



Frédéric Elie on
ResearchGate

Flux interfacial et transport physique pour un mélange gazeux dans une ampoule de croissance cristalline, étude théorique et expérimentation numérique

Frédéric Élie

22 juin 1984

CopyrightFrance.com

La reproduction des articles, images ou graphiques de ce site, pour usage collectif, y compris dans le cadre des études scolaires et supérieures, est interdite. Seuls sont autorisés les extraits, pour exemple ou illustration, à la seule condition de mentionner clairement l'auteur et la référence de l'article

« Si vous ne dites rien à votre brouillon, votre brouillon ne vous dira rien ! »
Jacques Breuneval, mathématicien, professeur à l'université Aix-Marseille I, 1980

Université d'Aix-Marseille II
U.E.R. Institut de Mécanique des Fluides

THESE

présentée pour obtenir le grade de
Docteur de Troisième Cycle

par

Frédéric ELIE

soutenue le 22 juin 1984 devant la Commission d'Examen :

Melle	C. CLARION,	Professeur, Univ. Aix-Marseille II, Président
MM.	P. BONTOUX,	Chargé de Recherche, CNRS-IMFM
	R. CADORET,	Professeur, Univ. Clermont I
	J-C. LAUNAY,	Ingénieur, CNRS – Univ. Bordeaux I
	R. PEYRET,	Directeur de Recherche, CNRS – Univ. de Nice
	B. ROUX,	Maître de Recherche, CNRS-IMFM
	R. SANI,	Professeur, Univ. of Colorado, Boulder
	B. ZAPPOLI,	Ingénieur, CNES, Toulouse

ABSTRACT

Nous avons modélisé le phénomène de double diffusion qui apparaît dans un tube de croissance cristalline par transport physique dans une phase vapeur confinée. Le modèle est restreint à une configuration bidimensionnelle, représentant l'écoulement dans un plan de symétrie d'une ampoule cylindrique. Cette hypothèse s'appuie en fait sur la comparaison avec les résultats 3D obtenus par voie expérimentale (Schiroky et Rosenberger) et numérique (Smutek et al) dans le cas de la convection naturelle pure.

Le modèle 2D de la double diffusion repose sur des hypothèses de linéarité pour les transports (lois de Fourier et de Fick) et de quasi-incompressibilité (fluide de Boussinesq). Les équations ont été résolues à l'aide de la méthode spectrale Tau-Chebyshev. Les changements de régimes de transport du composant actif ont été étudiés par simulation numérique qui a mis en évidence l'influence relative des flux diffusionnel interfacial et de convection. Pour décrire les transitions une analyse théorique a permis de construire des corrélations entre les paramètres de l'écoulement en tenant compte d'une variation locale de la densité avec la concentration. Un critère a été obtenu pour la transition entre un écoulement dominé par la convection et un écoulement dominé par la diffusion. La relation en ordre de grandeur s'exprime entre le taux de sublimation E , le rapport de forme ℓ , le nombre de Lewis Le , et le nombre de Rayleigh équivalent Ra_{eq} :

$$E \sim 1 + \frac{16 \times 9 \sqrt{3}}{Le |Ra_{eq}| \ell^3}$$

Cette prédiction s'est avérée satisfaisante dans les cas que nous avons traités numériquement : la cavité ayant un allongement $\ell \sim 0,2$ et les nombres de Prandtl et de Lewis étant de l'ordre de l'unité, nous avons pris comme gamme des valeurs des paramètres à étudier :

- $1 < E \leq 10$
- $Ra_T \sim 0, |Ra_M| < 10^6$ (convection solutale)
- $Ra_T < 10^6, Ra_M \sim 0$ (convection thermique)
- $Ra_{eq} \sim 0$ avec soit $Ra_T \sim |Ra_M|$, soit Ra_T et $Ra_M \sim 0$

Dans tous ces cas il a été supposé que l'agent de transport était l'espèce la plus lourde ($M_A > M_B$) et que la densité du fluide moyen était plus grande à la source qu'au puits.

De plus, dans le modèle proposé on a supposé une indépendance entre l'écoulement et les phénomènes à l'interface. Cette simplification est utile pour une première analyse de la double diffusion dans un tube de croissance cristalline par transport physique. Une étude complémentaire doit prendre en compte des interactions qui existent entre les propriétés thermo-chimiques du cristal et les propriétés hydrodynamiques du fluide. Des modèles d'interactions au niveau des conditions aux limites ont été proposés avec une approximation 1D (Omaly, Robert et Cadoret, 1981, Zappoli et Élie, 1984).

AVANT-PROPOS

Le travail présenté dans ce mémoire concerne l'application d'une méthode spectrale de type Tau-Chebyshev au problème de la double diffusion dans une ampoule de croissance cristalline et incluant des modèles de flux interfacial. Ce sujet se place parmi les activités de l'équipe de Mécanique des Fluides Numérique de l'IMFM à deux titres : d'une part le développement des méthodes spectrales comme méthodes d'approximation efficaces, d'autre part l'analyse des mécanismes hydrodynamiques liés aux phénomènes de la croissance. Ce travail est également le fruit de collaborations entretenues par l'équipe de Mécanique des Fluides Numérique de l'IMFM et les équipes du Professeur Franz Rosenberger (University of Utah, à Salt Lake City) et du Professeur Robert Sani (University of Colorado, à Boulder).

Qu'il me soit ici permis d'exprimer tout d'abord ma profonde reconnaissance à l'équipe de Mécanique des Fluides Numérique de l'IMFM : Monsieur Bernard Roux, Maître de Recherche CNRS, Monsieur Patrick Bontoux, Chargé de recherche CNRS et Monsieur Guy-Pierre Extrémet, Chargé de recherche CNRS qui, par leurs conseils, leur encadrement et leur disponibilité, m'ont permis de réaliser cette étude dans les meilleures conditions.

Ma gratitude s'adresse également à Monsieur le Professeur Franz Rosenberger et son équipe Messieurs G.H. Schiroky et B.L. Markham pour les informations et les discussions échangées.

Ce travail a pu être réalisé grâce au soutien financier du CNRS, du CNES et de la DRET. Les exploitations du code numérique ont été réalisées sur les ordinateurs IBM 3033 du CNUSC et CRAY 1S du CCVR, avec l'assistance et les conseils du Point d'Accès Saint-Charles. Que Messieurs K. Dang Quoc et G. Barisone en soient vivement remerciés.

J'exprime mes sincères remerciements à Mademoiselle Claire Clarion, professeur à l'Université d'Aix-Marseille II, qui m'a fait l'honneur de présider le Jury.

Ma reconnaissance s'adresse à Monsieur le Professeur Robert Cadoret (de l'Université Clermont I), à Monsieur Jean-Claude Launay, Ingénieur CNRS, Université Bordeaux I, à Monsieur Roger Peyret, Directeur de Recherche CNRS, Université de Nice, à Monsieur le Professeur Robert Sani (University of Colorado, Boulder) et Monsieur Bernard Zappoli, Ingénieur au CNES, Toulouse, pour leurs conseils et pour m'avoir fait l'honneur de participer à ce Jury.

Je souhaite que Monsieur le Professeur Jacques Chauvin, Directeur de l'IMFM, qui m'a accueilli dans son Laboratoire, trouve aussi l'expression de mes remerciements.

Je voudrais également remercier vivement Madame A.M. Bachasson et Monsieur J.P. Escoffier en insistant sur leurs contributions quant à la réalisation et à l'édition finale du présent mémoire.

SOMMAIRE

Chapitre 1 : Introduction

Chapitre 2 : Étude de la croissance cristalline en phase fluide. Expériences, modèles et simulations, travaux antérieurs

2.1. Croissance cristalline en phase fluide

- 2.1.1. Généralités
- 2.1.2. Principaux types de croissance cristalline en phase fluide
- 2.1.3. Croissance cristalline en phase liquide (bain fondu)
- 2.1.4. Croissance cristalline en phase vapeur
- 2.1.5. Effet Soret
- 2.1.6. Résumé des principaux procédés de croissance cristalline en phase fluide et situation de ce travail

2.2. Convection naturelle dans les ampoules : modèles cylindriques et 2D

Chapitre 3 : Modélisation mathématique du problème de double diffusion

3.1. Introduction

- 3.1.1. Modèle physique
- 3.1.2. Modélisation mathématique

3.2. Définition des grandeurs dans le phénomène de la double diffusion

- 3.2.1. Conduction thermique pure
- 3.2.2. Convection naturelle
- 3.2.3. Diffusion massique
- 3.2.4. Résumé

3.3. Hypothèses de base pour un gaz binaire

3.4. Modélisation mathématique

- 3.4.1. Géométrie du problème. Équations générales du mouvement
- 3.4.2. Formulation en variables de rotationnel des vitesses et fonction de courant
- 3.4.3. Conditions aux limites naturelles (absence de sublimation et de condensation aux parois actives)

3.5. Solutions asymptotiques pour la convection naturelle et la double diffusion

- 3.5.1. Introduction
- 3.5.2. Solutions asymptotiques pour la convection naturelle entre deux parois verticales
- 3.5.3. Solutions asymptotiques pour la convection naturelle en cavité de faible allongement
- 3.5.4. Solutions asymptotiques pour la double diffusion

3.6. Modèle de la sublimation et de la condensation à la source et au puits. Conditions aux limites spécifiques et interprétations physiques

- 3.6.1. Introduction
- 3.6.2. Modèle analytique du flux interfacial
- 3.6.3. Modèle de Fick du flux pariétal
- 3.6.4. Paramètre de sublimation E et nombre de Péclet
- 3.6.5. Importance relative des flux interfacial et convectif selon E
- 3.6.6. Condition d'admissibilité sur la vitesse de sublimation pour un fluide de Boussinesq
- 3.6.7. Relation de correspondance entre le modèle analytique et le modèle de Fick

3.7. Détermination des vitesses de chaque espèce

Chapitre 4 : Méthode d'approximation numérique

4.1. Méthode spectrale Tau-Chebyshev. Systèmes d'équations différentielles

4.2. Traitement des conditions aux limites naturelles de type Dirichlet, Neumann et mixte

4.3. Traitements spécifiques en présence d'un flux débitant imposé

- 4.3.1. Modèle analytique
- 4.3.2. Modèle physique (loi de Fick)
- 4.3.3. Fonction de lissage

4.4. Détermination du nombre de degré de liberté efficace pour la simulation des couches limites caractéristiques

4.5. Algorithmes de résolution

- 4.5.1. Résolution de l'équation de Poisson (Direct Poisson Solver)
- 4.5.2. Évaluation des termes non linéaires (FFT)
- 4.5.3. Optimisation

4.6. Schémas temporels et méthode « False Transient »

- 4.6.1. Schéma d'Adams-Bashforth
- 4.6.2. Stabilité numérique et convergence
- 4.6.3. Conditions initiales et accélération de la convergence

4.7. Étude de la précision

- 4.7.1. Étude comparative de la précision avec les résultats d'une méthode aux différences finies hermitienne
- 4.7.2. Configurations d'états transitoires. Effets du nombre de degré de liberté

Chapitre 5 : Validité de l'approximation bidimensionnelle pour la convection dans le plan de symétrie d'un cylindre horizontal

5.1. Introduction

5.2. Théories asymptotiques

- 5.2.1. Vitesse horizontale au cœur de l'écoulement
- 5.2.2. Détermination de k_1
- 5.2.3. Vitesse verticale le long des parois verticales différentiellement chauffées (modèle 2D)

5.3. Méthodes numériques

5.4. Présentation des résultats. Étude comparative

- 5.4.1. Champ de vitesse dans le cœur de la cavité
- 5.4.2. Vitesse dans la région des parois verticales différentiellement chauffées
- 5.4.3. Épaisseur caractéristique de l'écoulement

5.5. Conclusions

Chapitre 6 : Étude des différents régimes hydrodynamiques avec ou sans gradients thermique et solutal, en présence d'un flux interfacial aux parois actives

