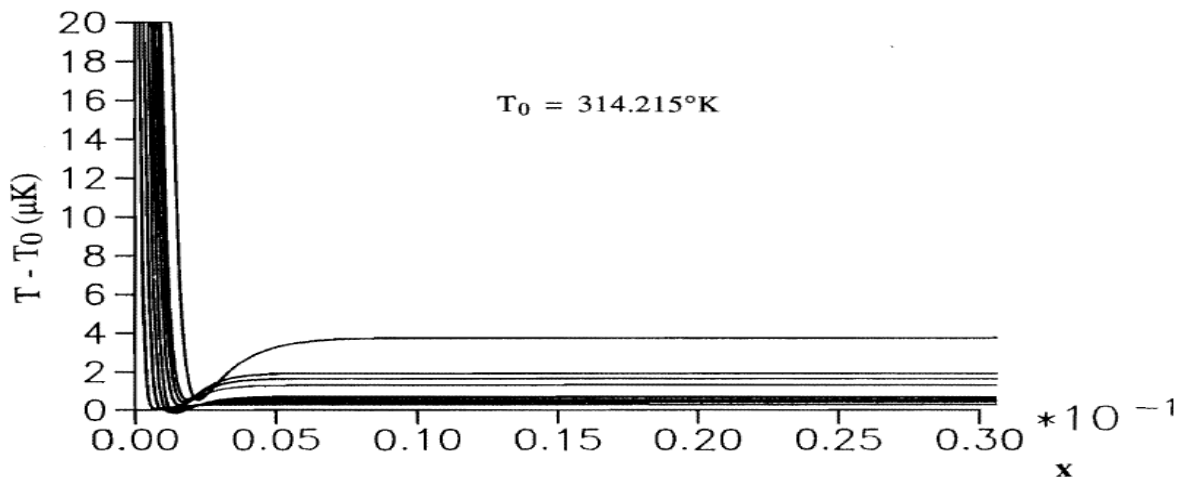


Figure 3.4 : Profil de la température dans la couche limite pour différents pas de temps [17]

Dans notre étude, nous nous intéressons à l'échelle de temps acoustique, aussi bien dans la couche limite que dans le Bulk.

III-3-1 Résultats obtenus pour le CO₂ :

1) Evolution de la vitesse pour le CO₂ :

Le comportement de la vitesse dans la couche limite est visible sur la figure 3.5 pour trois températures initiales du fluide : Une fine couche limite, présentant un gradient positif se développe sur la paroi gauche. Il y a d'abord augmentation de la vitesse avec un pic, puis elle décroît progressivement dans le reste du volume. L'énergie thermique apportée par le chauffage sur la paroi est transformée en énergie cinétique. Plus on s'éloigne de la température critique, plus la vitesse augmente, et, plus faible est la quantité d'énergie transportée par l'onde acoustique qui se propage dans le reste du volume (figure 3.6). d'autre part, l'ordre de grandeur des valeurs de vitesse sur la figure 3.6 est similaire à ceux de la figure 3.1.

2) Evolution de la température pour le CO₂ :

Nous remarquons sur la figure 3.7 que la température diminue à partir de la paroi, à cause de la transformation de l'énergie thermique en énergie cinétique et passe par un minimum au point où la vitesse présente un maximum. Le recouvrement de température est plus important dans le domaine extérieur à la couche limite du fluide. C'est sans doute l'expansion de la couche limite qui est à l'origine de ce phénomène de conversion de l'énergie cinétique en chaleur. De plus, l'ordre de grandeur des valeurs de température sur le figure 3.7 est similaire à celui de la figure 3.2.

3) Evolution de la pression pour le CO₂ :

La perturbation de pression induite par cette couche limite (Figure 3.8) exhibe un gradient qui correspond à la propagation d'une onde à une vitesse inférieure à c_0 , à cause du phénomène de

dispersion. Cette onde est ensuite réfléchiée par la paroi droite ($x=L$) et se mélange aux autres ondes qui continuent d'être générées par l'évolution de la couche limite.

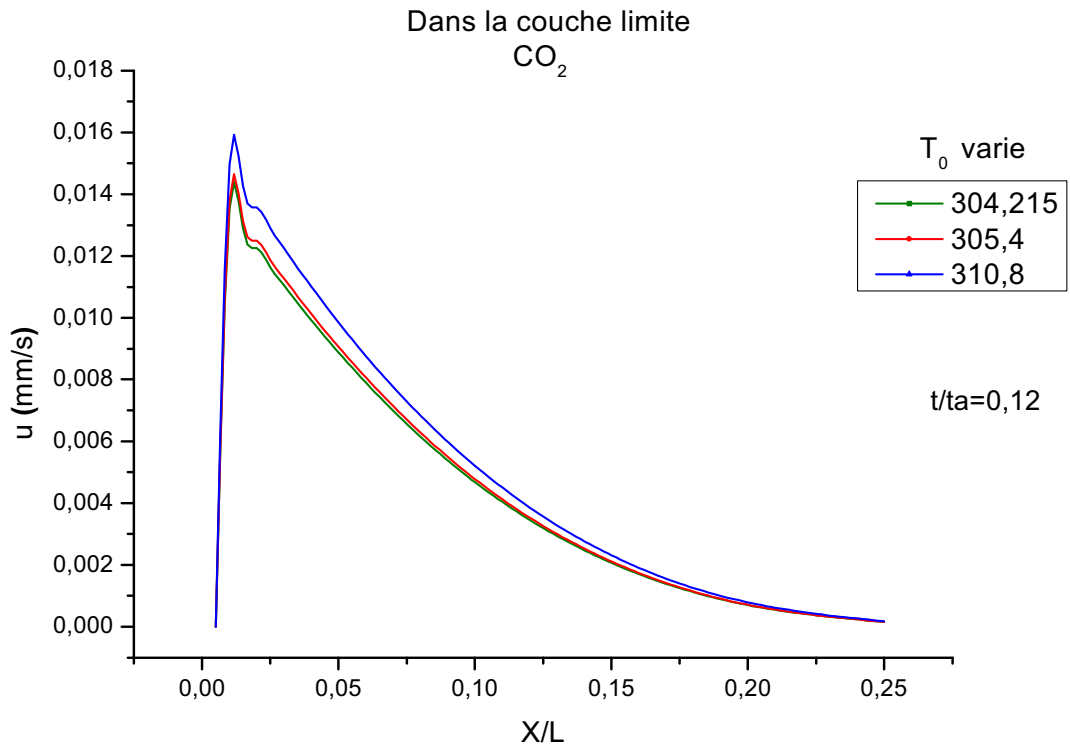


Figure 3.5 : profil de la vitesse du CO₂ dans la couche limite

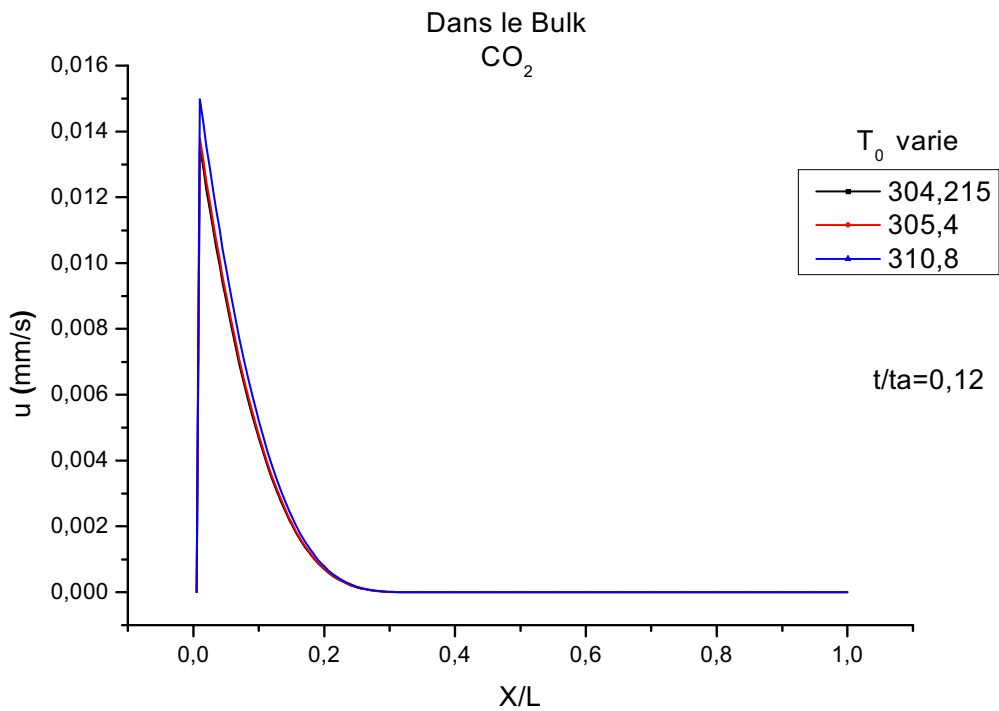


Figure 3.6 : profil de la vitesse du CO₂ dans le volume (Bulk)

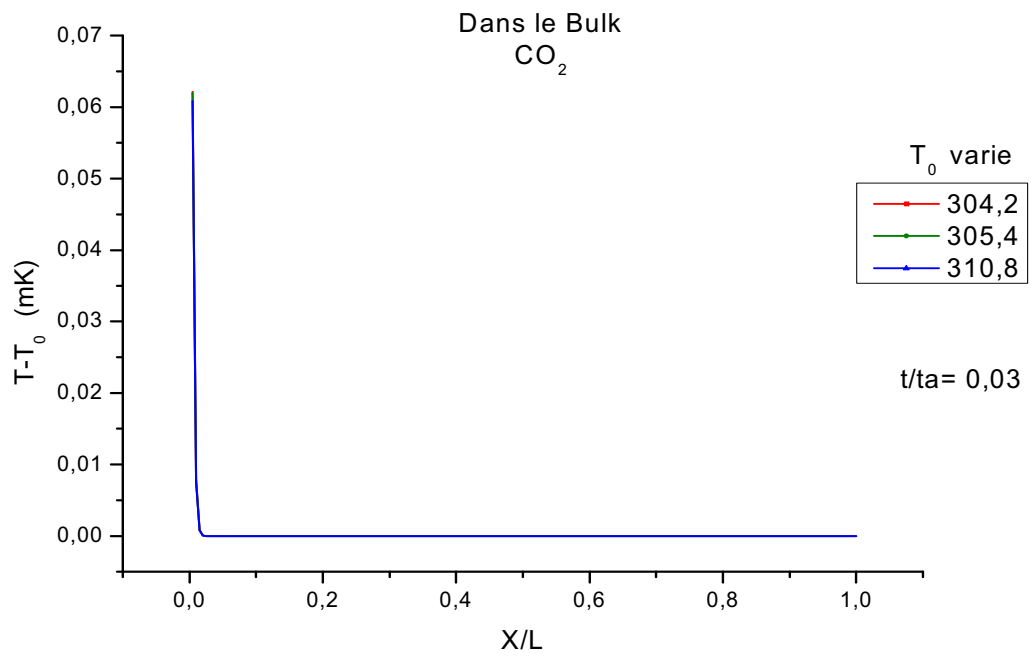


Figure 3.7 : profil de la température du CO₂ dans le Bulk

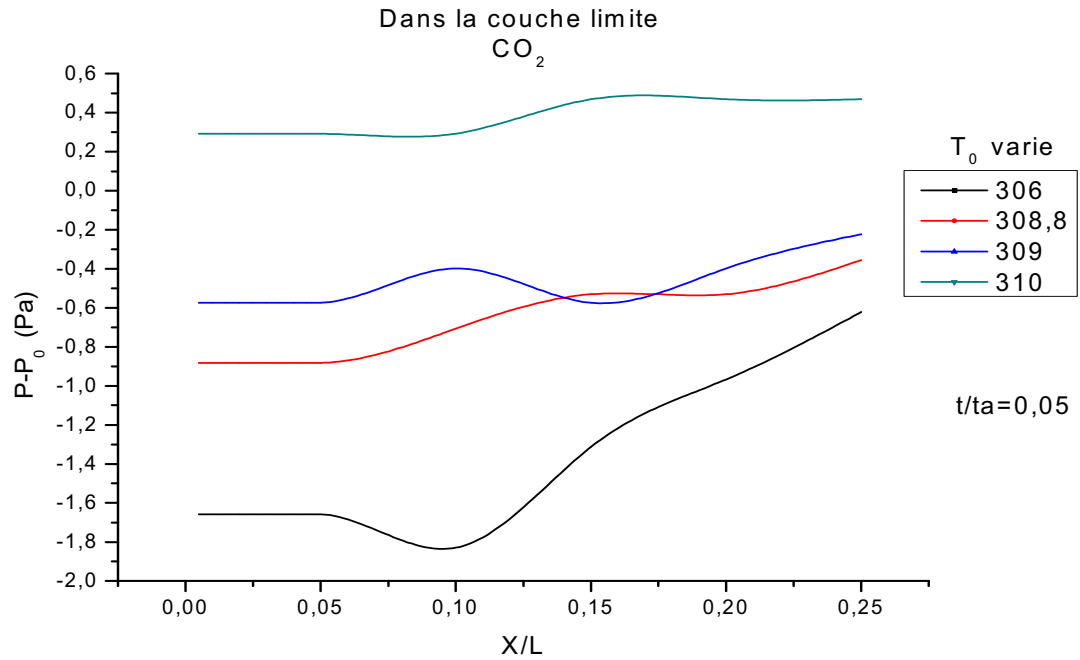


Figure 3.8 : profil de la pression du CO₂ dans la couche limite

III-3-2 Résultats obtenus pour le C_2H_2 :

1) Evolution de la vitesse pour le C_2H_2 :

On observe le même phénomène que pour le CO_2 , c'est-à-dire que la vitesse augmente parce qu'il y a transformation de la chaleur emmagasiné sur la paroi en énergie cinétique, mais comme le montre la figure 3.9 les valeurs sont plus importantes que celle du CO_2 et du C_2H_6 comme nous le verrons ultérieurement (figure 3.17). Ensuite, la vitesse diminue du fait qu'il y a une reconversion de l'énergie cinétique en chaleur (figure 3.10).

2) Evolution de la température pour le C_2H_2 :

Nous remarquons sur les figures (figure 3.11) et (figure 3.12) le même phénomène que pour le CO_2 , c'est-à-dire la température diminue à partir de la paroi, à cause de la transformation d'énergie thermique en énergie cinétique et passe par un minimum au point où la vitesse présente un maximum. Les valeurs sont plus importantes que celle de CO_2 et de C_2H_6 (figure 3.19 et figure 3.20). Le recouvrement de température est plus important dans le domaine extérieur à la couche limite du fluide. C'est sans doute encore l'expansion de la couche limite qui est à l'origine de ce phénomène de conversion de l'énergie cinétique en chaleur.