6.1. Classement des régimes du fluide moyen et comportements hydrodynamiques des composants A et B

- 6.1.1. Introduction
- 6.1.2. Les conditions imposées au fluide moyen selon le choix de (E,F) d'une part ou (W_1, W_2) d'autre part
- 6.1.3. Lien entre le comportement du fluide moyen, la compressibilité des composants A et B, et le flux interfacial aux parois actives
- 6.1.4. Évaluation des ordres de grandeur de E et de F pour lesquelles il y a transition de régime
- 6.1.5. Récapitulation

6.2. *Fluide ne vérifiant pas l'hypothèse de Boussinesq*

6.3. *Diffusion et convection solutales pour un fluide de Boussinesq*

6.3.1. Introduction

6.3.2. Effets de E

6.4. *Diffusion solutale et convection thermique pour un fluide de Boussinesq (« Expansive Convection »)*

6.4.1. Introduction

6.4.2. Effets du flux interfacial

6.4.3. Effets de Ra_T

6.5. *Autres configurations*

Chapitre 7 : Conclusion

Annexe 1 : Parois terminales thermiquement conductrices

Annexe 2 : Parois terminales imperméables aux espèces chimiques

Annexe 3 : Calcul des nombres de Prandtl et de Lewis pour les mélanges gazeux binaires

Annexe 4 : Critère de compatibilité entre l'approximation de Boussinesq et la loi des gaz parfaits, appliqué à un fluide binaire contenu dans une enceinte différentiellement chauffée

Références

NOTATIONS

Variables et constantes :

a	rapport de forme (ch.5)
$a_{nm}, b_{nm}, c_{nm}, d_{nm}$	coefficients correspondant aux variables ζ, T, ψ, W dans la décomposition Tau-Chebyshev
b_n^\pm	défini en (4.2)
\bar{C}_p	chaleur massique à pression constante (ch. 3)
\bar{C}_i	concentration molaire de l'espèce i (ch. 3)
\bar{C}	concentration molaire totale (ch. 3)
C	constante définie en (3.5.2)
\hat{C}, \tilde{C}	coefficients définis en (4.3)
\bar{D}_{AB}	coefficient de diffusion de masse
E	taux de sublimation, introduit en (3.6.3)
$e_{nm}^{(10)}, e_{nm}^{(01)}, g_{nm}^{(10)}, g_{nm}^{(01)}, h_{nm}^{(10)}, h_{nm}^{(01)}$	coefficients correspondant aux termes non linéaires dans la décomposition Tau-Chebyshev (4.1)
F	paramètre de recentrage, $F = E \bar{W}_0 / (1 - \bar{W}_0)$ intervenant dans le calcul des vitesses de chaque espèce en (3.8)
\vec{g}	accélération de la pesanteur
\vec{h}	vecteur flux thermique (ch. 3)
H	demi-distance de la source au puits
\vec{j}_i, \vec{j}_i^*	vecteurs flux de masses de l'espèce i (ch. 3)
\bar{k}_0	coefficient de conductivité thermique (ch. 3)
k	constante définie en (3.5.2)
k_1	paramètre de gradient thermique (ch. 5)
L	demi-distance entre les parois non chauffées
ℓ	rapport de forme, $\ell = L/H$
Le	nombre de Lewis
m, \tilde{m}	paramètres définis en (3.5.2)
M, N	nombres de degrés de liberté dans les directions x, y de la décomposition Tau-Chebyshev (4.1)
$\bar{M}, \bar{M}_A, \bar{M}_B$	masses molaires moyenne, de A et de B
$M_c, \tilde{M}_c, N_c, \tilde{N}_c$	nombres de degrés de liberté, définis en (4.4)
\vec{n}	normale de surface (ch. 3)
\vec{n}_A, \vec{n}_B	flux de masse des espèces A et B
\vec{N}_i	flux molaire de l'espèce i (ch. 3)
Nu, \bar{Nu}	nombres de Nusselt local et moyen (ch. 3)
$\bar{p}, \bar{p}_A, \bar{p}_B$	pressions totale et partielles de A et B
Pe_M, Pe_M^*	nombres de Péclet solutaux, $= 2 H \hat{v}^* / \bar{D}_{AB}$
Pr	nombre de Prandtl, $= \bar{\mu}_0 \bar{C}_p / \bar{k}_0$
$\delta^2 Q$	quantité de chaleur par unité de surface et de temps (ch. 3)
$q_{th}, q_{cond}, q_{conv}$	quantité de chaleur totale, conductrice et convective (ch. 3)
Ra_T	nombre de Rayleigh thermique, $= \bar{\rho}_0^2 \beta (T_2 - T_1) g (2H)^3 Pr / \bar{\mu}_0^2$
Ra_M	nombre de Rayleigh solutal, $= \bar{\rho}_0 \alpha_A \Delta \bar{W} g (2H)^3 / \bar{\mu}_0 \bar{D}_{AB}$
Ra_{eq}	nombre de Rayleigh équivalent, $= Ra_T \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_m + \frac{1}{Le} Ra_M \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)_m$
Ra	nombre de Rayleigh défini au ch. 5

R_0	rayon de cylindre (ch. 5)
R_1, R_2	coefficients introduits en (4.2)
Sc	nombre de Schmidt, = $\bar{\mu}_0/\bar{\rho}_0\bar{D}_{AB}$
Sh, \bar{Sh}	nombres de Sherwood local et moyen (ch. 3)
S_1, S_2	coefficients introduits en (4.2)
t	temps
\bar{T}	température du fluide moyen
\bar{T}_0	température moyenne
$\Delta\bar{T}$	écart de température entre la source et le puits, = $\bar{T}_2 - \bar{T}_1$
$\Delta t_\zeta, \Delta t_T, \Delta t_W$	pas de temps définis en (4.6)
T_n, T_m	polynômes de Chebyshev d'ordre n et m (4.1)
T	température adimensionnée
Δt_c	pas de temps défini en (4.6)
\bar{u}, \bar{v}	composantes de la vitesse
u, v	composantes de la vitesse adimensionnée
\bar{v}^*	vitesse moyenne molaire (ch. 3)
v_d	paramètre de flux interfacial (3.6)
\hat{v}^*	vitesse caractéristique définie en (3.6.4)
\hat{v}	vitesse définie en (3.6.5)
\hat{v}^\pm	coefficient défini en (4.3)
\bar{x}, \bar{y}	coordonnées d'un point de la cavité
x, y	coordonnées adimensionnées d'un point de la cavité
x_i, y_i	points de collocation (4.4)
\bar{X}_i	fraction molaire de l'espèce i
\bar{W}_i	fraction massique de l'espèce i
\bar{W}_A, \bar{W}_B	fraction massique des espèces A et B
\bar{W}_0	fraction massique moyenne de l'agent de transport
W	fraction massique adimensionnée de l'agent de transport
$\Delta\bar{W}_A$	écart de fraction massique de l'agent de transport entre la source et le puits
w	composante axiale de la vitesse définie au ch. 5
z	position axiale d'un point du cylindre (ch. 5)
α, ρ	paramètres intervenant dans les théories asymptotiques (3.5.2)
α_A	coefficient d'expansion solutale défini par rapport à l'agent de transport
β	coefficient d'expansion thermique
δ	épaisseur de couche limite (3.5.2)
ε	paramètre défini en (4.3)
$\alpha(\varepsilon)$	fonction définie en (4.3)
$\hat{\alpha}_n^{1\pm}, \hat{\alpha}_n^\pm, \chi_{nm}, \lambda$	coefficients définis en (4.3)
φ_{AB}	terme intervenant dans l'expression du nombre de Péclet (3.6.4)
$\bar{\zeta}, \zeta$	rotationnel des vitesses, dimensionné et adimensionné
$\bar{\psi}, \psi$	fonction de courant, dimensionnée et adimensionnée
$\tilde{\psi}, \hat{\psi}$	fonctions de courant exprimées en (3.6)
$\bar{\chi}_0$	diffusivité thermique = $\bar{k}_0/\bar{\rho}_0\bar{C}_p$
$\bar{\mu}_0$	viscosité dynamique
$\bar{\nu}_0$	viscosité cinématique
$\bar{\rho}$	masse volumique du fluide moyen
$\bar{\rho}_0$	masse volumique moyenne

$\bar{\rho}_A, \bar{\rho}_B$	masses volumiques des espèces A et B
σ_A	coefficient de Soret (ch. 3)
Ω	inclinaison de la cavité par rapport à la pesanteur
∇	opérateur « nabra »

Indices supérieurs

2D, 3D	relatifs aux approximations 2D ou 3D (ch. 5)
(1,0), (0,1), (2,0), (0,2)	dérivées première et seconde par rapport à x et y dans la décomposition Tau-Chebyshev

Indices inférieurs

n, m	ordre des polynômes de Chebyshev (4.1)
m	relatif au milieu de la cavité
i, A, B	relatif aux espèces i, A ou B
0	relatif à la température moyenne
x, y	relatif aux directions x ou y
c	désigne les valeurs des paramètres correspondant aux transitions de régime
1, 2	relatif au puits et à la source

Chapitre 1

Introduction

Les besoins industriels et technologiques qui nécessitent l'élaboration de matières condensées très variées (matériaux solides ou liquides) ne sont plus à démontrer.

Les variétés de la matière condensée permettent de réaliser de plusieurs façons des composants petits, compacts et de bonne fiabilité. Nous citerons par exemple parmi les applications, les composants électroniques, les matériaux pour fibres optiques, les matériaux magnétiques, les supraconducteurs, les polymères, les matériaux amorphes...

Certaines techniques utilisées pour la matière condensée font intervenir des écoulements avec réactions physiques et chimiques : elles consistent à élaborer des cristaux à partir d'une phase fluide. Dans l'étude des phénomènes qui sont engendrés par ces techniques, deux points de vue différents entrent en relation : l'aspect macroscopique tel le comportement hydrodynamique à grande échelle, l'aspect microscopique telles les structures atomiques ou moléculaires des différentes phases.

En effet, la cinétique de croissance cristalline et les propriétés physico-chimiques des cristaux sont contrôlées par les phénomènes de transport dans la phase fluide où ont lieu les transferts de matière et de chaleur. Il est alors nécessaire de contrôler les températures et les concentrations à l'interface fluide-cristal qui déterminent le taux de croissance et la géométrie des cristaux.

Les propriétés interfaciales jouent un rôle plus critique dans la croissance en bain fondu ou en solution saturée. En effet, l'épaisseur de l'interface est un facteur moins négligeable qu'en phase vapeur, et met en jeu la nature des liaisons interatomiques.

La croissance cristalline en phase fluide, ou plus généralement, l'hydrodynamique physico-chimique, montre donc la nécessité d'une collaboration étroite entre le point de vue « mécanique » et le point de vue « physico-chimique ». Par « mécanique », nous signifions l'étude et l'évolution d'un système à partir de contraintes dont la nature phénoménologique n'est pas explicitée, cette évolution exprimant l'invariance d'une propriété du système. Par « physico-chimique », nous signifions l'étude de l'évolution et de la structure d'un système à partir d'éléments constitutifs réels ou supposés expliquer la réalité.

Une certaine partie de la mécanique aborde les problèmes de la physique avec un langage différent basé sur une description formaliste, mal adaptée pour analyser les processus par les interactions entre des structures spécifiques et identifiables. Cependant le point de vue mécanique est toujours d'un grand secours quand il s'agit de trouver les équations de la physique en exprimant l'invariance des correspondances entre les phénomènes, même si ceux-ci sont considérés sans leurs spécificités.

La mécanique des fluides intervient dans l'étude du mouvement hydrodynamique de la phase fluide en croissance cristalline. Cette discipline se place à l'interface du point de vue mécanique et du point de vue physique parce qu'il est impossible de dissocier les configurations du fluide des propriétés physiques de celui-ci. A fortiori dans les problèmes de croissance cristalline, ce découplage des points de vue ne peut conduire à aucune étude sérieuse des phénomènes. Les progrès réalisés dans l'étude et l'application de la convection naturelle, et depuis peu, dans celles des écoulements avec réactions chimiques et physiques, montrent que la séparation entre la physique et la mécanique des fluides est injustifiable.

L'association des points de vue de la mécanique des fluides et de la physico-chimie trouve maintenant un grand épanouissement dans l'hydrodynamique physico-chimique et présente en soi un intérêt pour la recherche. Une telle association présente en particulier l'intérêt de combiner des phénomènes déjà fort complexes, comme les transitions de phase et les processus cristallins, à des phénomènes de non-linéarité présents dans les transports en phase fluide. En effet, la non-linéarité des équations de Navier-Stokes entraîne une extrême variété des phénomènes. Les différents paramètres qui caractérisent la nature et les contraintes du fluide sont alors responsables d'une gamme de configurations que l'on peut spontanément réaliser. En retour, elles sont très sensibles aux contraintes imposées au fluide. Les passages d'une configuration à l'autre, ou « bifurcations », ont lieu lorsqu'une configuration devient instable, et recouvrent des domaines allant de l'instabilité linéaire à des comportements chaotiques (turbulence). L'étude de ces instabilités successives et des solutions limites ou asymptotiques de chaque palier de stabilité, fait l'objet de nombreux travaux et présente des intérêts variés : notamment une meilleure prévision des régimes hydrodynamiques d'un fluide soumis à des gradients thermiques, solutaux ou de pression, l'application aux techniques des installations avec échangeurs thermiques ou massiques, ou encore une meilleure compréhension des caractéristiques générales de l'évolution vers la turbulence présentes à la fois dans les transitions de phase et dans les fluides.

L'étude des phénomènes non linéaires est donc un domaine de synthèse de disciplines différentes. La hiérarchie des instabilités qu'elle fait apparaître reste encore à être interprétée.

Les équations qui régissent les phénomènes non linéaires n'admettent pas en général de solutions analytiques, quoique elles peuvent faire l'objet de théories asymptotiques. Leurs résolutions nécessitent des calculs numériques dont la réalisation a pu se systématiser grâce aux progrès de l'informatique et dont l'élaboration des méthodes est en soi une discipline. Les solutions obtenues par ces méthodes doivent garder leur rôle prévisionnel. C'est pourquoi la simulation numérique est en fait une expérimentation numérique qui permet de contrôler le système étudié à volonté en changeant ses paramètres jusque pour des valeurs qui poseraient encore des problèmes techniques pour l'expérience réelle. La comparaison avec des expériences réelles donnera un test de validité et de l'interprétation du formalisme. De plus, l'exploration numérique menée avec une analyse qualitative du phénomène permet de tester celle-ci lors de la confrontation des résultats numériques et expérimentaux. L'analyse qualitative est une étude et une interprétation des ordres de grandeur, des paramètres significatifs et des hypothèses directrices et spécifiques (l'hydrodynamique s'y prête d'ailleurs bien par suite des similitudes). Une simulation numérique doit alors toujours être menée avec l'appui de l'analyse qualitative (ou « étude théorique ») pour permettre une meilleure compréhension des phénomènes. Celle-ci est obtenue par la synthèse des idées qualitatives simples issues des différentes études numériques effectuées pour chacune d'elles et confirmées par les expériences correspondantes.

C'est en cela que l'expérimentation numérique, l'analyse qualitative (ou « étude théorique ») et l'expérience réelle sont indispensables et fortement complémentaires dans l'étude des phénomènes non linéaires et physico-chimiques de la croissance cristalline.

Dans ce mémoire, nous appliquons une méthode numérique de haute précision – spectrale Tau-Chebyshev – à l'expérience numérique des phénomènes de transport dans une ampoule de croissance cristalline en phase vapeur. Cette application est accompagnée d'une analyse qualitative des solutions asymptotiques de l'écoulement de la phase fluide, d'une part, et des modèles de réactions physiques aux interfaces, d'autre part. Ces analyses sont développées uniquement pour une configuration bidimensionnelle (cavité rectangulaire avec une dimension transversale infinie). En réalité, les expériences de croissance cristalline se déroulent dans des ampoules cylindriques où les écoulements sont fortement tridimensionnels.

Le mémoire s'organise alors ainsi :

- Au **chapitre 2**, nous situons le problème traité parmi les nombreuses techniques de croissance cristalline en phase fluide dont les principales sont présentées brièvement.

- La croissance cristalline se faisant en phase vapeur, sans réaction chimique, le modèle développé au **chapitre 3** ne tient pas compte des déformations de l'interface gaz-cristal. Il adopte de plus des hypothèses de linéarité dans les phénomènes de transport et de quasi-incompressibilité pour les fluides (loi de Fourier, loi de Fick, hypothèses de Boussinesq). Les réactions physiques à l'interface sont modélisées de deux façons : analytique et selon le modèle de Fick.

- Au **chapitre 4**, on décrit la méthode numérique utilisée pour la résolution des équations dans le cadre des hypothèses adoptées. Il s'agit de la méthode spectrale Tau-Chebyshev. Le schéma d'avancement vers la solution stationnaire est celui d'Adams-Bashforth.

- La comparaison entre le modèle 2D et le modèle 3D du tube cylindrique est effectuée au **chapitre 5**. Il est montré que les résultats du modèle 2D restent de façon satisfaisante comparables aux résultats expérimentaux du cylindre (Schiroky et Rosenberger, 1984). De plus les solutions asymptotiques sont en assez bon accord avec les résultats numériques et expérimentaux. De ce point de vue, la simulation 2D de la double diffusion en croissance cristalline n'est pas complètement irréaliste et peut donner une idée des ordres de grandeurs relatives des phénomènes qui s'y développent.

- Au **chapitre 6**, nous appliquons le modèle numérique et théorique à la prévision des changements de régime dans l'ampoule de croissance. Une analyse qualitative est développée pour prédire les valeurs de certains paramètres caractéristiques de l'écoulement pour lesquelles le régime diffusif domine le régime convectif.

Chapitre 2

Étude de la croissance cristalline en phase fluide. Expériences, modèles et simulations. Travaux antérieurs

2.1. Croissance cristalline en phase fluide

2.1.1. Généralités

L'obtention d'un monocristal à partir de son germe et d'une phase fluide fait intervenir des techniques de croissance diverses. Dans tous les cas, il s'agit de l'interaction du mouvement hydrodynamique et des phénomènes accompagnant les transitions de phase, avec ou sans réactions chimiques. Elle est étudiée, en même temps que les questions qu'elle soulève, dans l'ouvrage de référence de Rosenberger (1979). Les problèmes relevant de ce type de phénomène peuvent être regroupés sous la dénomination d'hydrodynamique physico-chimique (« Physico-Chemical Hydrodynamics »).

Le choix d'une technique de croissance est lié à la nature du cristal que l'on veut obtenir (semi-conducteur, alliage...), à son taux de pureté, à sa forme (fil mince, bâtonnet,...), et à ses caractéristiques physiques ou mécaniques (solidité, propriétés optiques, organisation des mailles cristallines,...).

Chaque type de méthode de croissance cristalline en phase fluide fait intervenir des phénomènes spécifiques dont certains aspects font encore l'objet de recherches fondamentales.

De nombreux travaux théoriques, numériques et expérimentaux ont été réalisés au sol, ou en micro-gravité.

Dans ce paragraphe, nous rappelons, de façon non exhaustive, les diverses méthodes de solidification en phase fluide ainsi que les travaux effectués pour leurs mises en œuvre, leur optimisation et la compréhension des phénomènes qu'elles engendrent.

2.1.2. Principaux types de croissance cristalline en phase fluide

On décrira successivement les techniques de croissance en phase liquide et en phase vapeur.

Ces deux techniques ont en commun que l'on procède à la croissance d'un monocristal à partir d'une phase fluide (liquide ou gazeuse) qui contient des substances capables de l'enrichir par réactions chimiques ou physiques, sous certaines conditions hydrodynamiques et thermo-chimiques. En général, les techniques de croissance en phase liquide permettent l'obtention de cristaux de grande taille qui nécessitent des flux de masse importants. La modélisation du problème doit, en général, tenir compte de la déformation du front au cours du temps. De plus, les critères de faisabilité du monocristal nécessitent la connaissance des conditions de stabilité de l'interface cristal-fluide, qui mettent en jeu des notions de point critique et de transitions du second ordre (Boccaro, 1976, Beysens, 1983).

2.1.3. Croissance cristalline en phase liquide (bain fondu)

De nombreuses techniques utilisent le fait qu'un germe cristallin peut être enrichi à partir de son bain fondu placé dans une ampoule fermée sous certaines configurations hydrodynamiques et

thermochimiques. Certaines d'entre elles utilisent la convection forcée du type Czochralski, où le mouvement du liquide interagit avec les conditions aux limites telles que des rotations imposées du germe monocristallin. D'autres utilisent le procédé de solidification dirigée (méthode Bridgman) : le front de solidification avance dans le bain fondu par suite d'un déplacement du gradient thermique à vitesse constante le long de l'axe de l'ampoule cylindrique. Des phénomènes complexes apparaissent dans le tube de croissance essentiellement au sein du bain fondu et dans la zone interfaciale. Nous en rappelons les principales caractéristiques.

Lorsqu'un cristal est obtenu à partir d'un mélange liquide à haute température, le champ thermique a un effet important sur la nature et les propriétés du cristal. Le champ thermique du mélange donne lieu à des gradients solutaux et à des tensions superficielles. Il engendre le mouvement du fluide qui apporte le processus de croissance. Pour la configuration Czochralski, on peut citer Pimputkar et Ostrach (1981) qui ont étudié comment le mouvement résultant du fluide est déterminant pour la stabilité du cristal, Camel et Favier (1982) qui ont développé une analyse en ordre de grandeurs des phénomènes de transport et ont identifié les conditions d'apparition des régimes de couche limite pour le transport du soluté. La configuration Bridgman a fait l'objet de nombreux travaux. Parmi eux, Fredriksson (1983) a étudié l'influence de la convection et de la composition sur la structure cristalline d'un alliage se solidifiant à partir de son bain fondu, à l'aide d'une solidification dirigée perpendiculairement ou parallèlement à la pesanteur. La morphologie et la stabilité de l'interface cristal-bain fondu ont été étudiées pour un Bridgman en situation verticale (Müller et Neumann, 1983) et en situation horizontale avec une analyse en ordre de grandeur (Favier et Camel, 1983). Sanfeld et al. (1983) ont montré l'influence de la convection due à la différence de densité à l'interface et due aux effets de Marangoni, sur la stabilité morphologique du front de solidification en microgravité.

Derby (1983) a analysé l'interaction entre la réaction monotectique dans les alliages et l'interface solide-liquide en microgravité. Avec une méthode aux éléments finis, Ettouney et Brown (1983) ont simulé la forme de l'interface solide-mélange en solidification dirigée. La stabilité d'un mélange liquide représentant le bain fondu, sous l'action de l'écoulement thermo-convectif, a été étudiée par Carruthers (1977).

Des configurations autres que celles de Bridgman et de Czochralski ont été également étudiées. Nous citerons parmi elles une méthode de croissance où le monocristal est un cylindre vertical entourant son bain fondu chauffé par un cylindre coaxial (Glicksman et al., 1983).