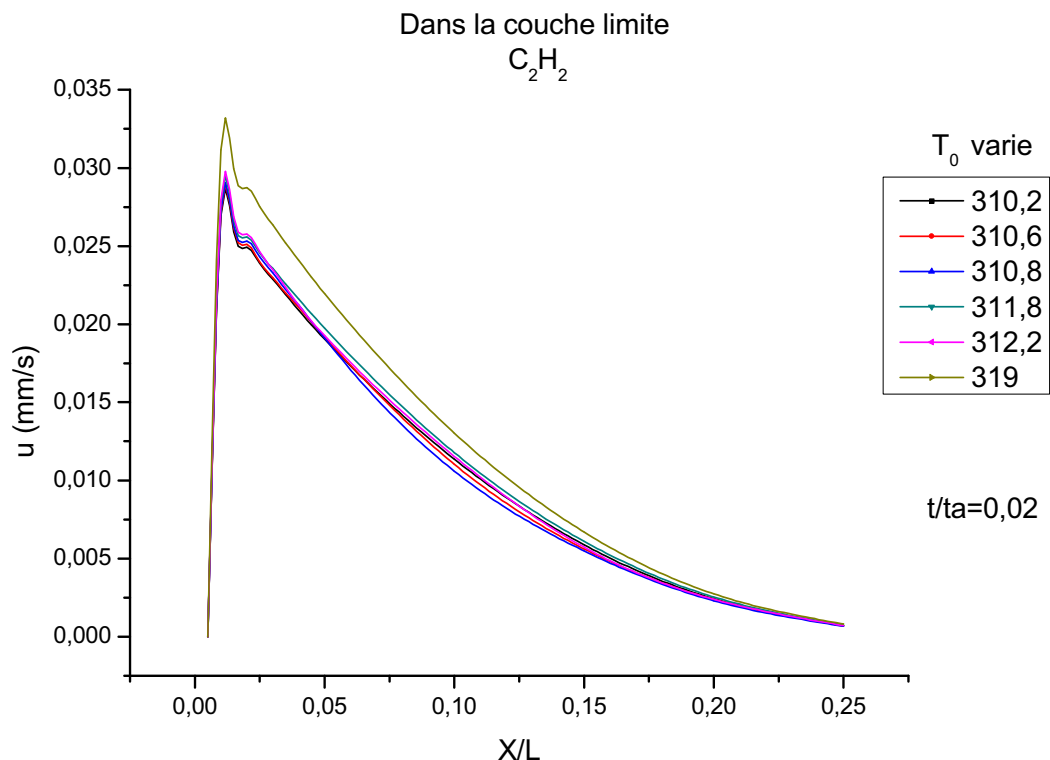


Figure 3.9 : profil de la vitesse du C_2H_2 dans la couche limite

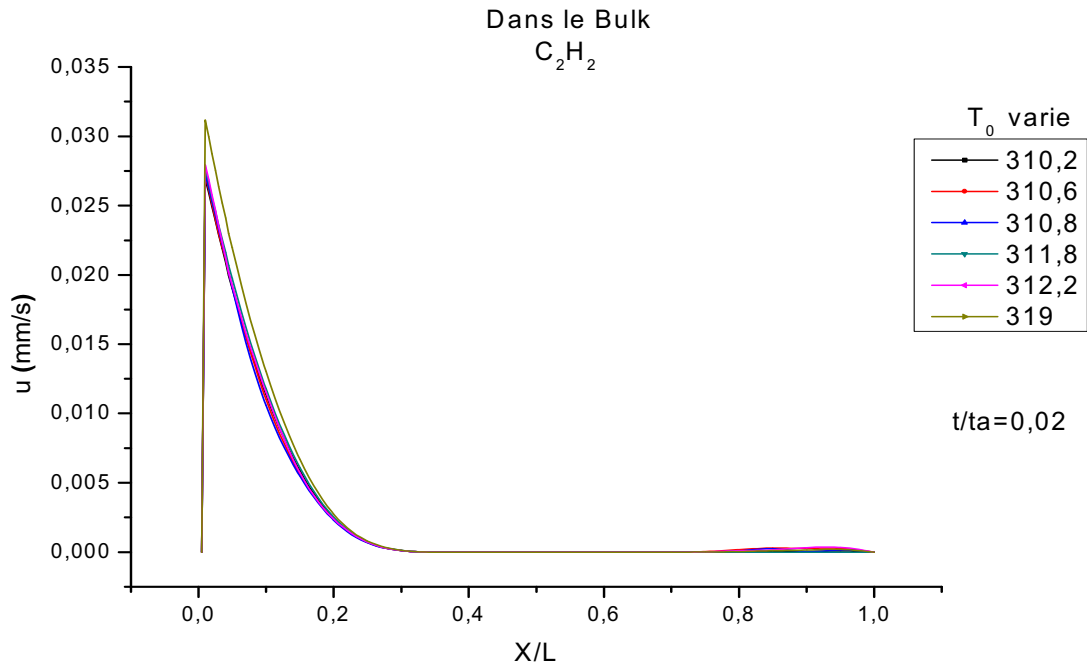


Figure 3.10 : profil de la vitesse du C_2H_2 dans le Bulk

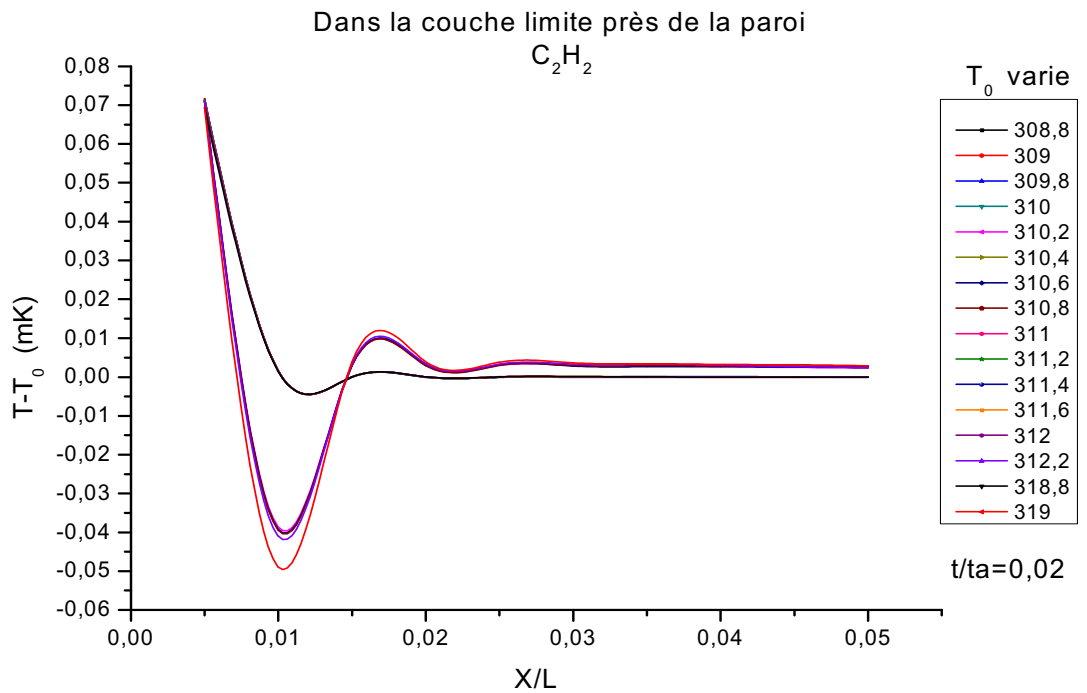
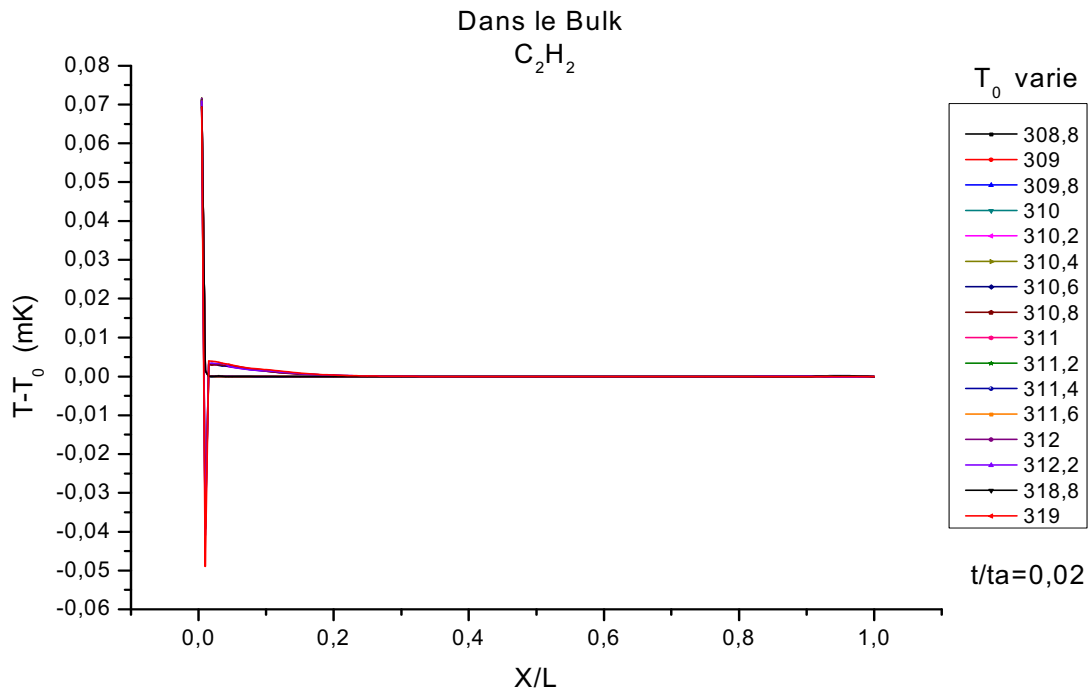


Figure 3.11 : profil de la température du C_2H_2 dans la couche limite Près de la paroi afin de préciser les minimums.

Figure 3.12 : profil de la température du C_2H_2 dans le Bulk

III-3-3 Résultats obtenus pour le C_2H_6 :

1) Evolution de la vitesse pour le C_2H_6 :

On observe le même phénomène que pour le CO_2 et le C_2H_2 , c'est-à-dire que la vitesse augmente parce qu'il y a transformation de la chaleur emmagasinée sur la paroi en énergie cinétique, mais comme le montre la figure 3.13 les valeurs sont plus importantes que celles du CO_2 et moins importantes que celles du C_2H_2 . Ensuite, la vitesse diminue du fait qu'il y a une reconversion de l'énergie cinétique en chaleur (figure 3.14).

2) Evolution de la température pour le C_2H_6 :

Nous remarquons sur la figure (figure 3.15) le même comportement de la température que celui des deux premiers fluides où elle diminue à partir de la paroi, à cause de la transformation d'énergie thermique en énergie cinétique et passe par un minimum au point où la vitesse présente un maximum. Le recouvrement de température est plus important dans le domaine extérieur à la couche limite du fluide. C'est sans doute toujours l'expansion de la couche limite qui est à l'origine de ce phénomène de conversion de l'énergie cinétique en chaleur.

3) Evolution de la pression pour le C_2H_6 :

La perturbation de pression induite par cette couche limite (Figure 3.16) exhibe un gradient qui correspond à la propagation d'une onde à une vitesse inférieure à c_0 , à cause du phénomène de dispersion. Cette onde est ensuite réfléchiée par la paroi droite ($x=L$) et se mélange aux autres ondes qui continuent d'être générées par l'évolution de la couche limite. Finalement, on peut observer que la pression dans le volume cellulaire reste homogène (mais pas constante) partout au cours du processus. Par conséquent, il y aura augmentation de la pression dans le reste du volume (Figure 3.18).