2.1.4. Croissance cristalline en phase vapeur

2.1.4.1. La croissance cristalline en phase vapeur consiste en l'enrichissement d'un germe monocristallin à partir d'un mélange gazeux, soumis à des mouvements hydrodynamiques et capable d'interagir chimiquement ou physiquement avec le germe. On peut distinguer quatre types de croissance cristalline en phase vapeur selon que, d'une part il y a réaction chimique ou réaction physique, ou que, d'autre part, ces réactions soient « réversibles » ou « irréversibles » (Rosenberger, 1980), c'est-à-dire en milieu fermé ou ouvert respectivement :

(a) *Transport physique en phase vapeur (« Physical Vapor Transport », PVT) :*

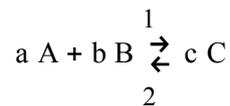
Il se déroule dans une ampoule fermée (milieu fermé) dont une extrémité contient une source polycristalline S chauffée à une température T_2 et l'autre extrémité contient le germe monocristallin A (puits), porté à une température $T_1 < T_2$. Dans le tube, un gaz non chimiquement réactif B (gaz inerte) est préalablement placé. Sous certaines conditions de température à la source et de pression, la source polycristalline S réagit physiquement en donnant lieu à une sublimation de l'espèce A qui va diffuser à travers B sans réagir chimiquement avec lui, pour aller se condenser sur le germe

monocristallin qu'il va ainsi enrichir (fig. 2.1.1.a). Sous l'action de la gravité, le fluide binaire A+B présente des mouvements de diffusion et de convection thermique ou solutale.

(b) **Transport chimique en phase vapeur (« Chemical Vapor Transport », CVT)** (fig. 2.1.1.b) :

Il se déroule également dans une ampoule fermée. La source est cette fois-ci un polycristal S capable de réagir par l'intermédiaire du composant A qu'il contient avec le gaz B pour donner un gaz C.

Le gaz réactif C dans le tube va réagir chimiquement sur le germe monocristallin A situé au puits en donnant le composé A sous forme cristalline et le gaz B, puisque la réaction est réversible :



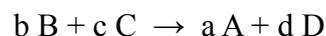
Le composé A formé au puits enrichit le monocristal tandis que le gaz B qui s'est formé va de nouveau réagir avec la source. Et ainsi de suite. Les gaz alors contre-diffusent (« back reaction ») comme le schématise la fig. 2.1.2. Comme la réaction est endothermique dans le sens 1, à de très hautes températures, elle est déplacée dans le sens 1, favorisant ainsi la formation de C et l'épuisement de B.

(c) **Dépôt physique en phase vapeur (« Physical Vapor Deposition », PVD)** :

La source polycristalline et le puits sont placés dans un tube ouvert parcouru par un courant du gaz porteur inerte B saturé (fig. 2.1.1.c) qui a pour effet de provoquer la sublimation de A à la source et sa condensation au puits où se trouve le germe. Le mélange A + B situé entre la source et le puits est non chimiquement réactif.

(d) **Dépôt chimique en phase vapeur (« Chemical Vapor Deposition », CVD)** (fig. 2.1.1.d)

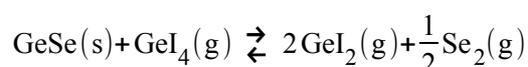
Le germe monocristallin est placé sur un substrat situé dans un tube ouvert parcouru par un courant d'un mélange gazeux réactif B + C. Le mélange B + C, en amont du substrat, est à une température T_1 inférieure à celle T_2 de la zone située en aval du substrat. Le gradient thermique siège au niveau du substrat. Avec l'augmentation de la température dans cette zone, les composés B + C vont réagir pour donner le composé solide qui se dépose sur le substrat, et un gaz D entraîné à l'aval du substrat :



La croissance cristalline du type CVD est plus adaptée pour la construction de films cristallins.

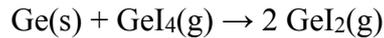
De nombreux travaux sur la croissance cristalline en phase vapeur ont été effectués notamment dans les domaines PVT, CVT et PVD.

2.1.4.2. **Un processus typiquement CVT**, comme la croissance des cristaux GeSe dans un milieu d'iode, a été étudié (Wiedemeier et Irene, 1972, Wiedemeier et Irene, 1973, Wiedemeier et Sigai, 1969, Wiedemeier et al., 1974, Wiedemeier et al., 1975) :



L'effet de la convection au milieu de la cavité sur le CVT a fait l'objet d'études variées (Solan et Ostrach, 1979, Launay, 1982,...). On peut mentionner Launay et Roux (1982) pour le transport du

germanium par GeI_4 et GeI_2 :



dans un four trois zones (source, cristal, puits), qui permet le contrôle de la vitesse de transfert et de la nucléation par un choix judicieux des températures T_s , T_c , T_p à la source, au cristal et au puits. C'est en effet le contrôle de la sursaturation qui conditionne l'hydrodynamique et le taux de dépôt.

Dans les processus CVT, la cinétique des surfaces a une grande importance sur le taux de croissance : Mercier (1982) en a rendu compte en minimisant l'énergie libre interfaciale. Zappoli (1984) propose un nouveau modèle unidimensionnel de la cinétique interfaciale en donnant une relation entre la vitesse interfaciale et la température à la source.

L'effet Soret et le contrôle de la mononucléation ont été étudiés par Brisson (1983) pour HgI_2 et $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$.

2.1.4.3. **Comme processus PVD**, nous mentionnerons l'article de Markham et Rosenberger (1980) où l'on traite le cas d'un tube de Stefan vertical chauffé par le bas.

2.1.4.4. **La croissance cristalline en processus PVT** présente des configurations variées : il peut s'agir d'une part de diffusions-convections à travers un gaz inerte ou bien en présence d'impuretés, et d'autre part de diffusion pure, de diffusion-convection thermique, de diffusion-convection solutale, ou encore de thermo-diffusion (effet Soret). De plus, il existe des configurations horizontales ou verticales.

La diffusion-convection de l'espèce A à travers un gaz inerte B préalablement placé dans l'ampoule a lieu lorsque l'espèce A vérifie les proportions stœchiométriques (« Congruent Vapor Transport »). Si le gaz A sublimé à la source traverse un tube ne contenant pas d'autre gaz que A issu de la phase vapeur en équilibre avec le germe, alors il peut y avoir présence d'impuretés provenant des parois ou d'une modification stœchiométrique de la quantité de A évaporé à travers la cavité. Dans ce cas, le gaz dans le tube est un mélange binaire A + B avec $p_B \ll p_A$. Ces deux cas ont été étudiés numériquement par Greenwell et al (1981) pour une configuration horizontale.

Dans le cas où les masses molaires M_A et M_B de A et de B sont égales, la convection résulte du gradient thermique seul (« expansive convection »). Dans le cas où elles sont différentes, la convection solutale (due au gradient solutal) et la convection thermique ont des effets opposés sur l'orientation du mouvement du fluide (diffusion et convection solutale et thermique). Si les effets de gradient thermique sont négligeables devant ceux du gradient solutal, alors celui-ci engendre seul les mouvements convectifs (diffusion et convection solutale).

Ces trois types de transport ont été étudiés : Markham et al. (1981) ont simulé les cas $M_A > M_B$ et $M_A = M_B$ en présence d'un gradient vertical ; Jhaveri et al. (1981) ont calculé numériquement la diffusion-convection solutale en tenant compte du flux interfacial de sublimation à la source, en situation horizontale ; la configuration « expansive » en présence du flux interfacial a été également numériquement analysée (Jhaveri et Rosenberger, 1982).

2.1.5. Effet Soret

L'effet Soret que nous avons mentionné, a été étudié indépendamment des processus de croissance et principalement dans le cas de gradients verticaux pour l'étude des instabilités thermo-convectives d'un gaz binaire. Olson et Rosenberger (1979) ont étudié la stabilité des mélanges non réactifs ($\text{Xe} : \text{He}$, $\text{SiCl}_4 : \text{H}_2$) ; nous pouvons mentionner aussi Abernathy et Rosenberger (1981), Platten et

Chavepeyer (1975) qui ont étudié le problème de Bénard pour un mélange binaire, Henry et Roux (1983) qui ont étudié les conditions de stabilité du mélange AgI – KI.

2.1.6. Résumé des principaux procédés de croissance cristalline en phase fluide et situation de ce travail

On peut résumer les principaux procédés de croissance cristalline en phase fluide que nous avons cités, dans le tableau (2.1.1). Dans ce mémoire, c'est la configuration PVT qui est analysée sous ses quatre aspects principaux.

Configurations		Géométrie et gravité	Caractéristiques des principaux effets	
Phase liquide (bain fondu)	Bridgman (solidification dirigée)	Verticale Horizontale Gravité Microgravité	Couche limite à l'interface, tensions superficielles, effets Marangoni, convection	
	Czochralski (convection forcée)	Verticale Axisymétrique Gravité Microgravité	Couche limite à l'interface, tensions superficielles, effets Marangoni, convection forcée	
	Autres configurations			
Phase vapeur	PVT	Diffusion pure	Horizontale Verticale (micro)gravité	Effet du flux interfacial, impuretés ou « congruent »
		Diffusion convective solutale	Horizontale Verticale (micro)gravité	Effet du flux interfacial, convection, impuretés ou « congruent »
		Diffusion convective thermique	Horizontale Verticale (micro)gravité	Effet du flux interfacial, convection, impuretés ou « congruent »
		Diffusion convective thermique solutale	Horizontale Verticale (micro)gravité	Effet du flux interfacial, convection, effet Soret
	CVT		Verticale Horizontale (micro)gravité	Effet Soret, convection, cinétique interfaciale
	PVD		Horizontale Verticale Tube de Stefan	Convection forcée, convection naturelle
	CVD		Horizontale Verticale	Cinétique interfaciale, convection forcée, convection naturelle

Tableau 2.1.1. Résumé des principaux types de croissance

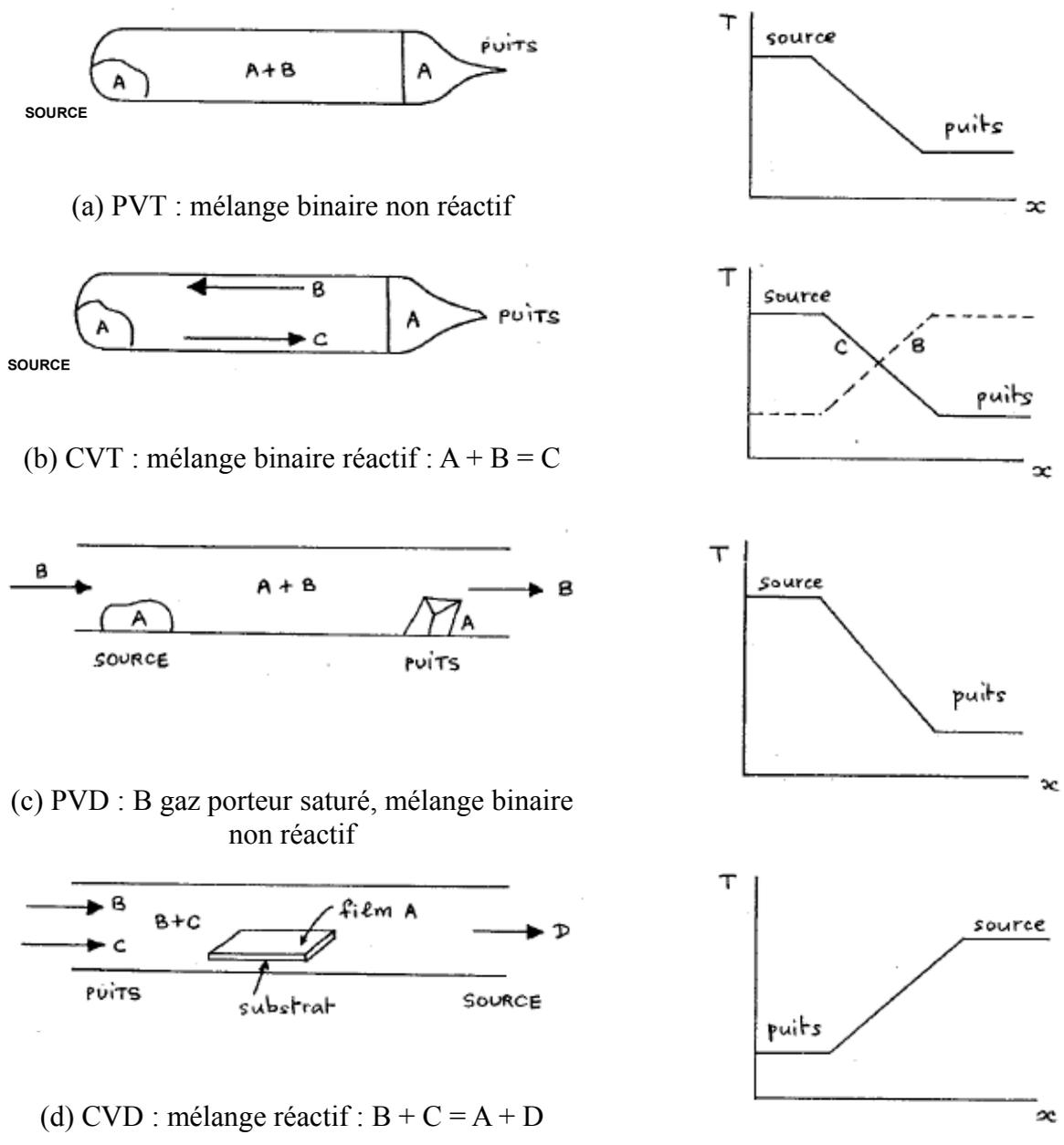


Fig. 2.1.1. Types de croissance en phase vapeur (d'après Rosenberger, 1980)

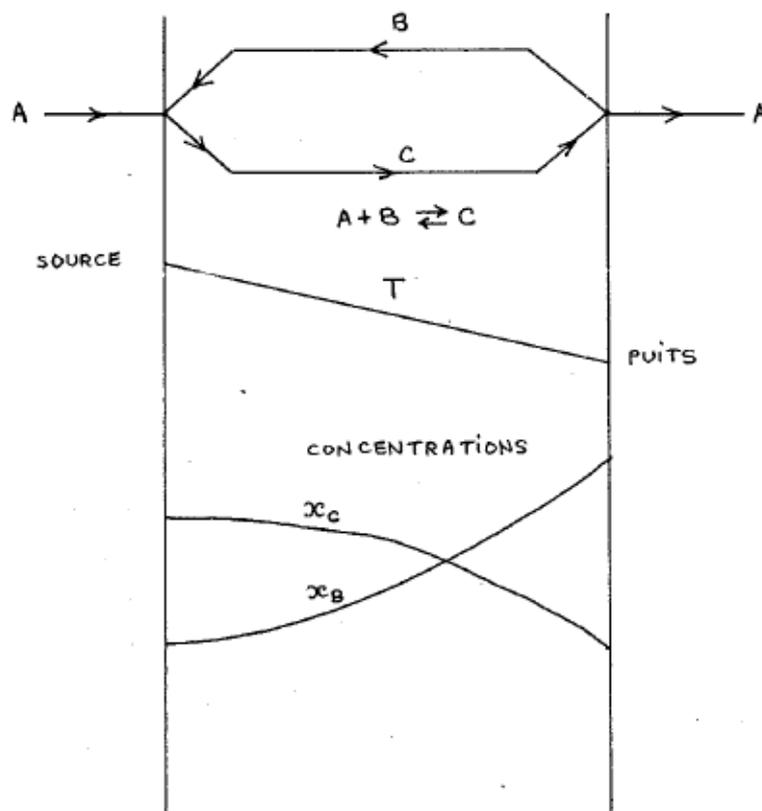


fig. 2.1.2. Contre-diffusion des gaz réactifs en CVT

2.2. Convection naturelle dans les ampoules : modèles cylindriques et 2D

La convection naturelle dans les cavités rectangulaires allongées et des cylindres avec des parois différentiellement chauffées, a fait l'objet d'études expérimentales, analytiques et numériques par beaucoup d'auteurs.

Une grande partie de cet intérêt est due à l'importance de ces configurations convectives dans la croissance cristalline en phase vapeur ou liquide, comme nous l'avons vu au § 2.1. (Klosse et Ullersma, 1973, Carruthers, 1977, Solan et Ostrach, 1979, Pimputkar et Ostrach, 1981). Des solutions analytiques pour des cavités rectangulaires allongées, basées sur l'approximation d'un écoulement parallèle, ont été proposées en premier par Birikh (1966), Hart (1972) et Klosse et Ullersma (1973). L'interaction entre la convection naturelle et une diffusion forcée (flux interfacial) à travers des cavités 2D ou cylindriques a été étudiée numériquement (Markham et al., 1981, Jhaveri et al., 1981, Jhaveri et Rosenberger, 1982, Markham et Rosenberger, 1984). Les plus récents travaux sur la convection libre dans des cavités fermées allongées sont dus à Tien, Bejan, Imberger, Cormack et al. (Cormack et al., 1974 A et B, Imberger, 1974, Bejan et Tien, 1978 A et B, Kimura et Bejan, 1980, Bejan et al., 1981, Shih, 1981, Shiralkar et Tien, 1981, Shiralkar et al., 1981), Ostrach et al. (Kumar et Ostrach, 1977, Ostrach et al., 1980) et Hart (1983).

La théorie de l'écoulement central (« core flow ») a été étendue à des nombres de Rayleigh plus élevés avec des modèles simplifiés pour l'écoulement près des parois terminales des cavités 2D (Tichy et Gadgil, 1982), et des cylindres (Schiroky et Rosenberger, 1984). Les expériences sur les

cavités rectangulaires (Simpkins et Dudderar, 1981) et les cylindres horizontaux (Schiroky et Rosenberger, 1984) ont démontré l'applicabilité de la théorie de Gill établie pour des écoulements libres près des parois verticales infinies (Gill, 1966) aux régions terminales en géométrie confinée.

Des études faites par anémométrie laser Doppler (Schiroky et Rosenberger, 1984) ont montré qu'en régime dominé par l'écoulement de cœur et en régime dominé par l'écoulement de couche limite, l'écoulement est fortement tridimensionnel, contrairement à l'écoulement dans les cavités rectangulaires (Bejan et al., 1981, Ostrach et al., 1980).

De nombreux travaux numériques en situation 2D se sont proposés de prédire la transition entre les deux types de régime (Cormack et al., 1974, Shiralkar et Tien, 1981, Shiralkar et al., 1981, Wirtz et Tseng, 1980, Lee et Sernas, 1980, Launay et Roux, 1982).

Un bon accord entre l'écoulement observé expérimentalement dans un cylindre (Schiroky et Rosenberger, 1984) et les résultats obtenus par une simulation numérique 3D (Smutek et al, 1984) a été montré.

Chapitre 3

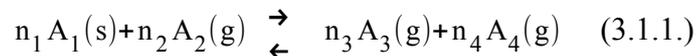
Modélisation mathématique du problème de double diffusion

3.1. Introduction

3.1.1. Le modèle physique est un tube fermé contenant un mélange de gaz et soumis à un gradient thermique (fig. 3.1.1.). ce tube est le siège de phénomènes de double-diffusion en phase vapeur. La croissance cristalline par transport en phase vapeur peut être obtenue suivant l'une des trois techniques suivantes (Greenwell, 1980) :

(i) Le transport physique en phase vapeur (PVT) qui est un processus de sublimation directe à partir d'une source chauffée, suivie d'une recondensation à une interface plus froide (puits).

(ii) Le transport chimique en phase vapeur (CVT) dans lequel la sublimation à la source est obtenue selon une réaction de la forme (sublimation indirecte) :



dans des conditions thermodynamiques et cinétiques telles que l'on ait la variation d'énergie libre G négative :

$$\Delta G = \Delta G^0 + R \bar{T} \ln \left(\frac{\bar{p}_3^{n_3} \bar{p}_4^{n_4}}{\bar{p}_2^{n_2}} \right) \quad (3.1.2.)$$

ΔG^0 étant l'énergie libre standard, \bar{T} la température absolue à l'interface de la source, \bar{p}_i les pressions partielles des constituants A_i , R la constante des gaz parfaits, n_i le nombre de moles de la composante i .

(iii) Le dépôt chimique en phase vapeur (CVD), dans lequel les réactions chimiques sont produites sur des substrats chauffés de façon sélective.

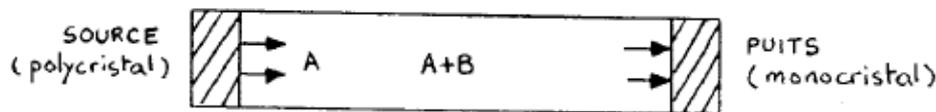


Fig. 3.1.1.
modèle de l'ampoule de croissance

3.2.1. **La modélisation mathématique** des mouvements hydrodynamiques concerne le transport chimique, ou physique, en phase vapeur : elle considère les conditions aux limites dans les zones interfaciales, en décrivant le processus de sublimation et en représentant le phénomène de diffusion du gaz produit par la réaction (agent de transport) dans un gaz inerte.

Afin de faciliter le contrôle des paramètres et la sublimation indirecte, la source solide et le puits devront vérifier les conditions suivantes :

- être une phase solide stable aux températures et pressions partielles imposées ;
- la source solide est supposée présenter une interface plane et stationnaire, et non être mobile

(Nikitin et al., 1980) et avoir une forme géométrique régulière (Ettouney et Brown, 1983).

Le modèle développé dans ce mémoire concerne l'ensemble d'un gaz réactif et d'un gaz neutre (le gaz actif correspondant à la composante qui se sublime à la source et qui se recondense au puits). Des modèles prenant en compte une interface mobile, ou de forme géométrique non régulière, ont été considérés respectivement par Nikitin et al. (1980) et Ettouney et Brown (1983) (milieu liquide).

3.2. Définition des grandeurs dans le phénomène de la double-diffusion

Lorsqu'un gaz constitué de plusieurs espèces chimiques est différentiellement chauffé dans une cavité fermée, les transferts de chaleur, de masse et de quantité de mouvement sont liés aux gradients de température et, dans le cas où les espèces ont des masses molaires différentes, aux gradients de concentration des espèces.

Suivant les contraintes thermiques, les conditions aux limites et la géométrie du problème, les mouvements du fluide proviennent des effets suivants dont les importances relatives sont variables : conduction thermique pure, diffusion massique, effets hydrodynamiques (viscosité, convection naturelle).

3.2.1. **Dans la conduction thermique pure**, le transfert de chaleur est assuré par le mouvement des molécules du gaz. La quantité de chaleur $\delta^2 Q$, qui traverse une surface dS , de normale \vec{n} , pendant une durée dt , s'écrit :

$$\delta^2 Q = \vec{h} \cdot \vec{n} dS dt \quad (3.2.1.)$$

définissant ainsi un vecteur \vec{h} dont le produit scalaire avec la normale \vec{n} à la surface dS représente le flux de chaleur conductif :

$$q_{\text{cond}} = \vec{h} \cdot \vec{n} \quad (3.2.2.)$$

Lorsque les gradients thermiques sont faibles, on peut faire l'hypothèse de linéarité

$$\vec{h} = -\bar{k}_0 \text{grad } \bar{T} \quad (3.2.3.)$$

appelée **loi de Fourier** et définissant un tenseur de conductivité thermique qui se réduit à un scalaire \bar{k}_0 pour un milieu isotrope.

3.2.2. **La convection naturelle** apparaît, dans un tube contenant un gaz soumis à un gradient thermique horizontal, par suite de la non uniformité de la densité $\bar{\rho}$ qui est une fonction décroissante de la température \bar{T} , les différences de densité qui en résultent, provoquant alors des mouvements sous l'effet de la poussée d'Archimède.

Contrairement à la conduction thermique pure où le fluide est au repos, la convection naturelle est un effet macroscopique lié à un mouvement d'ensemble du fluide.