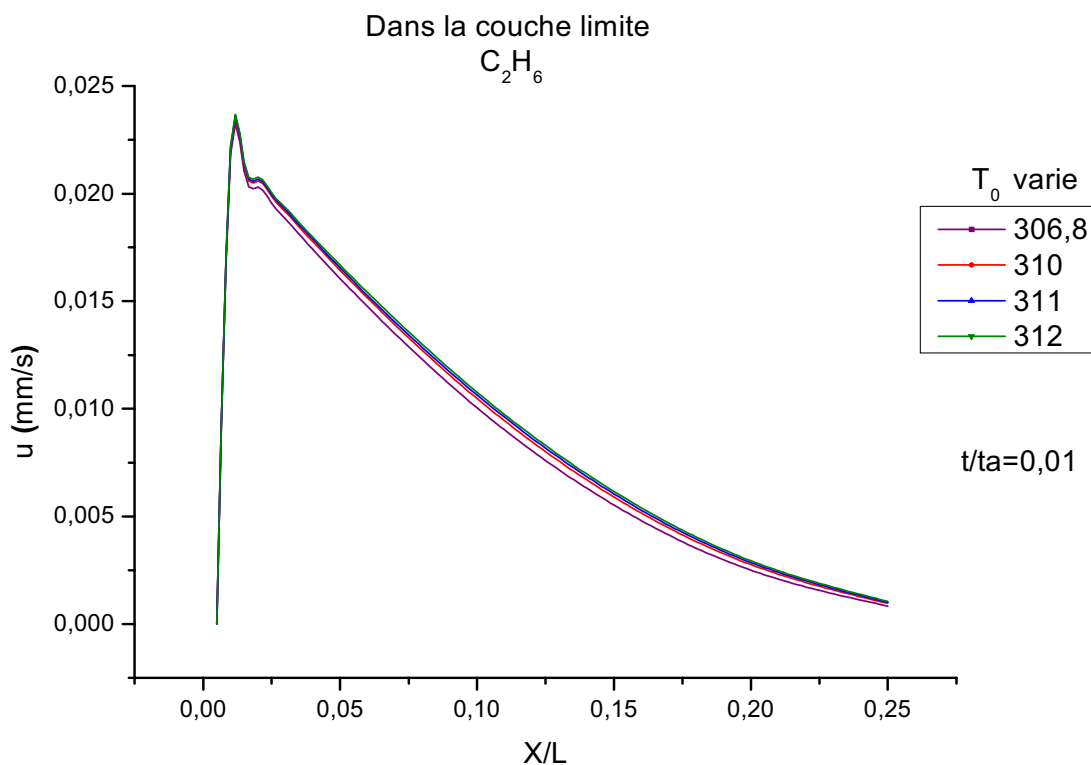


Figure 3.13 : profil de la vitesse du C_2H_6 dans la couche limite

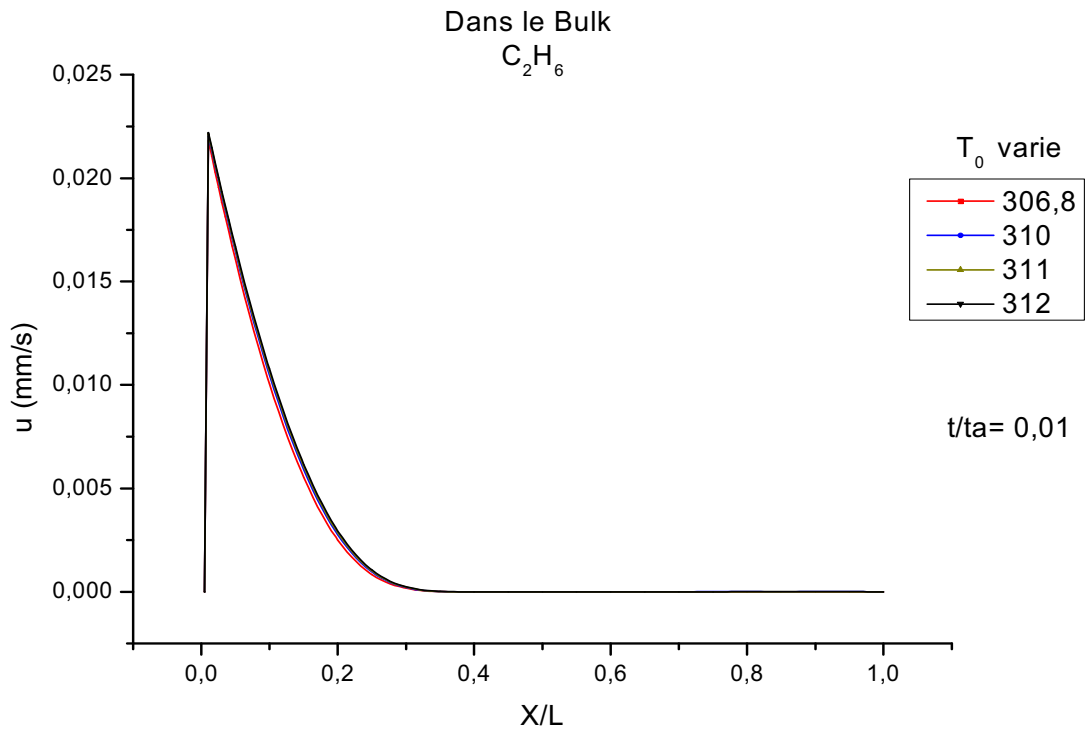


Figure 3.14 : profil de la vitesse du C_2H_6 dans le Bulk

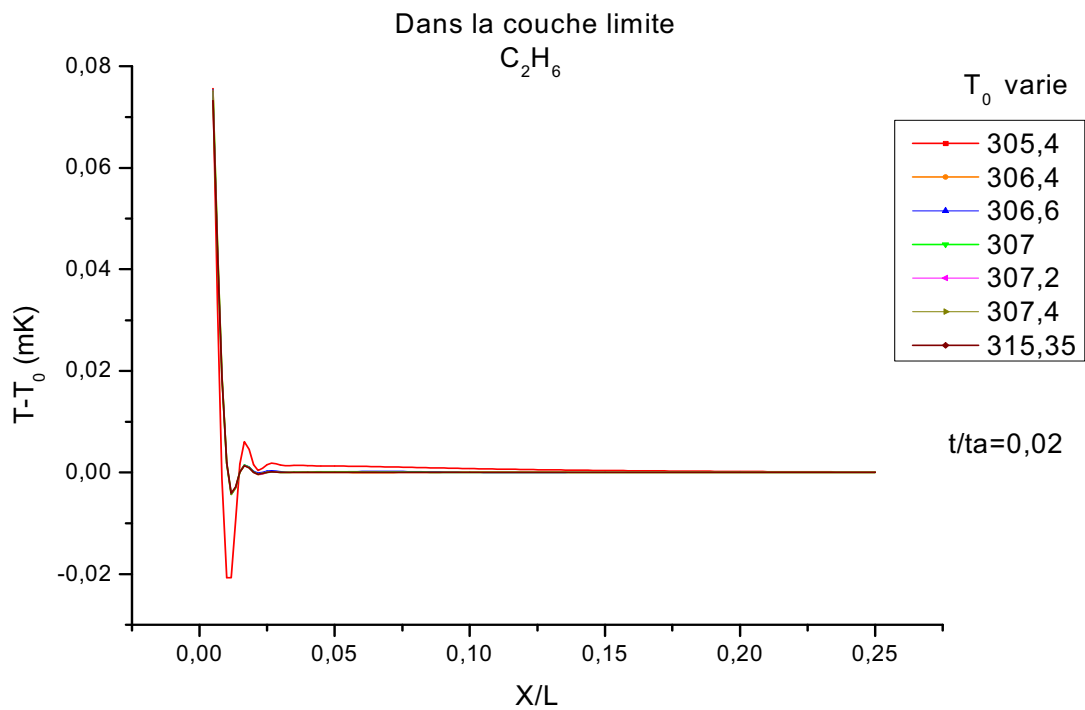


Figure 3.15 : profil de la température du C_2H_6 dans la couche limite

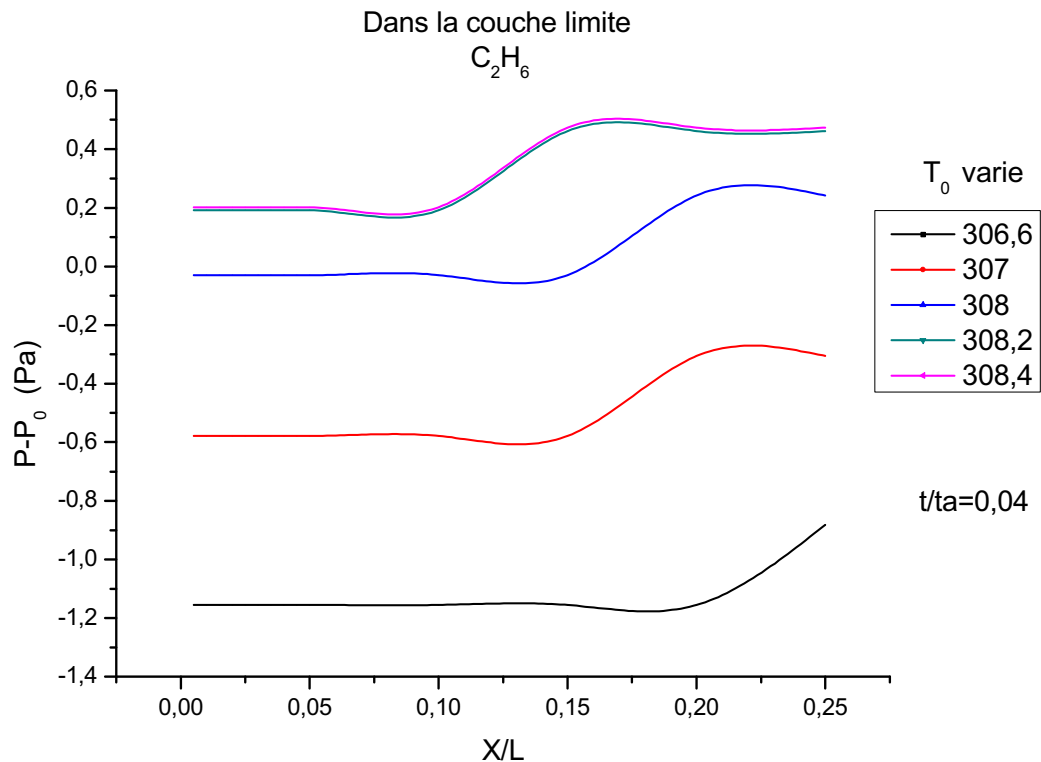


Figure 3.16 : profil de la pression du C_2H_6 dans la couche limite

III-3-4 Comparaison des résultats des trois fluides

Nous proposons deux analyses des profils des trois fluides, la première consiste en une analyse dynamique de l'évolution des profils de vitesse et la deuxième est une analyse thermique de l'évolution des profils de la température des trois fluides :

a. Analyse dynamique:

Près de la paroi amont dans la couche limite (figure 3.17), tout à fait dans la partie gauche du graphe, on observe un important gradient de vitesse: L'énergie thermique apportée par chauffage est transformée en énergie cinétique. Cette énergie se disperse rapidement dans le volume donnant naissance à une onde de pression qui se réfléchit sur la paroi aval. On peut aisément vérifier l'état d'avancement du front d'onde malgré quelques effets secondaires de dispersion (le front d'onde est légèrement étalé autour de l'abscisse considérée). Les réflexions successives de cette onde sont mises en évidence au niveau du champ de pression (figure 3.18).

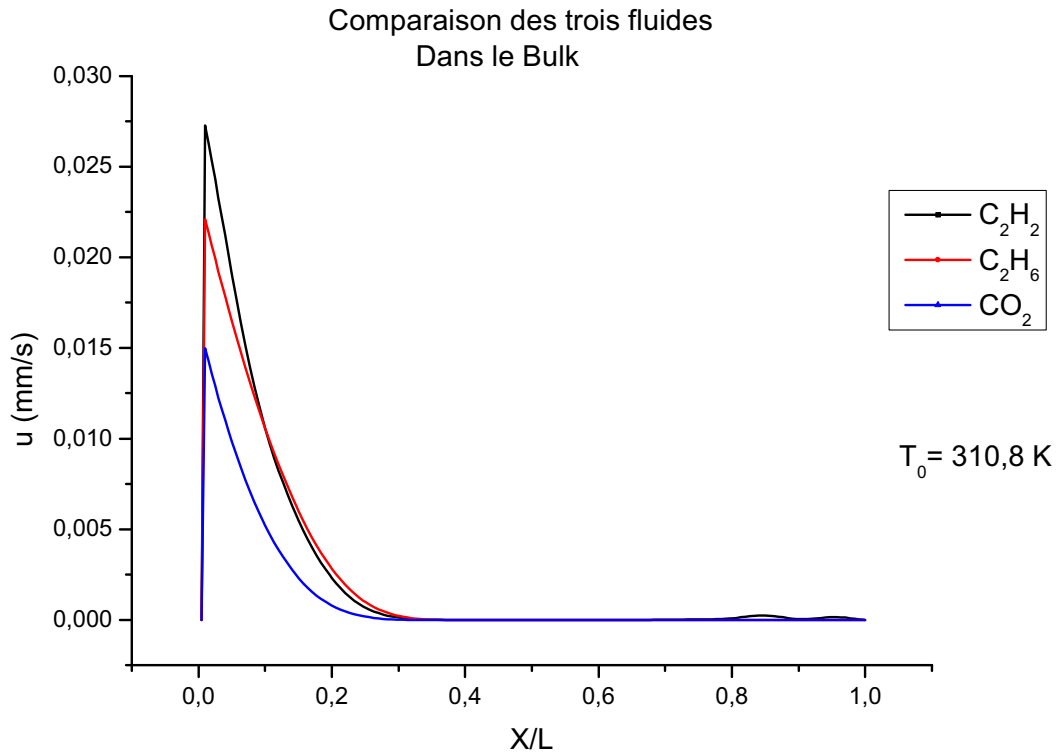


Figure 3.17 : comparaison des profils de vitesse des trois fluides dans le Bulk

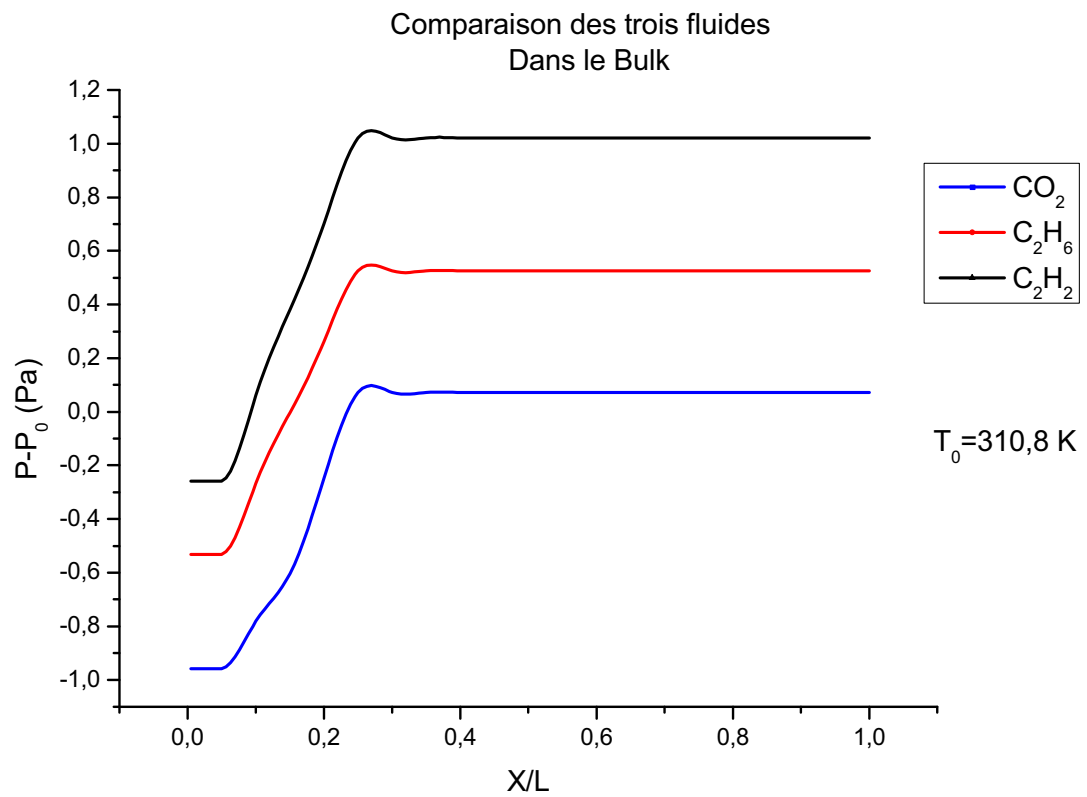


Figure 3.18 : comparaison des profils de pression des trois fluides dans le Bulk

b. Analyse thermique:

De même que précédemment, les courbes de la figure 3.19 montrent une température qui augmente de manière plus homogène sauf au niveau du bord amont où la situation est plus complexe. En effet, on note la présence d'un minimum de température près de la paroi amont (la couche limite thermique mince, entre $x/L = 0$ et $x/L = 0.05$). Aux temps très courts, on observe même des températures négatives. Cette inversion peut s'interpréter comme étant due à une zone de détente située en arrière du piston (figure 3.20).

A ces relaxations rapides de la température, l'important gradient de densité (figure 3.21) justifie l'expansion thermique de la couche limite. Cette expansion thermique donne naissance à un champ de vitesse dans la cellule à laquelle est maximale au bord de la couche limite (Effet piston).

Tout se passe donc comme si on avait un piston qui agirait de manière continue comprimant et projetant le fluide vers l'intérieur de la cellule et laissant derrière lui une zone de détente.

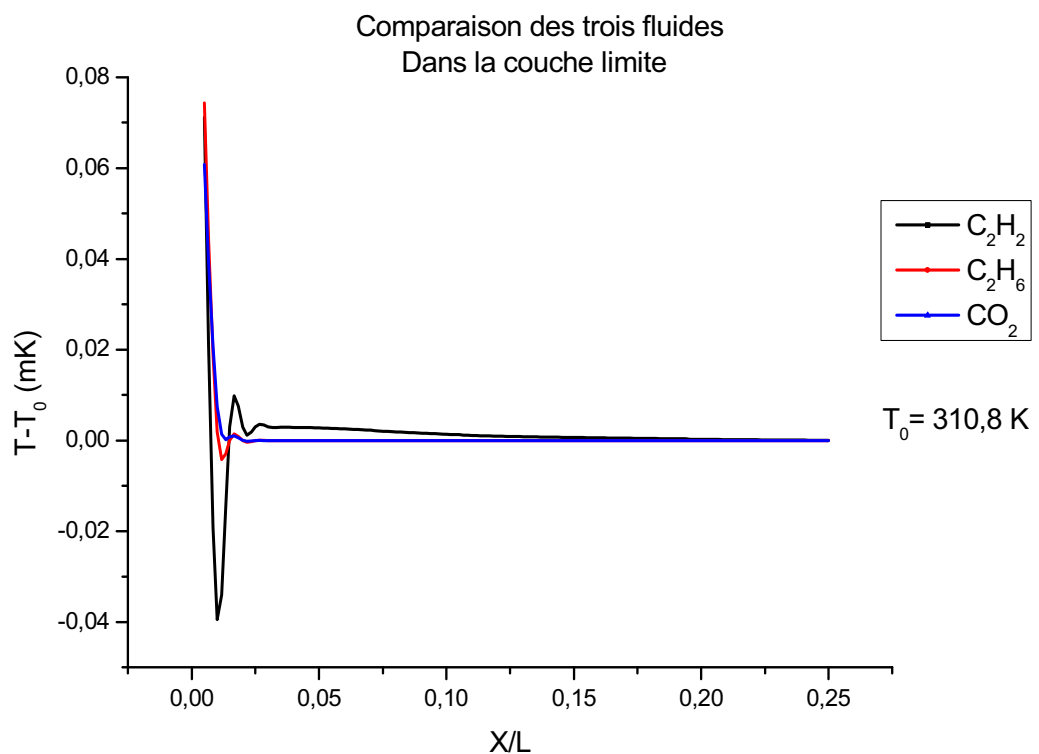


Figure 3.19 : comparaison des profils de température des trois fluides dans la couche limite