La quantité de chaleur qui traverse une surface dS pendant une durée dt , s'écrit :

$$\delta^2 Q = \vec{\varphi} \cdot \vec{n} dS dt \quad (3.2.4.)$$

définissant un vecteur $\vec{\varphi}$ dont le produit scalaire avec la normale \vec{n} à la surface, représente le flux de chaleur convectif :

$$q_{\text{conv}} = \vec{\varphi} \cdot \vec{n} \quad (3.2.5.)$$

Comme :

$$\delta^2 Q = \bar{C}_p \delta m (T - T_0) \quad (3.2.6.)$$

où \bar{C}_p est la capacité calorifique à pression constante et δm la masse traversant la surface à la vitesse moyenne \bar{v} , on a :

$$\bar{C}_p \delta m (\bar{T} - \bar{T}_0) = \bar{\rho} \bar{C}_p dS (\bar{v} \cdot \bar{n}) dt (\bar{T} - \bar{T}_0) = \bar{\varphi} \cdot \bar{n} dS dt$$

donc :

$$q_{\text{conv}} = \bar{\rho} \bar{C}_p (\bar{T} - \bar{T}_0) \bar{v} \quad (3.2.7.)$$

Généralement, le transfert de chaleur est effectué à la fois par conduction thermique pure et par convection naturelle. Le flux thermique résultant est donc la somme des flux conductifs et des flux convectifs :

$$q_{\text{th}} = q_{\text{cond}} + q_{\text{conv}} \quad (3.2.8.)$$

Pour évaluer l'importance relative de chacune des contributions locales de ces deux flux, on introduit le **nombre de Nusselt** qui représente le rapport du flux thermique total local au flux conductif moyen global défini sur une longueur de référence L et un écart caractéristique de température $\Delta \bar{T}$ (Koutsoheras, 1976)

$$\text{Nu} = \frac{q_{\text{th}}}{\bar{k}_0 \frac{\Delta \bar{T}}{L}} = \frac{q_{\text{cond}} + q_{\text{conv}}}{\bar{k}_0 \frac{\Delta \bar{T}}{L}} = \frac{(\bar{T} - \bar{T}_0) \bar{v} - \bar{\chi}_0 \frac{\partial \bar{T}}{\partial n}}{\bar{\chi}_0 \frac{\Delta \bar{T}}{L}} \quad (3.2.9.)$$

avec $\bar{\chi}_0 = \bar{k}_0 / \bar{\rho} \bar{C}_p$.

Dans l'hypothèse d'un écoulement bidimensionnel, le nombre de Nusselt est une fonction des variables d'espace \bar{x} et \bar{y} . On définit des nombres de Nusselt moyens respectivement dans l'une des deux directions, par exemple :

$$\bar{\text{Nu}}(\bar{y}) = \frac{1}{L} \int_0^L \text{Nu}(\bar{x}, \bar{y}) d\bar{x} \quad (3.2.10.)$$

Ils évaluent l'importance relative des deux modes de flux thermiques.

3.2.3. Concernant la **diffusion massique**, quelques définitions sont rappelées :

Pour une espèce chimique quelconque, indiquée par i , la masse traversant la surface dS pendant le temps dt est :

$$\delta^2 m_i = \bar{\rho}_i dS (\bar{v}_i \cdot \bar{n}) dt \quad (3.2.11)$$

où $\bar{\rho}_i$ est la masse volumique de l'espèce, et \bar{v}_i la vitesse absolue avec laquelle l'espèce i traverse la surface.

Pour toute la surface S , la masse δm_i qui est passée pendant le temps dt est :

$$\delta m_i = dt \iint_S \bar{\rho}_i (\bar{v}_i \cdot \bar{n}) dS$$

définissant ainsi le **débit massique** D_{mi} qui est le flux du vecteur quantité de mouvement volumique :

$$\bar{n}_i = \bar{\rho}_i \bar{v}_i \quad (3.2.12)$$

à travers la surface totale S :

$$D_{mi} = \iint_S \vec{n}_i \cdot \vec{n} dS$$

Or, le transport de l'espèce i résulte de la contribution du transport de masse dû au mouvement global du fluide, caractérisé par le vecteur $\bar{\rho}_i \vec{v}$, \vec{v} étant la vitesse moyenne des espèces qui constituent le fluide, et du transport de masse dû au mouvement relatif de l'espèce i par rapport au mouvement d'ensemble, et caractérisé par le vecteur $\vec{j}_i = \bar{\rho}_i (\vec{v}_i - \vec{v})$ représentant le terme de diffusion.

On exprime alors \vec{n}_i sous la forme :

$$\vec{n}_i = \bar{\rho}_i \vec{v} + \vec{j}_i \quad (3.2.13)$$

Comme, en général, les vitesses moyennes de chacune des espèces sont différentes, pour définir une vitesse macroscopique du fluide total, on peut utiliser différents procédés de pondération. Ainsi, lorsque l'on s'intéresse au vecteur flux de masse des espèces i , \vec{n}_i , la vitesse moyenne utilisée est la **vitesse moyenne de masse** :

$$\vec{v} = \sum_i \bar{\rho}_i \vec{v}_i / \sum_i \bar{\rho}_i \quad (\text{avec } \bar{\rho} = \sum_i \bar{\rho}_i) \quad (3.2.14)$$

et lorsque l'on s'intéresse au vecteur flux molaire de i , \vec{N}_i défini comme pour \vec{n}_i par :

$$\vec{N}_i = \bar{C}_i \vec{v}_i \quad (3.2.15)$$

où \bar{C}_i est la concentration molaire de i ($\bar{C}_i = \bar{\rho}_i / M_i$, M_i masse molaire de i), la vitesse moyenne utilisée est la **vitesse moyenne molaire** :

$$\vec{v}^* = \sum_i \bar{C}_i \vec{v}_i / \sum_i \bar{C}_i \quad (3.2.16)$$

Pour \vec{N}_i la décomposition est alors la suivante :

$$\vec{N}_i = \bar{C}_i \vec{v}^* + \bar{C}_i (\vec{v}_i - \vec{v}^*) = \bar{C}_i \vec{v} + \vec{j}_i^* \quad (3.2.17)$$

où $\vec{j}_i^* = \bar{C}_i (\vec{v}_i - \vec{v}^*)$ représente, de façon similaire à \vec{j}_i , le flux de diffusion molaire de l'espèce i .

Si le fluide est homogène, les termes de diffusion s'annulent et les flux se ramènent uniquement aux flux convectifs $\bar{\rho} \vec{v}$ ou $\bar{C} \vec{v}^*$ respectivement.

Utilisant les définitions suivantes valables pour un gaz parfait :

$$\bar{C} = \sum_i \bar{C}_i \quad \text{concentration totale du fluide ;}$$

$$\bar{W}_i = \bar{\rho}_i / \bar{\rho} \quad \text{fraction massique de l'espèce } i \quad (\sum_i \bar{W}_i = 1) ;$$

$$\bar{X}_i = \bar{C}_i / \bar{C} \quad \text{fraction molaire de l'espèce } i \quad (\sum_i \bar{X}_i = 1) ,$$

les relations définissant les vitesses moyennes s'écrivent :

$$\vec{v} = \sum_i \bar{W}_i \vec{v}_i \quad \text{et} \quad \vec{v}^* = \sum_i \bar{X}_i \vec{v}_i \quad (3.2.18)$$

On remarque, d'autre part, que pour n espèces, $n-1$ flux diffusifs sont indépendants :

$$\sum_i \vec{j}_i = 0 \quad \text{ou} \quad \sum_i \vec{j}_i^* = 0$$

Dans le cas d'un mélange binaire A et B (double diffusion), on a donc :

$$\vec{j}_A = -\vec{j}_B \quad ; \quad \vec{j}_A^* = -\vec{j}_B^* \quad ; \quad \bar{C}_A + \bar{C}_B = \bar{C} \quad ; \quad \bar{\rho}_A + \bar{\rho}_B = \bar{\rho} \quad ; \quad \bar{X}_A = 1 - \bar{X}_B \quad ; \quad \bar{W}_A = 1 - \bar{W}_B \quad .$$

Le flux molaire total est donc :

$$\vec{N} = \vec{N}_A + \vec{N}_B = (\bar{C}_A + \bar{C}_B) \vec{v} + \vec{j}_A^* + \vec{j}_B^* = \bar{C} \vec{v}^* \quad (3.2.19)$$

tandis que le flux de masse total s'exprime par :

$$\vec{n} = \vec{n}_A + \vec{n}_B = (\bar{\rho}_A + \bar{\rho}_B) \vec{v} + \vec{j}_A + \vec{j}_B = \bar{\rho} \vec{v} \quad (3.2.20)$$

Dans le cas où les gradients de concentration sont faibles, on peut faire l'hypothèse de linéarité, appelée *loi de Fick* :

$$\vec{j}_A = -\bar{D}_{AB} \text{grad} \bar{\rho}_A \quad (3.2.21)$$

définissant ainsi un coefficient de diffusion des espèces \bar{D}_{AB} . Si le gaz binaire est incompressible, la loi de Fick s'écrit encore :

$$\vec{j}_A = -\bar{\rho} \bar{D}_{AB} \text{grad} \bar{W}_A \quad (3.2.22)$$

Comme il intervient des gradients de température et des gradients de concentration simultanément, les transferts de masse sont également liés aux gradients thermiques : au transport de masse par diffusion massique s'ajoute un transport de masse dû aux gradients thermiques (diffusion thermique) : c'est *l'effet Soret*. Le *flux de diffusion thermique* $\vec{j}_A^{(\tau)}$ a l'expression suivante, dans le cas de densités faibles et de gradients thermiques faibles :

$$\vec{j}_A^{(\tau)} = -\bar{\rho} \bar{D}_{AB} \sigma_A \text{grad} \bar{T}$$

où σ_A est le coefficient de Soret de l'espèce A. Dans l'hypothèse, adoptée ici, de pressions suffisamment faibles dans la cavité fermée qui contient le gaz, l'effet Soret peut être négligé.

Le transfert de masse, de l'espèce A par exemple, est décrit par la somme d'un terme convectif $\bar{\rho}_A \vec{v}$ et d'un terme diffusif \vec{j}_A qui exclut, ici, l'effet Soret :

$$\vec{n}_A = \bar{\rho}_A \vec{v} - \bar{\rho} \bar{D}_{AB} \text{grad} \bar{W}_A \quad (3.2.23)$$

Afin d'évaluer les contributions relatives des flux convectifs et des flux diffusifs dans le transfert de masse, on définit, comme pour le nombre de Nusselt, un nombre qui représente le rapport des flux de masse, convectifs et diffusifs, au flux diffusif global de masse. C'est le *nombre de Sherwood* :

$$\text{Sh} = (\bar{W}_A \bar{v} - \bar{D}_{AB} \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{y}}) / \bar{D}_{AB} \frac{\Delta \bar{W}_{AB}}{L} \quad (3.2.24)$$

où $\Delta \bar{W}_A$ est un écart de fraction massique caractéristique et L une longueur de référence. Comme pour le nombre de Nusselt, on définit les nombres de Sherwood moyens selon une direction :

$$\overline{Sh}(\bar{y}) = \frac{1}{L} \int_0^L Sh(\bar{x}, \bar{y}) d\bar{x} \quad (3.2.25)$$

3.2.4. En **résumé**, nous nous plaçons dans l'hypothèse de conditions proches de l'équilibre (gradients thermiques et solutaux faibles), ce qui nous permet d'utiliser des relations linéaires entre les flux diffusifs et les gradients. La même remarque concerne aussi les transferts de quantité de mouvement exprimés par une relation linéaire entre le tenseur des contraintes et le gradient des quantités de mouvements volumiques (loi de Newton), le coefficient étant la viscosité cinématique $\bar{\nu}_0$ qui a les mêmes dimensions $[L^2T^{-1}]$ que les coefficients de diffusion \bar{D}_{AB} et \bar{k}_0 . Si les gradients thermique et massique interviennent ensemble, les flux diffusifs contiennent des termes représentant, pour l'une des quantités transportées, l'action du gradient de l'autre quantité transportée (effet Soret pour le transfert de masse dû au gradient thermique, et **effet Dufour**, réciproque du précédent, pour le transfert de chaleur dû au gradient solutal). D'où le tableau :