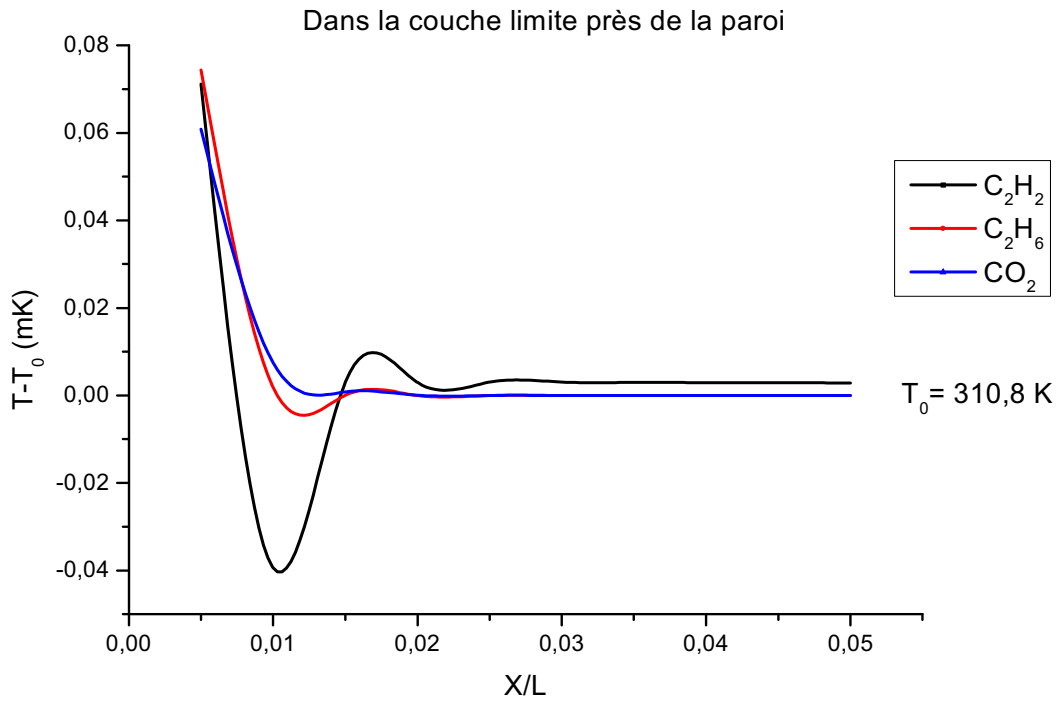


Figure 3.20 : Zoom dans la couche limite près de la paroi des profils de température des trois fluides

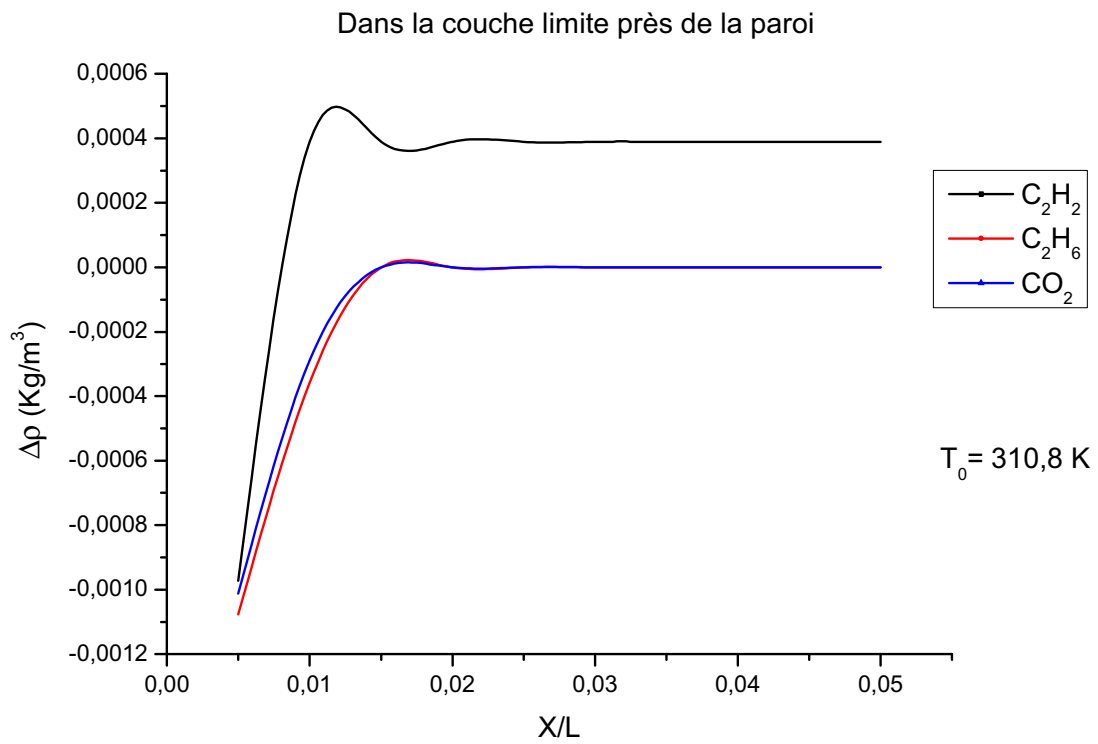


Figure 3.21 : Zoom dans la couche limite près de la paroi des profils de densité des trois fluides

III-3-5 Résultats obtenus pour le H₂ :

Du fait que la température critique de l'hydrogène est beaucoup plus faible de celles des autres fluides, nous avons décidé d'étudier l'évolution de la vitesse et la température. Dans un premier temps, nous comparons l'évolution de ces deux paramètres à celle du CO₂ (CO₂ est pris comme référence pour cette étude), et en second temps, nous allons comparer l'évolution de ces deux paramètres pour un pas de temps fixe par rapport à celle du pas de temps variable. Les résultats obtenus sont illustrés comme suit :

1) Evolution de la vitesse pour le H₂ :

a. Pas de temps fixe, T₀ variable :

On observe le même phénomène que pour le CO₂, c'est-à-dire que la vitesse augmente par ce qu'il y a transformation de la chaleur emmagasinée sur la paroi en énergie cinétique, mais comme le montre la figure 3.22 les valeurs sont moins importantes, ensuite la vitesse diminue du fait qu'il y a une reconversion de l'énergie cinétique en chaleur (figure 3.23).

b. T₀ fixe, pas de temps variable :

On observe le même phénomène : à chaque fois que le pas de temps augmente (temps de chauffage), la vitesse augmente suite à l'augmentation du temps de chauffage d'une part, et d'autre part par ce qu'il y a transformation de la chaleur emmagasinée sur la paroi en énergie cinétique comme le montre la figure 3.25. Les valeurs de la vitesse augmentent avec l'accroissement du temps de chauffage. Or, plus la rampe de chauffage est importante, plus la vitesse du fluide est importante et plus, par conséquent, le transport thermique est accéléré. Par ailleurs, le profil de la vitesse montre une décroissance dans le reste du volume, du fait qu'il y a une reconversion de l'énergie cinétique en chaleur.

2) Evolution de la température pour le H₂ :

a. Pas de temps fixe, T₀ variable :

Nous remarquons sur la figure 3.24 tous comme pour les trois premiers fluides, que la température diminue à partir de la paroi, à cause de la transformation d'énergie thermique en énergie cinétique et passe par un minimum au point où la vitesse présente un maximum. Le recouvrement de température est plus important dans le domaine extérieur à la couche limite

du fluide. C'est sans doute l'expansion de la couche limite qui est à l'origine de ce phénomène de conversion de l'énergie cinétique en chaleur.

b. T_0 fixe, pas de temps variable :

Nous remarquons sur la figure 3.26 que la température diminue à partir de la paroi, à cause de la transformation de l'énergie thermique en énergie cinétique et passe par un minimum au point où la vitesse présente un maximum. Le recouvrement de température est plus important dans le domaine extérieur à la couche limite du fluide. C'est sans doute l'expansion de la couche limite qui est à l'origine de ce phénomène de conversion de l'énergie cinétique en chaleur.

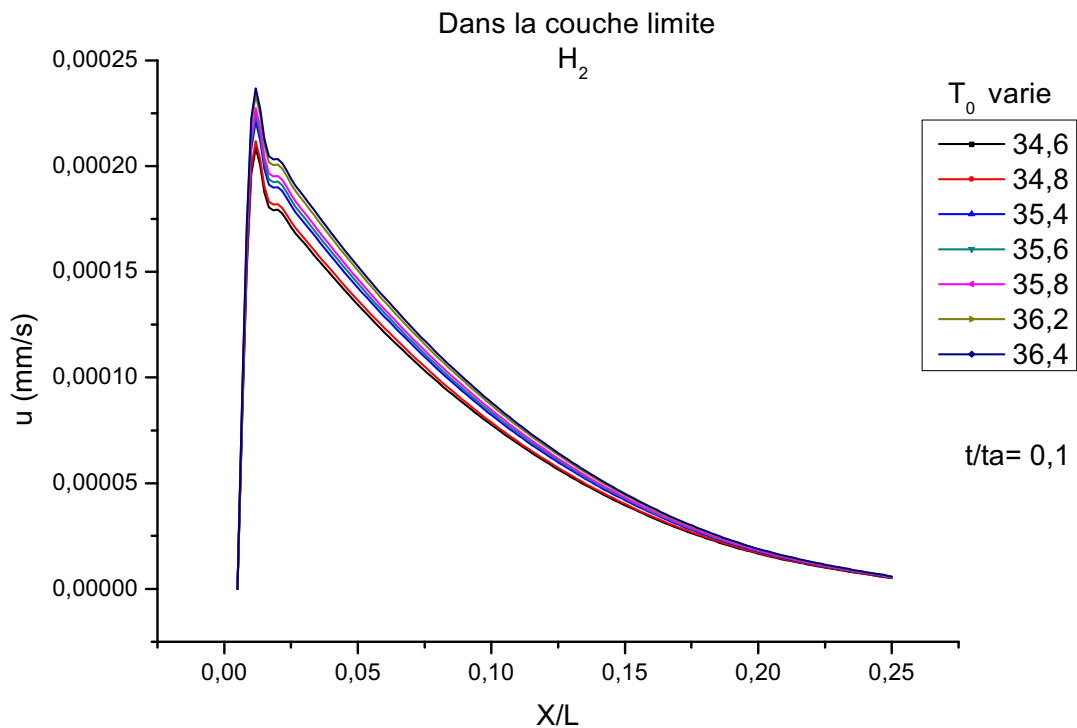
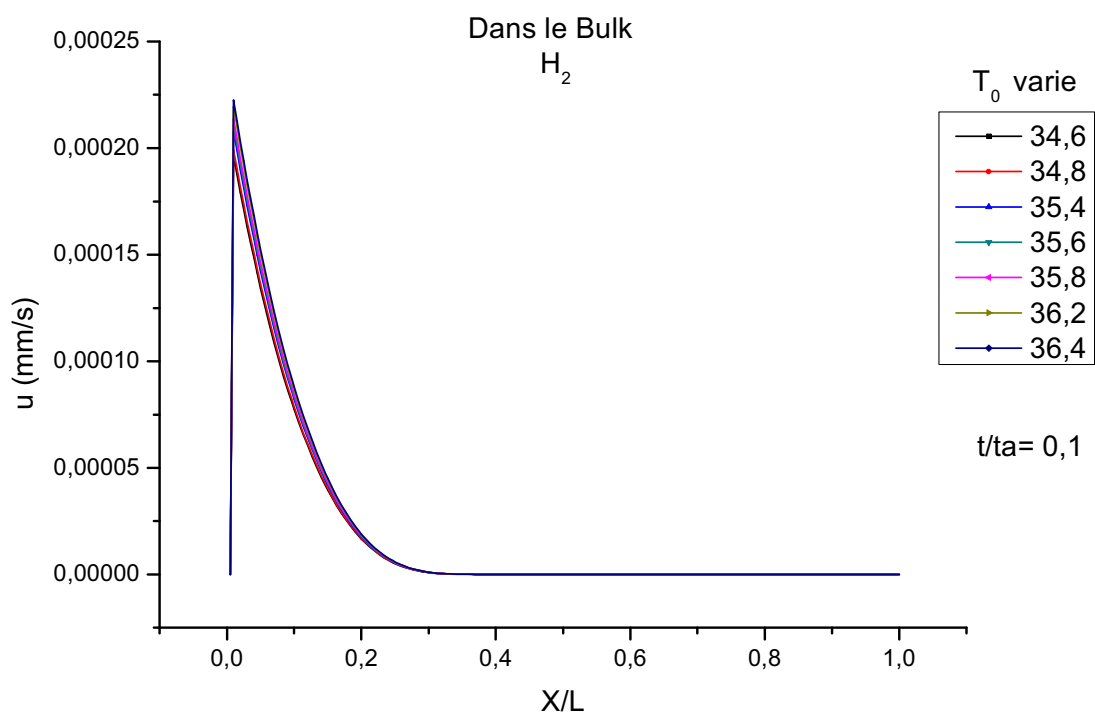
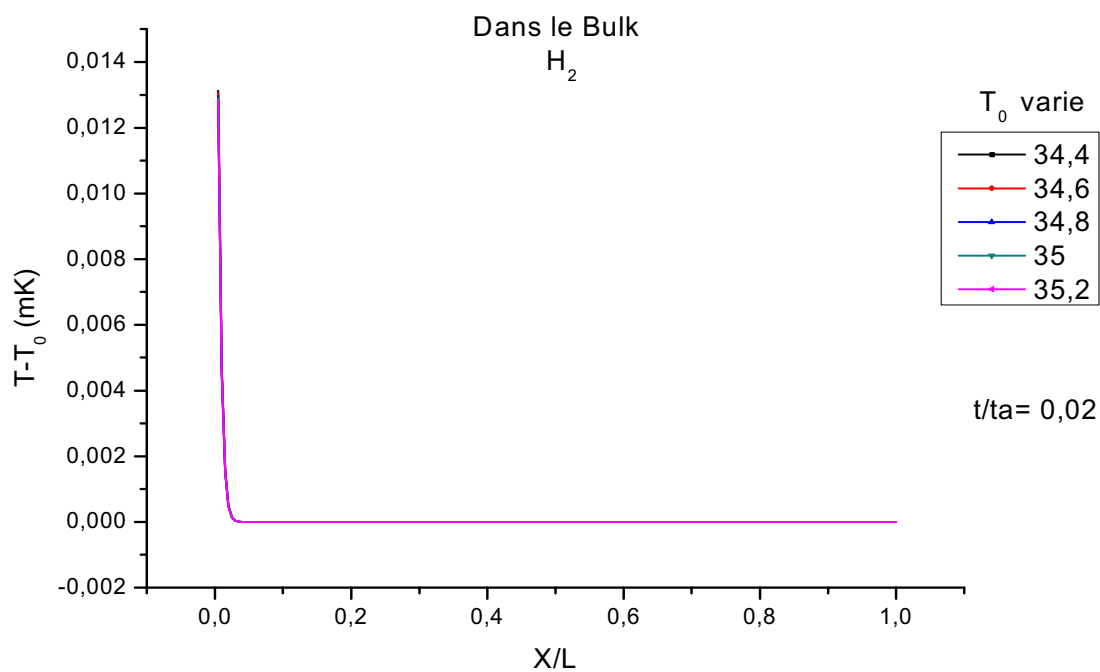


Figure 3.22 : profil de la vitesse de H_2 dans la couche limite

Figure 3.23 : profil de la vitesse de H_2 dans le BulkFigure 3.24 : profil de la température de H_2 dans le Bulk

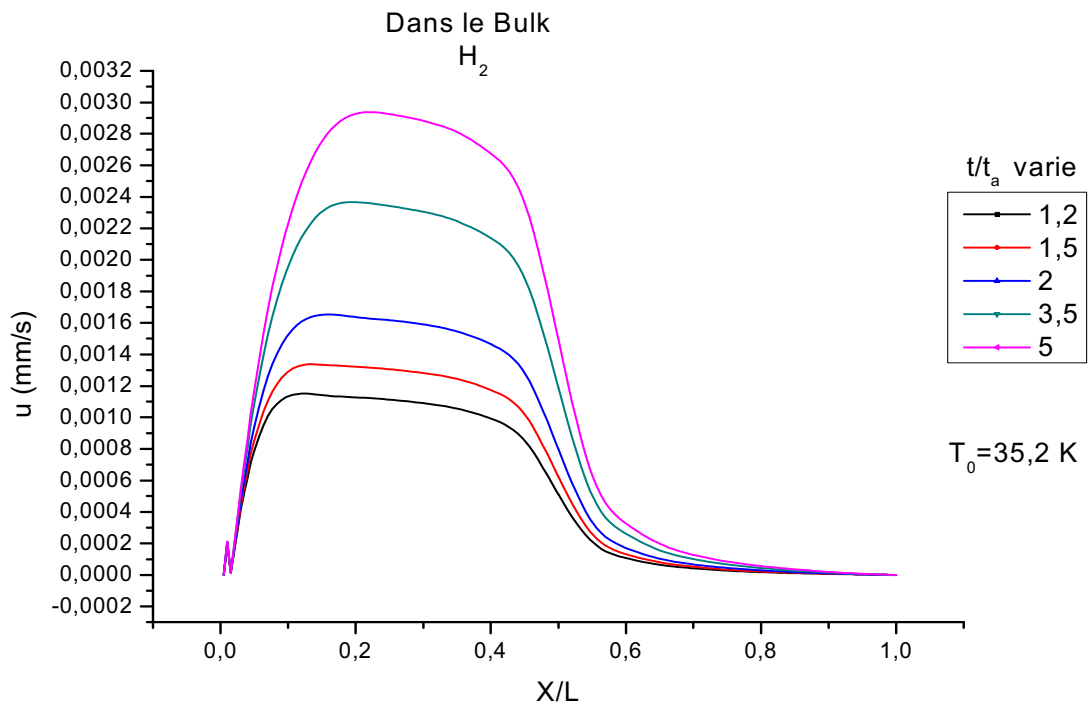


Figure 3.25 : profil de la vitesse de H₂ dans le Bulk
Pour des t/ta varies entre 1,2 et 5

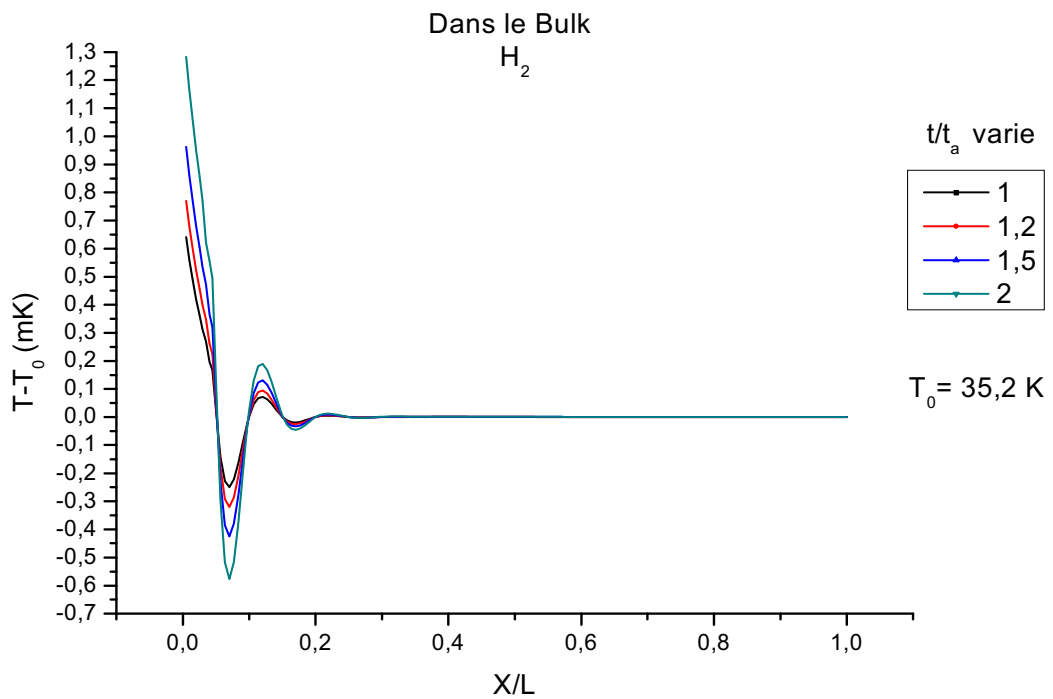


Figure 3.26 : profil de la température de H₂ dans le Bulk
Pour des t/ta varies entre 1 et 2

III-4 Approche du phénomène d'expansion

L'augmentation de la compressibilité à l'approche du point critique constitue le trait essentiel du mécanisme d'accélération du transport thermique.

Le tableau suivant donne certaines valeurs du coefficient de compressibilité calculées à partir de l'équation de Van Der Waals:

Prenons le cas du dioxyde de carbone,

T	$\left(\frac{\partial p}{\partial P}\right)_T$	χ_T
307,21500	1274,159000	$0,02296 \cdot 10^{-4}$
305,21500	424,559400	$0,06889 \cdot 10^{-4}$
305,01500	339,600000	$0,08613 \cdot 10^{-4}$
304,81500	254,640000	$0,11487 \cdot 10^{-4}$
304,61500	169,680000	$0,17238 \cdot 10^{-4}$
304,51500	127,200000	$0,22995 \cdot 10^{-4}$
304,41500	84,723000	$0,34524 \cdot 10^{-4}$
304,31500	42,243000	$0,69242 \cdot 10^{-4}$
304,22000	1,886700	$0,15500 \cdot 10^{-2}$
304,21600	0,187569	0,0155
301,21580	0,102609	0,0285
304,21570	0,060129	0,0486
304,21560	0,017649	0,1657
304,21558	0,009153	0,3190
304,21557	0,004905	0,5963
304,21556	0,000657	4,4520
304,21500	0,000000	∞

III-5 Conclusion

Les résultats obtenus pour un fluide supercritique, en état d'apesanteur confirment un nouveau mécanisme de transport thermique dit effet piston, auparavant mis en évidence pour le dioxyde de carbone CO_2 au cours des cols spatiaux. En effet, notre étude permet de généraliser ce mécanisme à d'autres fluides qui sont l'acétylène C_2H_2 , l'éthane C_2H_6 et l'hydrogène H_2 : La forte compressibilité du fluide permet d'emmagasiner de l'énergie dans une fine couche limite qui se détendra dans tout le volume, à la manière d'un piston. Ainsi, il y a un double transfert d'énergie par détente-recompression, qui accélère le processus d'homogénéisation thermique. Finalement, l'équilibre thermique est réalisé sur un intervalle de temps qui représente le centième du temps caractéristique de la diffusion thermique du gaz parfait équivalent.

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

L'étude de la réponse d'un gaz de Van Der Waals à une perturbation thermique à la paroi, permet d'explorer le transport thermique dans un fluide supercritique. Le couplage thermoacoustique dû à la forte compressibilité, induit un transfert d'énergie plus rapide de la couche limite vers le volume fluide, par un mode expansion-recompression. La convection thermoacoustique a déjà été étudiée en vue d'applications au domaine spatial : contrôle thermique des cryogènes et analyse des expériences embarquées en apesanteur.

Cette étude en microgravité, en absence de convection naturelle, révèle que de nouveaux mécanismes interviennent dans le transport thermique, en dehors de la diffusion. En effet, en contraste avec les fluides incompressibles, pour lesquels il n'y a pas de force motrice en micropesanteur, les fluides compressibles peuvent être sujets à des écoulements et des déplacements dans les mêmes conditions.

L'originalité de ces mécanismes de transport repose sur de nouvelles notions de la thermodynamique au voisinage du point critique d'un fluide pur. C'est essentiellement la forte compressibilité de ces fluides qui influe sur l'évolution des variables dynamiques et thermodynamiques. On trouve alors que :

- l'expansion de la couche limite pendant la période acoustique génère un champ de vitesse libre.
- les perturbations de vitesse, pression et densité sont plusieurs centaines de fois plus importantes que pour le gaz parfait.
- un nouveau mécanisme de transport est mis en évidence : l'énergie thermique est transformée en énergie cinétique dans la couche limite en expansion et est transformée en énergie interne dans le volume dans lequel on a un ralentissement adiabatique de l'écoulement.
- l'augmentation du transport de chaleur est très importante même à 1 K du point critique, et l'équilibre thermique est complètement atteint en 1/100 du temps de diffusion caractéristique du gaz parfait.

Ainsi, plus on se rapproche du point critique du fluide considéré, plus sa compressibilité augmente et plus la couche limite qui se forme à la paroi se condense. On a alors un stockage d'énergie de plus en plus important dans une couche limite de plus en plus fine ; d'où accélération du processus de transfert thermique par expansion de cette couche.

D'autre part, l'influence de la perturbation thermique imposée à la paroi est non négligeable. En effet, le couplage thermoacoustique, dû à la compressibilité, permet à des parcelles de fluide, en expansion sous l'effet d'un apport de chaleur localisé, de se déplacer dans un champ de vitesse libre. Or, plus la rampe de chauffage est importante, plus la vitesse du fluide est importante et plus, par conséquent, le transport thermique est accéléré.

La mise en évidence de ce processus par l'étude numérique, étendue à plusieurs fluides à leurs états critiques présentent une accélération du transport thermique à travers le couplage thermoacoustique induit par la spécificité des propriétés de ces fluides, au voisinage de leurs points critiques. De plus, la microgravité se révèle être une alliée indéniable dans la découverte de ces phénomènes nouveaux longtemps occultés par la gravité terrestre.

Références

Bibliographiques

Références Bibliographiques

- [01] **R. Bonneville**, “ L’intérêt de la microgravité, pour la science”, N° 152, 102-110, Juin 1990.
- [02] **D. Beysens**, “recent developpements in critical and near-critical point phenomena”, ESA SP-295, 355, January 1990.
- [03] **D. Beysens, J. Straub, and D.J. Turner**, “Phase transitions and Near-Critical Phenomena, in Fluid Sciences and Materials Science in Space”, ed. By H.U. Walter Springer-Verlag, Berlin, 1987.
- [04] **C. Mignon, B. Zappoli**, “Vapor phase transport with non equilibrium surface reactions”, ES A SP-256,539, February 1987.
- [05] **M. Gitterman**, “Hydrodynamics of fluids near a critical point”, Rev. Mod. Phys., Vol. 50, N° 1, Part I, 85-106, 1978.
- [06] **W.D. Hayes and R.F. Robstein**, “Hydrodynamics phenomena”, Eds, Academic Press, New York, 1967.
- [07] **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(4): 2264-2267, 1990.
- [08] **Onuki A., Hong H. and Ferrell R.A.**, “Fast adiabatic equilibration in a single component fluid near the liquid-Vapor critical point”, Phys. Rev. A, 41:2256, 1990.
- [09] **Boukari H., Shaumeyer J. N, Briggs M. E. and Gammon R.W.**, “Critical speeding up in pure fluids”, Phys. Rev. A, 41, 2260, 1990.
- [10] **Issa R.I.** “Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-Splitting”, J. Comput. Phys.62, 40. 1986.

- [11] **M. Barmatz and Inseob Hahn**, “Critical phenomena in microgravity: Past, present, and future”, *Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, California 91109, USA*, REVIEWS OF MODERN PHYSICS, VOLUME 79, JANUARY–MARCH 2007.
- [12] **Benoit Viallet**, “Transition de phase”, INSA, Toulouse France, p.17, 2007.
- [13] **D.R. Chenoweth and S. Paolucci**, “Natural convection in an enclosed vertical air layer with large horizontal temperature differences”, *J. Fluid Mech.*, Vol. 169, pp 173-210, 1986.
- [14] **B. Zappoli**, “Oscillatory growth: 1-D numerical non-linear stability analysis, *Acta astronautica*”, Vol. 15, N° 6/7, pp. 467-470, 1987.
- [15] **B. Zappoli and D. Bailly**, “Response of a solid-gas growth interface to an increase in temperature”, *Int. J. Heat. Mass transfer*, 1990.
- [16] **B. Zappoli, D. Beysens, P. Guenoun, B. Khalil, Y. Garrabos and B. Le Neindre**, “Anomalies of heat transport in near critical fluids under weightlessness”, *Adv. Space Res.* Vol. 11, N° 7, pp 269-276, 1991.
- [17] **N. Djennaoui**, “Contribution à l’étude du transport de chaleur dans un fluide supercritique en microgravité”, Thèse de Magister, USTHB, Algérie, 1993.
- [18] **Cagniard de la Tour C.**, *Ann.Chim.phy.*, p. 21, 1822.
- [19] **Andrew T.**, *Trans.Roy.Soc.*, p.159, 1869.
- [20] **Van der Wals J.D.**, “Over de continuïteit van den gas en vloeistofoestand”, Ed.Sijthoff, Leiden Pay-Bas, 1873.
- [21] **Boutrouft K.**, “Instabilités thermo-convectives de type Rayleigh Taylor dans les fluides supercritiques”, Thèse de Doctorat, École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Paris, 2006.

- [22] **Garrabos Y., Le Neindre B., Subra P., Cansell F., Pommier C.**, “Fluides critiques et gravité, fluides supercritiques et matériaux. Fluides, Matériaux et Microgravité”, Ann. Chim. Fr., 17, pp. 55-90, 1992.
- [23] **Stanley H.E.**, “Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena”, Oxford University Press, New York Oxford, 1971.
- [24] **Sengers J.V., Levelt Sengers J.M.H.**, “Critical phenomena in classical fluids, in progress in liquid physics”, Ed. Croxton C., Wiley, Chichester (Royaume-Uni), 1978.
- [25] **Callen H.B.**, “Thermodynamics”, Ed. Wiley & Son INC, New York (USA), 1960.
- [26] **Behringer R. P., Doiron T. and Meyer H.**, J. Low Temp. Phys., p.24, p.315, 1976.
- [27] **Landau L. D., Lifshitz E. M.**, “Physique théorique, tome 6 : Mécanique des Fluides”, Ed. Librairie du Globe, Editions MIR, traduit du russe, 1989.
- [28] **Kadanoff L.P., Swift J.**, Physic Review, p.89, p.166, 1968.
- [29] **Kawasaki K.**, Physic Review A, p.1, p.1750, 1970.
- [30] **Carlès P.**, “Physics of Fluids”, p.10, p.2164, 1998.
- [31] **Kreyszig E.**, “Advanced engineering mathematics”, Wiley & Sons INC, New York (Etats-Unis), 1993.
- [32] **Zappoli B., Amiroudine S., Carlès P., Ouazzani J.**, “Thermoacoustic and bouncy-driven transport in a square side-heated cavity filled with a near-critical fluid”, J. Fluid Mechanics, N° 316, p.53-72, 1996.
- [33] **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”, ESA SP-256, Bordeaux France, 1987.

- [34] **Dahl D., Moldover M. R.**, “Thermal relaxation near the critical point”, *Physic Review A*, vol. 6, N° 5, 1972.
- [35] **Beysens D.**, “Que peut-on apprendre sur les phénomènes de transport d’une étude en microgravité”, *Ann. Chim. Fr.*, N° 17 : 45-53, 1992.
- [36] **Jounet A., Zappoli B. Mojtabi A.**, “Simulation numérique de l’effet Piston avec prise en compte des échanges thermiques pariétaux”, *C.R.A.S. Paris*, t.327, série Iib., p. 991- 996, 1999.
- [37] **Zosel K.**, German patent N° 1, 493:190, 1964.
- [38] **Scholsky K.M.**, *Journal of Supercritical Fluids*, p. 6.103, 1993.
- [39] **Pessy V., Garriga R., Etourneau J., Weill F., Cansell F.**, “Synthèses et Elaboration de Matériaux en Milieux Supercritiques”, *Proceedings Ed. Cancel F., Delville M.H et Subra P.*, Biarritz, pp.1-45, juillet 1999.
- [40] **Pajonik G.M.**, “Sol-Gel Process Application”, *Proc. Int. Symp. Adv. Sol-Gel Process. Appl.*, 201, 219, 1994.
- [41] **Subra P., Domongo C.**, “Mise en Forme de Matériaux En Milieux Supercritique”, *Proceedings Ed. Cancel F., Delville M.H et Subra P.*, Biarritz, pp. 93-126, 1999.
- [42] **R.Prud’homme**, “Combustion en micropesanteur”, *CRAS special, Série Iib*, t.329, N°3, 2001.
- [43] **d’Almeida A., Prud’homme R.**, “Comportement d’une poche fluide supercritique plongée dans un environnement à haute température”, communication privé, 2006.
- [44] **P.Haldenwang, C.Nicoli, J.Daou**, “High pressure vaporization of LOX droplet crossing the critical conditions”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.39, N°16, 3453-64, 1996.
- [45] **Prud’homme R., Préau S.**, “Echanges thermiques et phases fluides”, *ICTEA-HT3-06*, Beyrouth Liban, 2004.