Gradients	Flux	Transfert de moment : tension τ_{yx}	Transfert diffusif de masse : flux diffusif de masse j_A^*	Transfert conductif de chaleur : flux conductif de chaleur : h
Gradient de la quantité de mouvement $\bar{\rho} \bar{v}_x$		Loi de Newton : $-\bar{\nu}_0 \frac{\partial(\bar{\rho} \bar{v}_x)}{\partial \bar{y}}$		
Gradient de la fraction massique \bar{W}_A			Loi de Fick : $-\bar{\rho} \bar{D}_{AB} \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{y}}$	Effet Dufour (*) : $-\bar{\rho} \bar{k}_0 \sigma_A^T \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{y}}$
Gradient de la température \bar{T}			Effet Soret : $-\bar{D}_{AB} \sigma_A \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{y}}$	Loi de Fourier : $-\bar{k}_0 \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{y}}$

(*) σ_A^T est le coefficient de Dufour

Tableau 3.2.1. Relations linéaires entre les flux et les gradients des grandeurs de transport

3.3. Hypothèses de base pour un gaz binaire

3.3.1. Les hypothèses de base sont admises :

(i) Le fluide est supposé être un **gaz parfait**. Soit $\bar{\rho}$ la masse volumique totale, \bar{p} la pression totale, \bar{M} la masse molaire totale et R la constante molaire des gaz parfaits ; le gaz vérifie la **relation de Boyle-Mariotte** :

$$\bar{p} = \bar{\rho} \frac{R \bar{T}}{\bar{M}} \quad (3.3.1)$$

(ii) Les paramètres de transport : la viscosité $\bar{\mu}$, la conductivité thermique \bar{k} , la diffusivité \bar{D}_{AB} , sont supposés constants et calculés à une température moyenne \bar{T}_0 .

(iii) La dissipation visqueuse de Rayleigh est supposée négligeable dans l'équation de l'énergie.

(iv) Le fluide est supposé incompressible et l'écoulement bidimensionnel : si \bar{u} et \bar{v} sont les

composantes du vecteur vitesse moyenne \vec{v} sans la direction \bar{x} et la direction \bar{y} , on a :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} = 0 \quad (3.3.2)$$

(v) Les effets de pression sont négligeables.

(vi) Les gradients de température et de fraction massique sont admis suffisamment faibles pour utiliser les hypothèses de linéarité pour les flux :

$$\vec{h} = -\bar{k}_0 \text{grad } \bar{T} \quad (\text{loi de Fourier}) \quad (3.3.3)$$

$$\vec{j}_A = -\bar{\rho} \bar{D}_{AB} \text{grad } \bar{W}_A \quad (\text{loi de Fick}) \quad (3.3.4)$$

(vii) Les effets Soret et Dufour sont négligés.

(viii) Les régimes d'écoulement considérés sont stationnaires.

(ix) **Hypothèse de quasi-compressibilité (gaz de Boussinesq)** :

3.3.2. Chaque composant A ou B du gaz étant supposé être un gaz parfait, on a les relations :

$$\frac{\bar{p}_A}{\bar{\rho}_A} = \frac{R}{\bar{M}_A} \bar{T} \quad \text{et} \quad \frac{\bar{p}_B}{\bar{\rho}_B} = \frac{R}{\bar{M}_B} \bar{T} \quad (3.3.5)$$

où l'on a supposé que A et B sont en équilibre thermique ($\bar{T}_A = \bar{T}_B = \bar{T}$) et où \bar{M}_A et \bar{M}_B désignent les masses molaires de A et de B respectivement. R est la constante des gaz parfaits, de valeur :

$$R = 8,31434 \cdot 10^3 \text{ J k mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

Les grandeurs \bar{T} , \bar{M}_A et \bar{M}_B sont des grandeurs thermodynamiques intensives tandis que les pressions \bar{p}_A et \bar{p}_B sont des grandeurs extensives : la pression totale \bar{p} est donc la somme des pressions partielles \bar{p}_A et \bar{p}_B :

$$\bar{p} = \bar{p}_A + \bar{p}_B \quad (3.3.6)$$

Comme dans l'équation des gaz parfaits, la masse volumique est proportionnelle à une grandeur extensive (la pression) par l'intermédiaire de grandeurs intensives, elle est, elle-même, une grandeur extensive : donc la masse volumique totale $\bar{\rho}$ est la somme des masses volumiques partielles $\bar{\rho}_A$ et $\bar{\rho}_B$:

$$\bar{\rho} = \bar{\rho}_A + \bar{\rho}_B \quad (3.3.7)$$

En utilisant les lois des gaz parfaits dans ces définitions, on obtient :

$$\bar{p} = \bar{\rho} \frac{R}{\bar{M}} \bar{T} = \bar{\rho}_A \frac{R}{\bar{M}_A} \bar{T} + \bar{\rho}_B \frac{R}{\bar{M}_B} \bar{T}$$

c'est-à-dire :

$$\frac{\bar{p}}{\bar{M}} = \frac{\bar{\rho}_A}{\bar{M}_A} + \frac{\bar{\rho}_B}{\bar{M}_B} \quad (3.3.8)$$

introduisant ainsi la masse molaire totale du gaz \bar{M} :

$$\frac{1}{\bar{M}} = \frac{\bar{W}_A}{\bar{M}_A} + \frac{\bar{W}_B}{\bar{M}_B} \quad (3.3.9)$$

Comme $\bar{\rho} = \bar{\rho}_A + \bar{\rho}_B$ cette expression devient :

$$\frac{1}{\bar{M}} = \frac{\bar{W}_A}{\bar{M}_A} + \frac{1 - \bar{W}_A}{\bar{M}_B} = \bar{W}_A \left(\frac{1}{\bar{M}_A} - \frac{1}{\bar{M}_B} \right) + \frac{1}{\bar{M}_B} \quad (3.3.10)$$

puisque $\bar{W}_A + \bar{W}_B = 1$.

Connaissant les masses molaires \bar{M}_A et \bar{M}_B et les pressions partielles \bar{p}_A et \bar{p}_B de A et B, on peut calculer les fractions massiques \bar{W}_A et \bar{W}_B . En effet, de : $\bar{\rho}_A = \frac{\bar{p}_A \bar{M}_A}{R \bar{T}}$ on déduit :

$$\bar{W}_A = \frac{\bar{\rho}_A}{\bar{\rho}} = \frac{\bar{p}_A \bar{M}_A}{\bar{p} R \bar{T}} = \frac{\bar{p}_A \bar{M}_A}{\bar{p} \bar{M}} = \frac{\bar{p}_A}{\bar{p}} \left[\bar{W}_A + \frac{\bar{M}_A}{\bar{M}_B} (1 - \bar{W}_A) \right]$$

d'où la fraction massique de A :

$$\bar{W}_A = \frac{\bar{p}_A \bar{M}_A}{\bar{p} \bar{M}_B} \frac{1}{1 + \frac{\bar{p}_A}{\bar{p}} \left(\frac{\bar{M}_A}{\bar{M}_B} - 1 \right)} \quad (3.3.11)$$

Nous sommes alors en mesure d'introduire l'hypothèse de quasi-compressibilité de Boussinesq, valable pour les gaz parfaits.

Si l'on choisit comme variables indépendantes la pression totale \bar{p} , la masse molaire totale \bar{M} et la température \bar{T} , alors la masse volumique $\bar{\rho}$ est une fonction de ces variables :

$$\bar{\rho} = f(\bar{p}, \bar{M}, \bar{T})$$

Sa différentielle s'écrit alors :

$$d\bar{\rho} = \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{p}} \right)_{\bar{M}, \bar{T}} d\bar{p} + \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{M}} \right)_{\bar{p}, \bar{T}} d\bar{M} + \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{T}} \right)_{\bar{p}, \bar{M}} d\bar{T} \quad (3.3.12)$$

et donc sa dérivée logarithmique :

$$\frac{d\bar{\rho}}{\bar{\rho}} = \frac{1}{\bar{p}} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{p}} \right)_{\bar{M}, \bar{T}} d\bar{p} + \frac{1}{\bar{M}} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{M}} \right)_{\bar{p}, \bar{T}} d\bar{M} + \frac{1}{\bar{T}} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{T}} \right)_{\bar{p}, \bar{M}} d\bar{T}$$

Les effets de pression étant négligés, $d\bar{p} = 0$; d'autre part la relation donnant la définition de \bar{M} permet d'exprimer $d\bar{M}$ en fonction de $d\bar{W}_A$:

$$d\bar{M} = \frac{1}{\left[\frac{1}{\bar{M}_B} + \left(\frac{1}{\bar{M}_A} - \frac{1}{\bar{M}_B} \right) \bar{W}_A \right]^2} \left(\frac{1}{\bar{M}_A} - \frac{1}{\bar{M}_B} \right) d\bar{W}_A$$

soit :

$$d\bar{M} = -\bar{M}^2 \left(\frac{1}{\bar{M}_A} - \frac{1}{\bar{M}_B} \right) d\bar{W}_A$$

L'équation des gaz parfaits montre aussi que :

$$\left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{M}}\right)_{\bar{p}, \bar{T}} = -\frac{\bar{p}}{R \bar{T}} = -\frac{\bar{p}}{\bar{M}} \quad (3.3.13)$$

ainsi que :

$$\frac{1}{\bar{p}} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{T}}\right)_{\bar{p}, \bar{M}} = -\frac{1}{\bar{T}} \quad (3.3.14)$$

La variation relative infinitésimale de la masse volumique totale $\bar{\rho}$ s'écrit donc :

$$\frac{d\bar{\rho}}{\bar{\rho}} = -\bar{M} \left(\frac{1}{\bar{M}_A} - \frac{1}{\bar{M}_B} \right) d\bar{W}_A - \frac{1}{\bar{T}} d\bar{T} \quad (3.3.15)$$

Si l'on calcule cette variation relative en l'intégrant par rapport aux variables de référence $\bar{M}_0, \bar{\rho}_0, \bar{W}_{A0}$ et \bar{T}_0 correspondant à la température moyenne de la cavité \bar{T}_0 , on obtient un développement de $\bar{\rho}$ au premier ordre par rapport aux variables \bar{T} et \bar{W}_A :

$$\frac{\bar{\rho} - \bar{\rho}_0}{\bar{\rho}_0} = -\bar{M}_0 \left(\frac{1}{\bar{M}_A} - \frac{1}{\bar{M}_B} \right) (\bar{W}_A - \bar{W}_{A0}) - \frac{1}{\bar{T}_0} (\bar{T} - \bar{T}_0)$$

ou encore :

$$\bar{\rho} = \bar{\rho}_0 (1 - \alpha_A (\bar{W}_A - \bar{W}_{A0}) - \beta (\bar{T} - \bar{T}_0)) \quad (3.3.16)$$

où l'on définit :

- le coefficient d'expansion solutale défini par rapport à A :

$$\alpha_A = \bar{M}_0 \left(\frac{1}{\bar{M}_A} - \frac{1}{\bar{M}_B} \right) = -\frac{1}{\bar{\rho}_0} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{W}_A} \right)_{\bar{T}} \quad (3.3.17)$$

- le coefficient d'expansion thermique :

$$\beta = \frac{1}{\bar{T}_0} = -\frac{1}{\bar{\rho}_0} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{T}} \right)_{\bar{W}_A} \quad (3.3.18)$$

L'hypothèse de Boussinesq s'énonce alors : la masse volumique totale $\bar{\rho}$ du fluide est supposée constante et calculée à la température moyenne \bar{T}_0 ($\bar{\rho} = \bar{\rho}_0$) sauf dans l'expression de la poussée d'Archimède dans laquelle elle dépend linéairement de la température et de la fraction massique de l'une des deux espèces.