- [46] **Prud'homme R., Habiballah M.**, “Instabilités liées au phénomène d'évaporation”, 17ème Congrès Français de Mécanique, Troyes, 2005.
- [47] **Préau S., Prud'homme R., Ouazzani J., Zappoli B.**, “Supercritical density relaxation as a new approach of droplet vaporization”, Phys. Of Fluids, Vol. 16, N°11, 4075- 4087, 2004.
- [48] **Bernard Zappoli**, “LES SCIENCES DE LA MATIERE EN MICROPESANTEUR”, CNES / Direction des Programmes, Université Paul Sabatier, Toulouse France, p.9, 2007.
- [49] **See e.g.**, “Phase transition”, ed. by M. Levy, J.C. Le Guillou and J. Zinn-Justin (Plenum, New-York), 1982.
- [50] **Carlès P. Zappoli B.**, “Etude de l'Effet Piston et des phénomènes thermoacoustiques dans les fluides supercritiques”, N° : 95 INPT 0021. Toulouse, France, p.162, 1995.
- [51] **Jounet A., Mojtabi A.**, “Simulation numérique de l'effet Piston dans les fluides supercritiques en présence de perturbations thermiques ou mécaniques”, N° : 99 TOU3 0001. Toulouse 3, France, p.162, 1999.
- [52] **B.T.Chu**, “Pressure waves generated by addition of heat in a gaseous medium”, NACA, TN, 3411, Nat.adv.com.aero. Washington DC, 1955.
- [53] **A.F. Johnson**, “Pulse propagation in heat-conducting elastic materials”, J. Mach. Phys. Solids, 23, 55-75, 1975.
- [54] **A.J. Kempton**, “Heat diffusion as a source of aerodynamic sound”, J.F.Mech, 78, 1-31, 1976.
- [55] **D.R. Kassoy**, “The response of a confined gaz to a thermal disturbance 1: Slows transients”, Soc. Ind. Appl. Math., Vol.36, N° 3, 624-634, 1979.
- [56] **J.F. Clarke, D.R. Kassoy, and N. Riley**, “Shock generated in a confined gas due to rapid heat addition at the boundary; I: Weak shock waves”, Proc. R. SOC. London Ser. A 393, 309-329, 1984.

- [57] **J.F. Clarke, D.R. Kassoy, and N. Riley**, “Shock generated in a confined gas due to rapid heat addition at the boundary; II: Strong shock waves”, Proc. R. SOC. London Ser. A 393, 331-351, 1984.
- [58] See e.g. **J. V. Sengers**, “in Critical phenomena”, LI-Corso, Academic Press, New-York, 1971.
- [59] **Pierre Carlès**, “A brief review of the thermo-physical properties of supercritical fluids”, The Journal of Supercritical Fluids, volume 53 issues 1-3, pp.2–11, June 2010.
- [60] **Patrick EGGLI**, “littérature technique thermodynamique, laboratoire de recherche et de chimie Bienne”, Suisse, octobre 2008.
- [61] **Karl Griesbaum, Arno Behr, Dieter Biedenkapp, Heinz-Werner Voges, Dorothea Garbe, Christian Paetz, Gerd Collin, Dieter Mayer, Hartmut Höke**, “*Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Hydrocarbons*”, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, 2000
- [62] Sciences & Vie, *On sait ce que la Terre dégage d'hydrocarbures*, n° 1098, p. 34, Mars 2009.

On note que nous avons utilisé des références de sites internet qui sont les suivants :

- [63] <http://encyclopedia.airliquide.com/encyclopedia.asp>
- [64] www.Wikipédia-Éthane.mht

Annexes

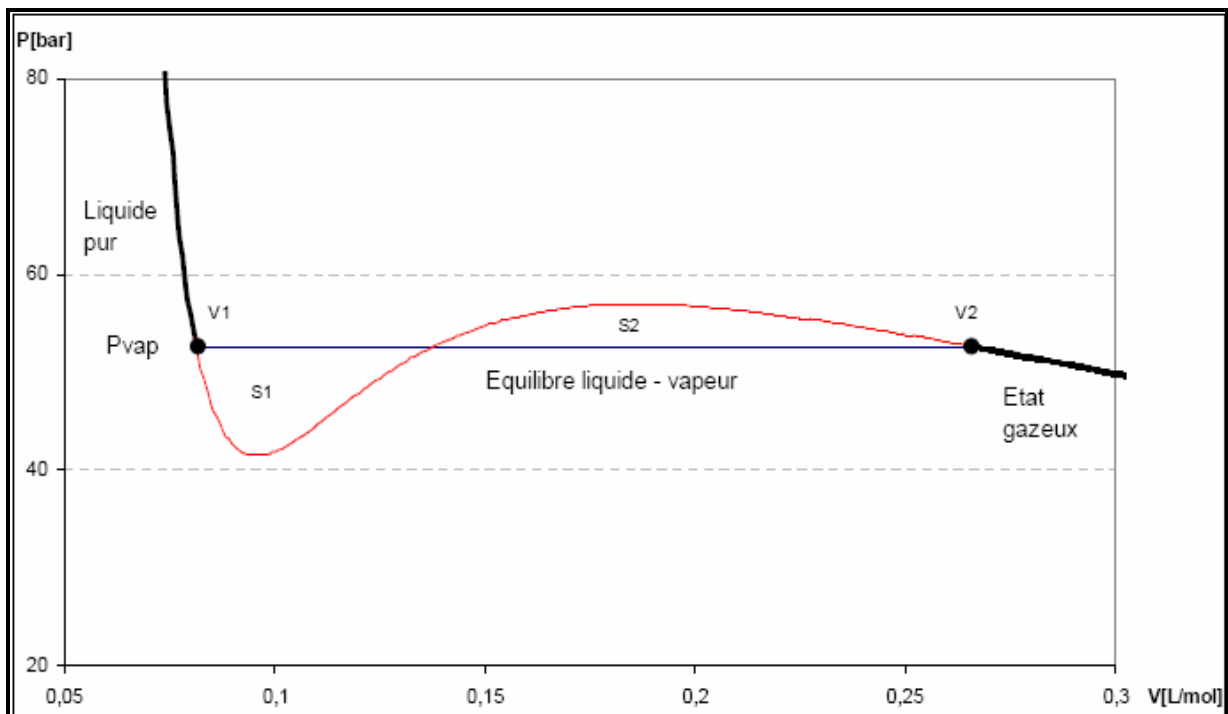
Isothermes d'Andrews

Les courbes isothermes telles que $P = f(V)$ sont des isothermes d'Andrews. Elles présentent un maximum et un minimum en dessous d'une température dite température critique (voir § suivant). De part et d'autre des ces extrema, le fluide est à l'état liquide et les valeurs de pression calculées par l'équation d'état n'ont pas de sens physique [60].

On peut tracer une droite à une pression déterminée, la pression de vapeur P_{vap} . Telle que les surfaces $S1$ et $S2$ soient égales délimitant l'intervalle d'équilibre liquide-vapeur, ce qui peut s'écrire :

Le calcul des valeurs de P_{vap} , $V1$ et $V2$ peut se faire en résolvant un système de trois équations comprenant la forme intégrée de l'équation ci-dessus ainsi que deux équations d'état pour les deux valeurs du volume $P_{vap} = f(V1)$ et $P_{vap} = f(V2)$ à l'aide d'un logiciel de calcul.

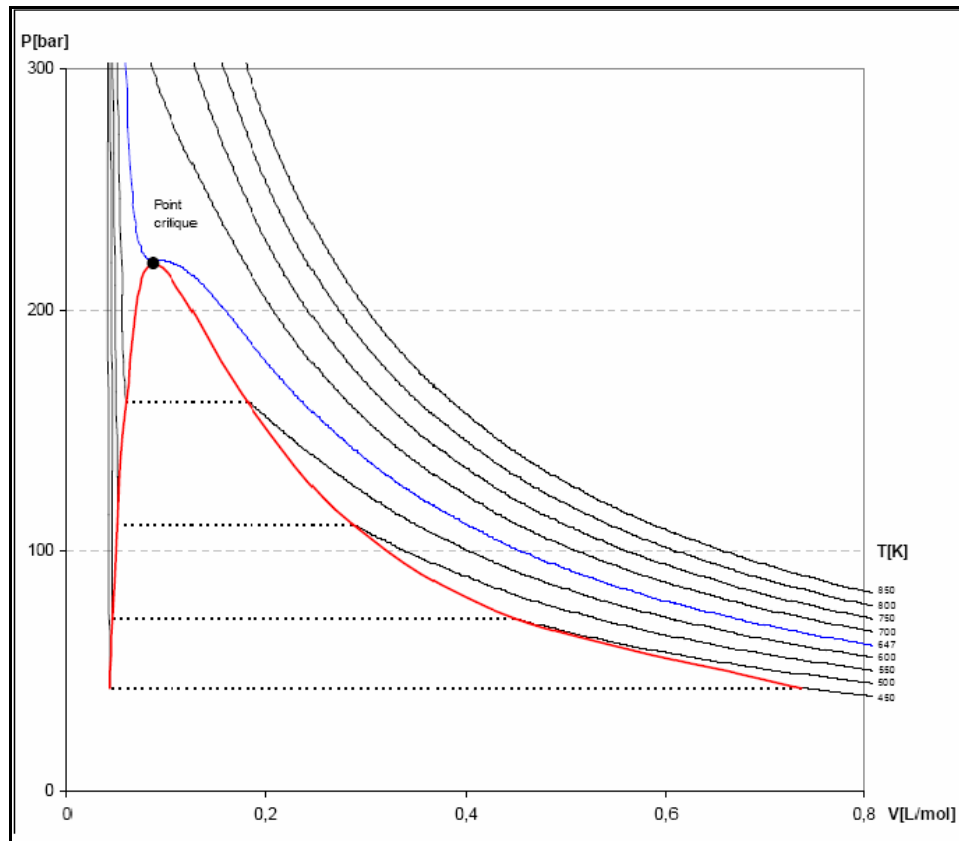
Ici en exemple un tracé pour le CO: à 280K.



Le point $V1$ correspond au début de la condensation lorsque le gaz est comprimé à température constante. Le point $V2$ correspond au début de l'ébullition lorsque le liquide est détendu à température constante.

Ici, la valeur calculée de P_{vap} est de 52,6bar : la valeur expérimentale de la pression de vapeur du CO: à 280K est de 41.6 bar. L'écart avec l'expérience n'est donc pas négligeable. En effet, le modèle de Van der Waals n'est pas complet. Les seuls paramètres a et b ne sont de toute évidence pas suffisant pour une description plus exacte, mais l'approche est néanmoins pertinente.

On peut ainsi tracer une famille d'isothermes d'Andrews à différentes températures. Ci-dessous un exemple pour l'eau.



Sous la courbe rouge, la phase liquide est en équilibre avec la phase vapeur ; la pression est constante : c'est la pression saturante à la température T .

A gauche de la courbe bleue, la phase est un liquide pur. Les isothermes sont très raides ce qui corrobore le fait que les liquides sont peu compressibles.

La courbe bleue est l'isotherme correspondant à la température critique, elle est particulière car présentant un point d'inflexion horizontal appelé point critique. A une température supérieure à la température critique, il n'existe plus de transition de phase entre le gaz et le liquide : il devient impossible de liquéfier un gaz en le comprimant. Dans cet état, on parle de fluide supercritique. Un tel fluide possède des propriétés gazeuses mais se comporte aussi comme un solvant vis-à-vis de solides.

En dessus de la température critique, les courbes tendent à se rapprocher de celles d'un gaz parfait qui sont de la forme $1/x$, c'est pourquoi un gaz dont la température critique est très basse comme l'azote ou l'oxygène se comportent comme un gaz parfait à la température ambiante.

Calcul de Γ

Γ est le rapport des capacités calorifiques pour le gaz de Van der Waals. Il est défini de la manière suivante :

$$\Gamma = \frac{C_p}{C_v}$$

D'autre part, on a l'expression :

$$C_p - C_v = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_p \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p$$

L'équation d'état du gaz de Van der Waals est donnée par :

$$P = \frac{R}{1 - b\rho} \rho T - a\rho^2$$

D'autre part, on peut écrire :

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p = \frac{\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_p}{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T}$$

On a alors :

$$C_p - C_v = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_p^2 \frac{1}{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T}$$

A partir de l'équation d'état de Van der Waals, on obtient alors :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_p^2 = \left(\frac{R\rho}{1 - b\rho} \right)^2$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = RT \left[\frac{(1 - b\rho) + b\rho}{(1 - b\rho)^2} \right] - 2a\rho$$

D'où, on tire :

$$C_p - C_v = R \frac{1}{1 - \frac{2a\rho(1 - b\rho)^2}{RT}}$$

Puis :

$$\Gamma = \frac{C_p}{C_v} = 1 + \frac{1}{C_v \left[\frac{1 - 2a\rho(1 - b\rho)^2}{RT} \right]}$$

Et, en prenant :

$$C_v = \frac{R}{\gamma - 1}$$

On aboutit finalement à :

$$\Gamma = 1 + \frac{\gamma - 1}{1 - \frac{2a\rho(1 - b\rho)^2}{RT}}$$

Les fluides utilisés pour simulation sont : le dioxyde de carbone CO_2 , l'acétylène C_2H_2 , l'éthane C_2H_6 et l'hydrogène H_2 . Ces fluides possèdent des propriétés thermophysiques et physico-chimiques qui sont : la masse, le volume, la pression, la température, la masse volumique, l'enthalpie, les chaleurs spécifiques, la viscosité, la conductivité thermique, la concentration, la solubilité et le volume spécifique. Les propriétés de chaque fluide sont illustrées ci-dessous :

a. Dioxyde de carbone :

Le dioxyde de carbone est le résultat de la combinaison de deux éléments : le carbone et l'oxygène. Il est produit par différents processus : la combustion du charbon et des hydrocarbures, la fermentation des liquides et la respiration des humains et des animaux. On le trouve en faible proportion dans l'atmosphère ; il est assimilé par les plantes qui, à leur tour, produisent de l'oxygène. Le CO_2 gazeux a une odeur légèrement irritante, il est incolore et plus lourd que l'air. Il gèle à $-78,5^\circ\text{C}$ pour former de la neige carbonique. En solution aqueuse, il forme de l'acide carbonique, qui est trop instable pour pouvoir être isolé facilement. [63]

Le tableau ci-dessous [63] récapitule les propriétés thermophysiques et physico-chimiques du dioxyde de carbone :

Propriétés	Variables et valeurs
Masse molaire	<ul style="list-style-type: none"> Poids moléculaire : 44.01 g/mol
Phase solide	<ul style="list-style-type: none"> Chaleur latente de fusion (1,013 bar, au point triple) : 196.104 kJ/kg Masse volumique du solide : 1562 kg/m³
Phase liquide	<ul style="list-style-type: none"> Masse volumique de la phase liquide (à -20°C et 19,7 bar) : 1032 kg/m³ Equivalent gaz/liquide (1,013 bar et 15°C (par kg de solide)) : 845 vol/vol Point d'ébullition (Sublimation) : -78.5°C Chaleur latente de vaporisation (1,013 bar au point d'ébullition) : 571.08 kJ/kg Pression de vapeur (à 20°C) : 58.5 bar
Phase gazeuse	<ul style="list-style-type: none"> Masse volumique du gaz (1,013 bar au point de sublimation) : 2.814 kg/m³ Masse volumique de la phase gazeuse (1,013 bar et 15°C) : 1.87 kg/m³ Facteur de compressibilité (Z) (1,013 bar et 15°C) : 0.9942 Masse volumique (air = 1) (1,013 bar et 21°C) : 1.521 Volume spécifique (1,013 bar et 21°C) : 0.547 m³/kg Chaleur spécifique à pression constante (C_p) (1,013 bar et 25°C) : 0.037 kJ/ (mole.K)

	<ul style="list-style-type: none"> • Chaleur spécifique à volume constant (C_v) (1,013 bar et 25 °C) : 0.028 kJ/ (mole.K) • Rapport des chaleurs spécifiques (Gamma: C_p/C_v) (1,013 bar et 25 °C) : 1.293759 • Viscosité (1,013 bar et 0 °C) : 0.0001372 Poise • Conductivité thermique (1,013 bar et 0 °C) : 14.65 mW/ (m.K)
Point critique	<ul style="list-style-type: none"> • Température critique : 31 °C • Pression critique : 73.825 bars • Masse volumique critique : 464 kg/m³
Point triple	<ul style="list-style-type: none"> • Température au point triple : -56.6 °C • Pression au point triple : 5.185 bars
Autres données	<ul style="list-style-type: none"> • Solubilité dans l'eau (1,013 bar et 0 °C) : 1.7163 vol/vol • Concentration dans l'air : 0.03 % vol

Tableau A 3.1: les propriétés du dioxyde de carbone.

Les principales applications du dioxyde de carbone dans l'industrie sont illustrées dans le tableau ci-dessous [63] :

Industries	Applications
Industrie chimique	<ul style="list-style-type: none"> - Le dioxyde de carbone est utilisé en chimie pour le contrôle de la température des réacteurs. - Le CO₂ est également mis en œuvre pour la neutralisation des effluents alcalins. - Le dioxyde de carbone est utilisé sous des conditions supercritiques pour réaliser des purifications ou des opérations de teintures de fibres polymères ou végétales ou animales
Industrie pharmaceutique	Le dioxyde de carbone est utilisé pour l'inertage, la synthèse chimique, l'extraction en phase supercritique (SFE), la neutralisation (pH) des effluents aqueux ou le transport de produits à basse température (-78 °C).
Alimentaire et boissons	<ul style="list-style-type: none"> - La carbonatation des boissons gazeuses, comme les sodas, l'eau minérale ou la bière. - Dans le conditionnement des denrées alimentaires, ses propriétés d'inertage et bactériostatiques se combinent bien avec celles de l'azote et augmentent la durée de vie des aliments. - Comme fluide cryogénique dans les opérations de refroidissement ou de congélation ou comme glace carbonique pour la régulation des températures pendant la distribution des denrées alimentaires. - La caféine est ôtée du café par le CO₂ supercritique.

Santé	<ul style="list-style-type: none"> - Le CO₂ produit une atmosphère proche des conditions physiologiques lors de la manipulation d'organes artificiels. - Le dioxyde de carbone est utilisé en mélange avec l'air ou l'oxygène pour doper la respiration. Il sert aussi pour la dilatation chirurgicale par insufflation intra-abdominale
Industrie des métaux	<ul style="list-style-type: none"> - CO₂ est employé pour supprimer les fumées rousses pendant le chargement des riblons et du charbon, pour la réduction de la prise d'azote durant la coulée à partir d'un EAF et pour brasser le mélange au niveau de la sole. - Dans la métallurgie non ferreuse, le dioxyde de carbone sert à supprimer les fumées pendant le transfert de matte (production de Cu / Ni) ou des lingots de métal précieux (production de Zn / Pb) dans la poche de coulée. - De petites quantités de CO₂ liquide peuvent être utilisées dans les procédés de recyclage des eaux provenant des drains des mines; - Les célèbres lasers CO₂ sont alimentés par du gaz carbonique à pureté adaptée.
Laboratoires et analyses	<ul style="list-style-type: none"> - Le CO₂ est la phase mobile dans des procédés d'extraction ou de chromatographie en phase supercritique.
Pâtes et papiers	<ul style="list-style-type: none"> - Le dioxyde de carbone de réguler finement le pH des pâtes recyclées, mécaniques ou chimiques après un blanchiment alcalin. CO₂ peut être utilisé dans la neutralisation du "tall-oil" et pour l'amélioration du fonctionnement des machines à papier.
Electronique	<ul style="list-style-type: none"> - Le dioxyde de carbone est généralement employé dans le traitement des eaux usées ou en tant que milieu de refroidissement durant les essais climatiques des composants électroniques. - Le dioxyde de carbone peut servir à augmenter la conductivité de l'eau ultra-pure ou pour le nettoyage abrasifs de pièces sous forme de neige carbonique et dans le procédé propre de nettoyage des résines photosensibles au CO₂ supercritique afin d'éviter l'utilisation de solvants organiques.
Environnement	<ul style="list-style-type: none"> - L'injection de dioxyde de carbone permet de maîtriser le pH des effluents aqueux. Le CO₂ est une excellente alternative au contrôle du pH par l'acide sulfurique.
Autres industries	<ul style="list-style-type: none"> - Neige carbonique pour extincteurs, contrôle et régulation du pH des eaux usées, piscines, etc.

Tableau A 3.2: Les principales applications du dioxyde de carbone dans l'industrie.

b. L'Acétylène :

L'acétylène (C_2H_2) n'est pas un gaz de l'air mais un gaz de synthèse, produit généralement à partir de la réaction du carbure de calcium avec l'eau. Au 19^{ième} siècle, on le brûlait dans les "lampes à acétylène" pour l'éclairage des maisons et des tunnels dans les mines. Hydrocarbure gazeux, il est incolore, a une odeur d'ail prononcée, est instable, hautement combustible et produit une flamme très chaude (plus de 3000°C) en présence d'oxygène. [63]

Le tableau ci-dessous [63] récapitule les propriétés thermophysiques et physico-chimiques de l'Acétylène :

Propriétés	Variables et valeurs
Masse molaire	<ul style="list-style-type: none"> Poids moléculaire : 26.038 g/mol
Phase solide	<ul style="list-style-type: none"> Point de fusion : -84 °C Masse volumique du solide : 729 kg/m³
Phase liquide	<ul style="list-style-type: none"> Equivalent gaz/liquide (1,013 bar et 15 °C) : 663 vol/vol Point d'ébullition (1,013 bar) : -83.8 °C Chaleur latente de vaporisation (1,013 bar au point d'ébullition) : 801.9 kJ/kg Pression de vapeur (à 20 °C) : 44 bars
Phase gazeuse	<ul style="list-style-type: none"> Masse volumique du gaz (au point de sublimation) : 1.729 kg/m³ Masse volumique de la phase gazeuse (1,013 bar et 0 °C) : 1.171 kg/m³ Masse volumique de la phase gazeuse (1,013 bar et 15 °C) : 1.11 kg/m³ Facteur de compressibilité (Z) (1,013 bar et 15 °C) : 0.9924 Masse volumique (air = 1) (1,013 bar et 15 °C) : 0.91 Volume spécifique (1,013 bar et 21 °C) : 0.918 m³/kg Chaleur spécifique à pression constante (Cp) (1,013 bar et 15,6 °C) : 0.041 kJ/ (mole.K) Chaleur spécifique à volume constant (Cv) (1,013 bar et 15,6 °C) : 0.033 kJ/ (mole.K) Rapport des chaleurs spécifiques (Gamma: Cp/Cv) (1,013 bar et 15,6 °C) : 1.259843 Viscosité (1,013 bar et 0 °C) : 0.0000954 Poise Conductivité thermique (1,013 bar et 0 °C) : 18.51 mW/ (m.K)

Point critique	<ul style="list-style-type: none"> • Température critique : 35.1 °C • Pression critique : 61.91 bar • Masse volumique critique : 230.8 kg/m³
Point triple	<ul style="list-style-type: none"> • Température au point triple : -80.6 °C • Pression au point triple : 1.282 bars
Autres données	<ul style="list-style-type: none"> • Solubilité dans l'eau (1,013 bar et 0 °C) : 1.72 vol/vol • Température d'auto-inflammation : 325 °C

Tableau A 3.3: les propriétés de l'Acétylène.

Les principales applications de l'Acétylène dans l'industrie sont illustrées dans le tableau ci-dessous [63] :

Industries	Applications
Verre, Ciment et Chaux	- L'acétylène est un gaz combustible surtout utilisé pour la lubrification automatique des moules de formage des bouteilles en verre.
Laboratoires et analyses	- L'acétylène est le gaz combustible de la flamme dans les analyseurs par absorption atomique (AAS).
Soudage, coupage et projection thermique	- L'acétylène est le gaz combustible le plus performant et le plus polyvalent; C ₂ H ₂ permet des applications manuelles dans le soudage, le brasage, le coupage ou n'importe quel autre processus de chauffage localisé.

Tableau A 3.4: Les principales applications de l'Acétylène dans l'industrie.

c. L'Éthane :

L'éthane est un hydrocarbure de la famille des alcanes de formule brute C₂H₆. C'est un gaz combustible, incolore et inodore que l'on peut trouver dans le gaz naturel et aussi dans les gaz du pétrole. C'est le réactif de base pour la synthèse de l'éthylène via le vapocraquage [63]. L'éthane est un constituant du gaz de pétrole liquéfié qui est un combustible utilisé comme remplaçant du gaz naturel pour des applications particulières, il se décompose à partir d'une température de 500 °C. [64]

Sur Terre, on mesure quinze mégatonnes de ce gaz dans l'atmosphère par an :

1. Deux à quatre mégatonnes sont libérées par les volcans de boue, sources géothermales, bassins pétroliers et micro fuites de gaz au fond des océans ;
2. une dizaine de mégatonnes proviennent des feux de forêt, de l'activité biologique des océans, de la faune et des êtres humains [62].

Le tableau ci-dessous [63] récapitule les propriétés thermophysiques et physico-chimiques de l'Éthane :

Propriétés	Variables et valeurs
Masse molaire	<ul style="list-style-type: none"> Poids moléculaire : 30.069 g/mol
Phase solide	<ul style="list-style-type: none"> Point de fusion : -183.3 °C Chaleur latente de fusion (1,013 bar, au point triple) : 94.977 kJ/kg
Phase liquide	<ul style="list-style-type: none"> Masse volumique de la phase liquide (1,013 bar au point d'ébullition) : 546.49 kg/m³ Equivalent gaz/liquide (1,013 bar et 15 °C) : 432 vol/vol Point d'ébullition (1,013 bar) : -88.7 °C Chaleur latente de vaporisation (1,013 bar au point d'ébullition) : 488.76 kJ/kg Pression de vapeur (à 21 °C) : 38.3 bar
Phase gazeuse	<ul style="list-style-type: none"> Masse volumique du gaz (1,013 bar au point d'ébullition) : 2.054 kg/m³ Masse volumique de la phase gazeuse (1,013 bar et 15 °C) : 1.282 kg/m³ Facteur de compressibilité (Z) (1,013 bar et 15 °C) : 0.9912 Masse volumique (air = 1) (1,013 bar et 15 °C) : 1.047 Volume spécifique (1,013 bar et 21 °C) : 0.799 m³/kg Chaleur spécifique à pression constante (Cp) (1 bar et 25 °C) : 0.053 kJ/ (mole.K) Chaleur spécifique à volume constant (Cv) (1 bar et 25 °C) : 0.044 kJ/ (mole.K) Rapport des chaleurs spécifiques (Gamma: Cp/Cv) (1 bar et 25 °C) : 1.193258 Viscosité (1,013 bar et 0 °C) : 0.0000855 Poise Conductivité thermique (1,013 bar et 0 °C) : 18 mW/ (m.K)
Point critique	<ul style="list-style-type: none"> Température critique : 32.2 °C Pression critique : 48.839 bar Masse volumique critique : 225.72 kg/m³
Autres données	<ul style="list-style-type: none"> Solubilité dans l'eau (1,013 bar et 20 °C) : 0.052 vol/vol Température d'auto-inflammation : 515 °C

Tableau A 3.5: les propriétés de l'éthane.

Les principales applications de l'Éthane dans l'industrie sont illustrées dans le tableau ci-dessous [63] :

Industries	Applications
Industrie chimique	- L'éthane est utilisé dans la fabrication d'intermédiaires en synthèse organique; par exemple, l'éthane produit le chlorure d'éthylène par chloration.

Tableau 3.6: Les principales applications de l'éthane dans l'industrie.

d. L'Hydrogène :

Découvert en 1765 par Henry Cavendish, l'hydrogène doit son nom à Lavoisier, du grec « hydro », eau et « genen », engendré. Il est le gaz le plus léger du monde et n'est donc pas retenu par l'attraction terrestre.

L'hydrogène ne se trouve dans l'atmosphère qu'à l'état de traces ; il est donc généré, à partir des hydrocarbures (pétrole et ses dérivés), et à partir de l'eau, puisqu'il représente la fraction la plus légère de la molécule H₂O. L'hydrogène est un gaz incolore, extrêmement inflammable, très léger, qui n'entretient pas la vie et réagit facilement en présence d'autres substances chimiques. [63]

La pile à combustible : Rouler dans une voiture silencieuse et qui ne pollue pas, tout le monde en rêve! L'hydrogène est ce vecteur d'énergie propre. Utilisé dans une pile à combustible, il se combine à l'oxygène pour produire efficacement de l'électricité en ne rejetant que de l'eau.

Le tableau ci-dessous [63] récapitule les propriétés thermophysiques et physico-chimiques de l'Hydrogène :

Propriétés	Variables et valeurs
Masse molaire	<ul style="list-style-type: none"> • Poids moléculaire : 2.016 g/mol
Phase solide	<ul style="list-style-type: none"> • Point de fusion : -259 °C • Chaleur latente de fusion (1,013 bar, au point triple) : 58.158 kJ/kg
Phase liquide	<ul style="list-style-type: none"> • Masse volumique de la phase liquide (1,013 bar au point d'ébullition) : 70.973 kg/m³ • Equivalent gaz/liquide (1,013 bar et 15 °C) : 844 vol/vol • Point d'ébullition (1,013 bar) : -252.8 °C • Chaleur latente de vaporisation (1,013 bar au point d'ébullition) : 454.3 kJ/kg

Phase gazeuse	<ul style="list-style-type: none"> • Masse volumique du gaz (1,013 bar au point d'ébullition) : 1.312 kg/m³ • Masse volumique de la phase gazeuse (1,013 bar et 15 °C) : 0.085 kg/m³ • Facteur de compressibilité (Z) (1,013 bar et 15 °C) : 1.001 • Masse volumique (air = 1) (1,013 bar et 21 °C) : 0.0696 • Volume spécifique (1,013 bar et 21 °C) : 11.986 m³/kg • Chaleur spécifique à pression constante (Cp) (1 bar et 25 °C) : 0.029 kJ/ (mole.K) • Chaleur spécifique à volume constant (Cv) (1 bar et 25 °C) : 0.021 kJ/ (mole.K) • Rapport des chaleurs spécifiques (Gamma: Cp/Cv) (1 bar et 25 °C) : 1.384259 • Viscosité (1,013 bar et 15 °C) : 0.0000865 Poise • Conductivité thermique (1,013 bar et 0 °C) : 168.35 mW/ (m.K)
Point critique	<ul style="list-style-type: none"> • Température critique : -240 °C • Pression critique : 12.98 bar • Masse volumique critique : 30.09 kg/m³
Point triple	<ul style="list-style-type: none"> • Température au point triple : -259.3 °C • Pression au point triple : 0.072 bars
Autres données	<ul style="list-style-type: none"> • Solubilité dans l'eau (1,013 bar et 0 °C) : 0.0214 vol/vol • Concentration dans l'air : 0.00005 % vol • Température d'auto-inflammation : 560 °C

Tableau A 3.7: les propriétés de l'Hydrogène.

Les principales applications de l'Hydrogène dans l'industrie sont illustrées dans le tableau ci-dessous [63] :

Industries	Applications
Espace et Aéronautique	- L'hydrogène est utilisé sous forme liquide comme ergol pour la propulsion des étages cryogéniques des fusées Ariane.
Verre, Ciment et Chaux	- L'hydrogène est principalement utilisé pour la création en combinaison avec l'azote d'une atmosphère réductrice au-dessus du bain d'étain dans le procédé FLOAT. - On utilise l'hydrogène pour le traitement thermique (flamme oxy hydrogène) du verre creux et des préformes en fibre optique.
Soudage, coupage et projection thermique	- Traitement thermique de divers métaux
Alimentaire et boissons	- L'hydrogène pur est utilisé pour la production de plastiques, polyester et nylon. H ₂ est aussi utilisé dans l'hydrogénation des amines et acides gras (huiles alimentaires).
Pétrole et dérivés	- Désulfuration du fioul et de l'essence
Industrie des métaux	- Atmosphère réductrice pour des procédés de traitement thermique.
Laboratoires et analyses	- L'hydrogène est utilisé comme gaz porteur en chromatographie en phase gazeuse et dans de nombreuses techniques analytiques. Les plus communes sont l'utilisation dans les flammes des détecteurs à ionisation de flamme (FID) ou des détecteurs à photométrie de flamme (FPD). On utilise aussi des mélanges contenant de l'hydrogène dans les appareils d'étincelages et dans la mesure des hydrocarbures totaux.
Automobiles et transports	- L'hydrogène est un vecteur d'énergie nouvelle sans production d'oxydes de carbone utilisé dans les piles à combustibles.
Electronique	- L'hydrogène est généralement utilisé comme gaz de balayage lors des étapes de dépôt de silicium ou de croissance cristalline, aussi bien que dans le brasage sous atmosphère et le recuit de films de cuivre. L'emploi d'hydrogène avec des gaz inertes protecteurs (H ₂ dilué dans de l'azote) permet théoriquement d'éliminer la totalité de l'oxygène ainsi que ses inconvénients dans un milieu essentiel pour les procédés à haute ou moyenne températures.

Tableau A 3.8: Les principales applications de l'Hydrogène dans l'industrie.

Calcul de la vitesse du son pour le gaz de Van der Waals

L'expression de la vitesse du son est donnée par :

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T \frac{C_p}{C_v}$$

Connaissant l'équation d'état du gaz de Van der Waals :

$$P = \frac{R}{1 - b\rho} \rho T - a\rho^2$$

D'après l'annexe 2, on a :

$$\Gamma = \frac{C_p}{C_v} = 1 + \frac{1}{C_v \left[\frac{1 - 2a\rho(1 - b\rho)^2}{RT} \right]} = 1 + \frac{\gamma - 1}{1 - \frac{2a\rho(1 - b\rho)^2}{RT}}$$

γ étant le rapport des chaleurs massiques pour le gaz parfait.

Et comme, on a toujours d'après l'annexe 2 :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = \frac{RT}{(1 - b\rho)^2} - 2a\rho$$

On en déduit alors :

$$c^2 = \left[1 + \frac{\gamma - 1}{1 - \frac{2a\rho(1 - b\rho)^2}{RT}} \right] \left[\frac{RT}{(1 - b\rho)^2} - 2a\rho \right]$$

Courbes de la pression de vapeur

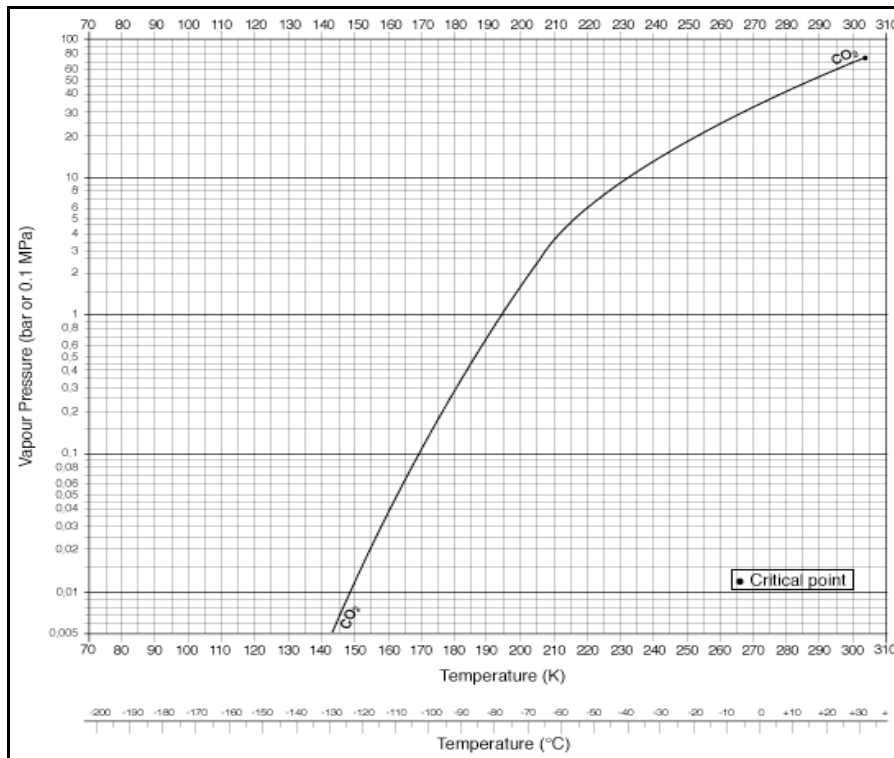


Figure A 5.1 : Courbe de pression de vapeur. Le point critique est marqué par un point noir sur la courbe d'équilibre liquide-vapeur. [63]

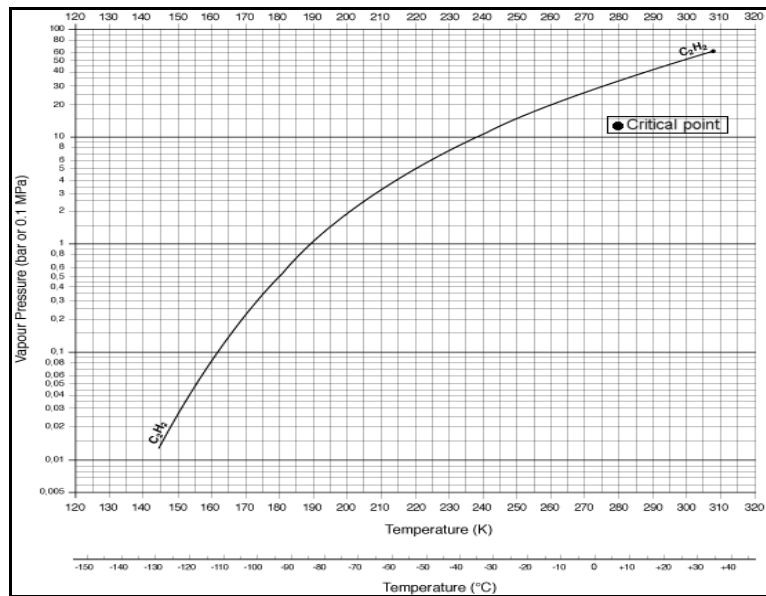


Figure A 5.2 : Courbe de pression de vapeur. Le point critique est marqué par un point noir sur la courbe d'équilibre liquide-vapeur. [63]

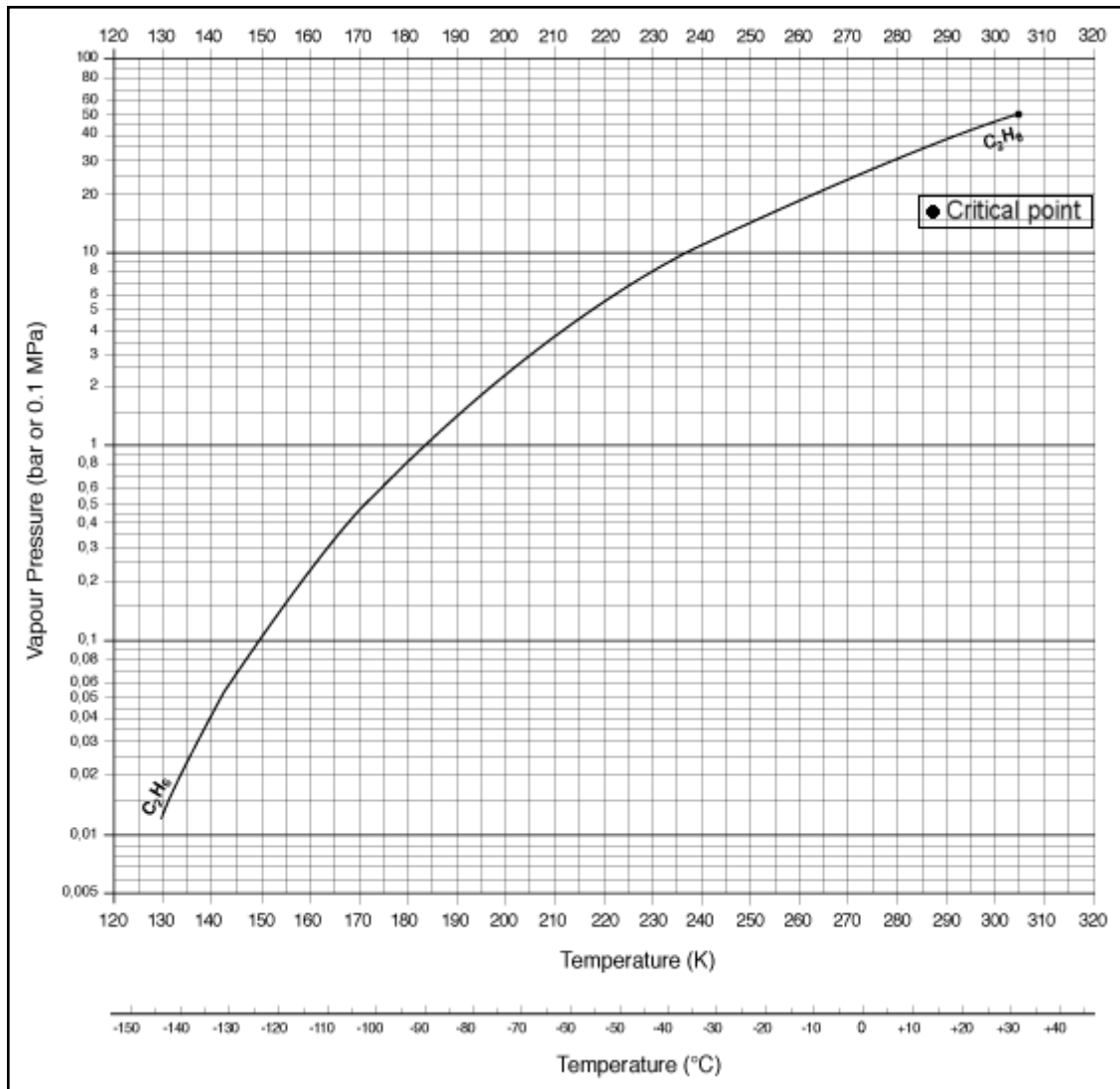


Figure A 5.3 : Courbe de pression de vapeur. Le point critique est marqué par un point noir sur la courbe d'équilibre liquide-vapeur. [63]

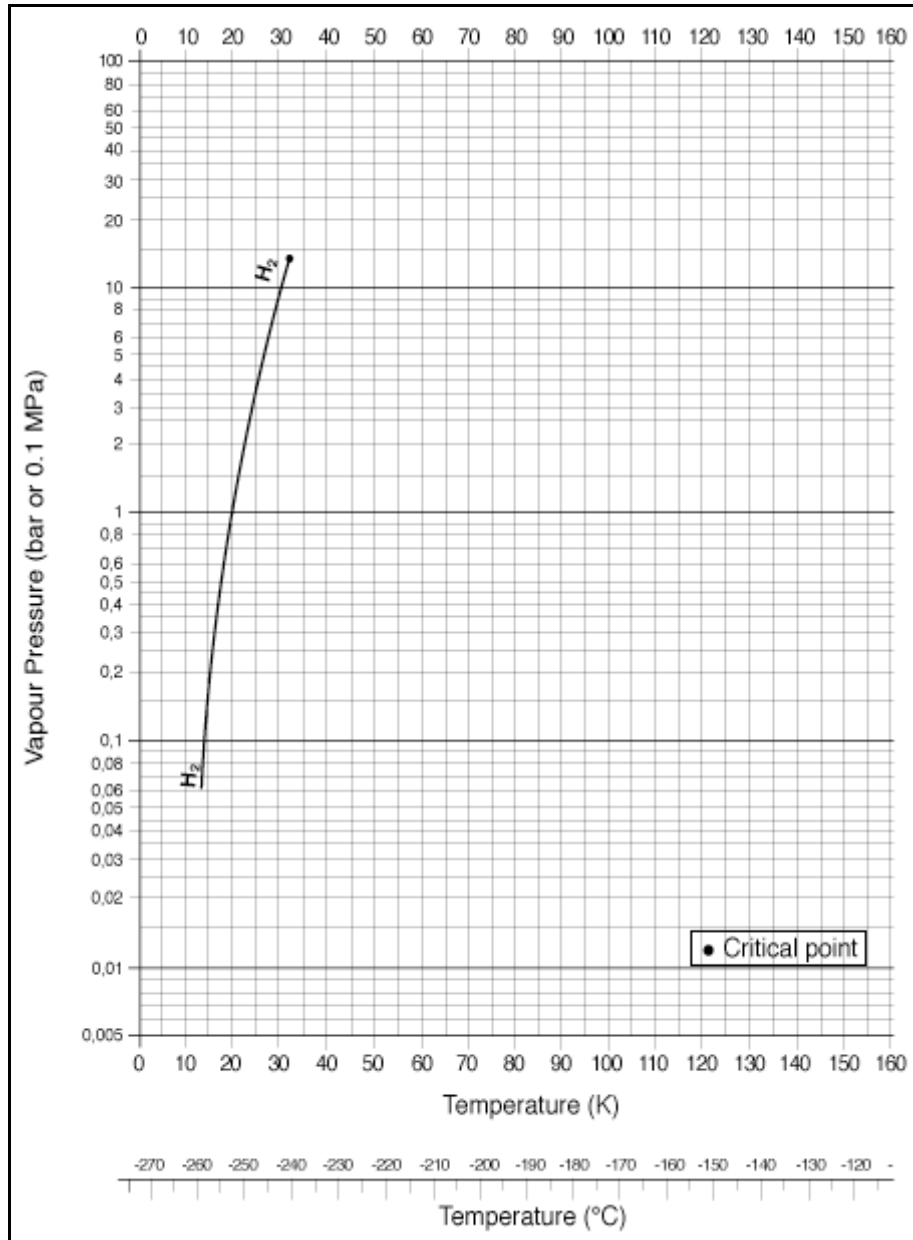


Figure A 5.4 : Courbe de pression de vapeur. Le point critique est marqué par un point noir sur la courbe d'équilibre liquide-vapeur. [63]

Titre : Effet de l'apesanteur sur l'accélération de transport de chaleur par expansion de la couche près de la paroi dans un fluide supercritique.

Résumé :

Etude de l'effet de l'apesanteur sur l'accélération de transport de la chaleur par expansion de la couche limite dans un fluide supercritique, où le CO₂ supercritique est pris comme référence. Dans un premier temps, nous allons étudier un fluide dont le point critique est voisin de celui du CO₂, afin de comparer les résultats issus des simulations. Ensuite, nous procéderons avec un fluide dont le point critique est très éloigné de celui du CO₂, notamment un ergol embarqué tels que l'oxygène et l'hydrogène.

Mots clés : fluides supercritiques, effet piston, microgravité, phénomène thermoacoustique.

Title: Effect of microgravity on the acceleration of heat transport by expanding of the layer near the wall in a supercritical fluid.

Abstract:

Study of the effect of microgravity on the acceleration of heat transport by expansion of the layer near the wall in a supercritical fluid, where the supercritical CO₂ is taken as reference. Initially, we will consider a fluid that's the critical point is close to that of CO₂, to compare results from simulations. Then we will proceed with a fluid whose critical point is far from that of CO₂, including a propellant onboard such as oxygen and hydrogen.

Keywords: supercritical fluids, piston effect, microgravity, thermo-acoustic phenomena.

الموضوع : تأثير انعدام الجاذبية على تسريع انتقال الحرارة من خلال توسيع الطبقة المحاذية للجدار في السوائل فوق الحرجة.

الملخص:

دراسة تأثير انعدام الجاذبية على تسريع انتقال الحرارة من خلال توسيع الطبقة المحاذية للجدار في السوائل فوق الحرجة, حيث نستخدم غاز ثاني أكسيد الكربون فوق الحرج كمرجع لهذه الدراسة. في بادئ الأمر, نقوم بدراسة سائل ذو النقطة الحرجة الأقرب لتلك الخاصة بغاز ثاني أكسيد الكربون وهذا من اجل مقارنة نتائج المحاكاة. ثم ننتقل لسائل آخر ذو النقطة الحرجة الأبعد بكثير من تلك الخاصة بغاز ثاني أكسيد الكربون, كالأخذ بعين الاعتبار الوقود المحمل على متن الصواريخ كالأوكسجين و الهيدروجين.

كلمات المفتاح: السوائل فوق الحرجة, تأثير المكبس, انعدام الجاذبية, الظواهر الحرارية-الصوتية.