3.3.3. Remarques

(a) L'approximation de Boussinesq ne s'applique plus, sous sa forme linéaire, aux fluides qui sont à des températures telles que leurs masses volumiques sont maximales. Le développement de $\bar{\rho}$ suivant les variables $\bar{W}, \bar{T}, \bar{M}, \bar{p}$ se fait jusqu'au second ordre (approximation quadratique).

(b) Le coefficient d'expansion thermique, $\beta = 1/\bar{T}_0$, est positif pour un gaz parfait, donc la masse volumique $\bar{\rho}$ totale du gaz est une fonction décroissante de la température. De sorte que la seule action de la température aura pour effet de provoquer un mouvement ascendant du fluide total (caractérisé par la vitesse moyenne massique \bar{v}) à la source chaude de la cavité.

(c) Le coefficient d'expansion solutale, défini par rapport au corps A :

$$\alpha_A = \frac{\bar{M}_0}{\bar{M}_A \bar{M}_B} (\bar{M}_B - \bar{M}_A) \quad (3.3.19)$$

(avec : $1/\bar{M}_0 = \bar{W}_{A0}/\bar{M}_A + (1 - \bar{W}_{A0})/\bar{M}_B$) peut être positif ou négatif selon que $\bar{M}_B > \bar{M}_A$ ou $\bar{M}_B < \bar{M}_A$. Dans le premier cas ($\alpha_A > 0$), si l'on choisit d'exprimer $\bar{\rho}$ en fonction de \bar{W}_A , et non en fonction de $\bar{W}_B = 1 - \bar{W}_A$, alors la masse volumique est une fonction décroissante de la fraction massique \bar{W}_A du corps le plus léger, tandis qu'elle est une fonction croissante de la fraction massique \bar{W}_B du corps le plus lourd. Dans le deuxième cas ($\alpha_A < 0$), la masse volumique est une fonction croissante de la fraction massique \bar{W}_A du corps le plus lourd, tandis qu'elle est une fonction décroissante de la fraction massique \bar{W}_B du corps le plus léger. Dans les deux cas, la masse volumique $\bar{\rho}$ totale est donc une fonction croissante de la fraction massique du corps le plus lourd quel que soit son indice.

De sorte que si l'espèce la plus lourde A est en plus grande quantité à la paroi la plus chaude (c'est-à-dire $\bar{T}_2 > \bar{T}_1$ et $\bar{W}_{A2} > \bar{W}_{A1}$ avec $\alpha_A < 0$) alors les effets thermiques qui tendent à rendre le mouvement du fluide ascendant à la paroi chaude, se trouvent compensés par les effets de concentration qui, dans ce cas, tendent à rendre le mouvement du fluide descendant à cette même paroi chaude.

Si l'espèce la plus lourde A se trouve à la paroi la plus froide ($\bar{T}_2 > \bar{T}_1$ et $\bar{W}_{A2} < \bar{W}_{A1}$ avec $\alpha_A < 0$) alors les effets de masse vont dans le même sens que les effets thermiques, et le fluide est ascendant à la paroi chaude tandis qu'il est descendant à la paroi froide.

Dans le premier cas ($\bar{W}_{A2} > \bar{W}_{A1}$) l'effet descendant l'emporte sur l'effet ascendant à la paroi chaude si

$$|\alpha_A| (\bar{W}_{A2} - \bar{W}_{A1}) > \beta (\bar{T}_2 - \bar{T}_1) \quad (3.3.20)$$

Désormais, si l'on choisit de désigner par A l'espèce la plus lourde, alors dans l'expression de Boussinesq, $\alpha_A < 0$ et $\bar{\rho}$ est une fonction croissante de \bar{W}_A . C'est alors la nature des conditions aux limites sur \bar{W}_A , $\bar{W}_{A2} > \bar{W}_{A1}$ ou $\bar{W}_{A2} < \bar{W}_{A1}$, qui décide de l'orientation de l'écoulement aux parois actives.

En résumé : si i désigne indifféremment A ou B, les inégalités suivantes ont des interprétations différentes :

- Si $\alpha_i (\bar{W}_{i2} - \bar{W}_{i1}) > 0$ alors :
 - soit $\alpha_i < 0$ et alors i est l'espèce la plus lourde et se trouve concentrée à la paroi froide ;
 - soit $\alpha_i > 0$ et alors i est l'espèce la plus légère et se trouve concentrée à la paroi chaude ;
- Si $\alpha_i (\bar{W}_{i2} - \bar{W}_{i1}) < 0$ alors :
 - soit $\alpha_i < 0$ et alors i est l'espèce la plus lourde et se trouve concentrée à la paroi chaude ;
 - soit $\alpha_i > 0$ et alors i est l'espèce la plus légère et se trouve concentrée à la paroi froide, auquel cas c'est l'espèce la plus lourde qui est concentrée à la paroi chaude.

Dans ces deux derniers cas, on peut observer un écoulement descendant à la paroi chaude.

	$\alpha_i(\bar{W}_{i2}-\bar{W}_{i1})>0$		$\alpha_i(\bar{W}_{i2}-\bar{W}_{i1})<0$	
α_i	> 0	< 0	> 0	< 0
$(\bar{W}_{i2}-\bar{W}_{i1})$	> 0	< 0	< 0	> 0
Espèce i	La plus légère	La plus lourde	La plus légère	La plus lourde
Plus grande concentration i à la paroi :	chaude	froide	froide	chaude
Orientation de l'écoulement à la paroi chaude :	ascendant		$ \alpha_i (\bar{W}_{i2}-\bar{W}_{i1})>\beta(\bar{T}_2-\bar{T}_1)$:	descendant
			$ \alpha_i (\bar{W}_{i2}-\bar{W}_{i1})<\beta(\bar{T}_2-\bar{T}_1)$:	ascendant

Tableau 3.3.1. Comportement du fluide à la paroi chaude

(d) Si l'on choisit A comme espèce la plus lourde ($\bar{M}_A > \bar{M}_B$) alors $\alpha_A < 0$ et la masse volumique totale $\bar{\rho}$ exprimée avec \bar{W}_A est une fonction croissante de \bar{W}_A . En particulier, le choix des conditions aux limites sur la température et la fraction massique de A doit permettre de rester cohérent avec l'hypothèse des gaz parfaits et l'approximation de Boussinesq. Compte tenu du choix qui vient d'être fait, ces conditions aux limites doivent être compatibles avec la condition (voir Annexe 4) :

$$\frac{\Delta \bar{\rho}}{\Delta \bar{W}_A} > 0$$

où $\Delta \bar{\rho} = \bar{\rho}_2 - \bar{\rho}_1$ et $\Delta \bar{W}_A = \bar{W}_{A2} - \bar{W}_{A1}$, les indices 2 et 1 étant liés respectivement à la paroi chaude et à la paroi froide. Cette condition est alors équivalente à :

$$\frac{-\alpha_A(\bar{W}_{A2}-\bar{W}_{A1})-\beta(\bar{T}_2-\bar{T}_1)}{\bar{W}_{A2}-\bar{W}_{A1}} > 0$$

d'après l'approximation de Boussinesq. Le choix du coefficient d'expansion massique permet de poser : $\alpha_A = -|\alpha_A|$ et donc d'obtenir :

$$\beta(\bar{T}_2-\bar{T}_1) < |\alpha_A|(\bar{W}_{A2}-\bar{W}_{A1}) \quad (3.3.21)$$

Ayant $\bar{T}_2 - \bar{T}_1 > 0$, on doit avoir : $\bar{W}_{A2} - \bar{W}_{A1} > 0$, autrement dit l'espèce A est la plus lourde et est plus concentrée à la paroi chaude. Ceci exprime une condition de compatibilité entre les conditions aux limites et les hypothèses faites sur le gaz, et donc un critère d'admissibilité physique des résultats numériques.

On peut traduire cette condition avec les grandeurs sans dimension caractéristiques du problème, à savoir :

- le nombre de Prandtl : $Pr = \bar{\mu}_0 C_p / \bar{k}_0$,

- le nombre de Schmidt : $Sc = \bar{\mu}_0 / \bar{\rho}_0 \bar{D}_{AB}$,

- ou, à la place de l'un des deux précédents, le nombre de Lewis : $Le = \bar{k}_0 / \bar{\rho}_0 C_p \bar{D}_{AB} = Sc / Pr$,

- le nombre de Rayleigh thermique : $Ra_T = \bar{\rho}_0^2 \beta (\bar{T}_2 - \bar{T}_1) g (2H)^3 Pr / \bar{\mu}_0^2$, qui est toujours positif,

- le nombre de Rayleigh solutal : $Ra_M = \bar{\rho}_0 \alpha_A (\bar{W}_{A2} - \bar{W}_{A1}) g (2H)^3 / \bar{\mu}_0 \bar{D}_{AB}$, qui est du signe du coefficient d'expansion solutale α_A .

En effet : $\beta(\bar{T}_2 - \bar{T}_1) = \frac{Ra_T}{Pr} \frac{\bar{\mu}_0^2}{\bar{\rho}_0^2 g (2H)^3}$, $|\alpha_A| (\bar{W}_{A2} - \bar{W}_{A1}) = |Ra_M| \frac{\bar{\mu}_0 \bar{D}_{AB}}{\bar{\rho}_0 g (2H)^3}$,

et la condition s'écrit, d'après les définitions : $\frac{Ra_T}{Pr} < \frac{|Ra_M|}{Sc}$, ou, ce qui revient au même :

$$0 < Ra_T < |Ra_M| / Le \quad (3.3.22)$$

Pour un nombre de Lewis donné, le domaine de validité est donc donné par le graphe suivant :

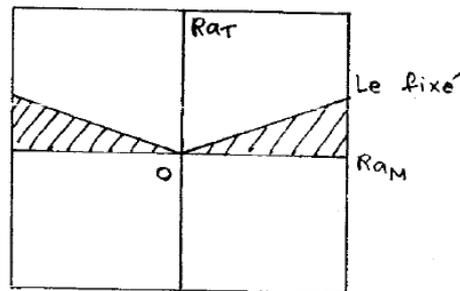


Fig. 3.3.1. Domaine de validité pour un fluide binaire de Boussinesq (Annexe 4)

Si l'on fait varier le nombre de Lewis, qui caractérise la nature physique du fluide, on obtient, dans l'espace (Ra_T, Ra_M, Le) un domaine limité par une surface dont la section pour un Ra_M fixé admet une hyperbole pour trace :

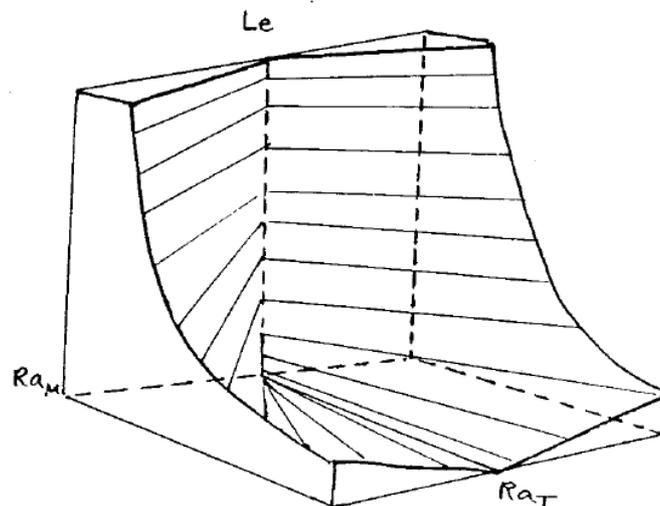


Fig. 3.3.2. Nombres de Lewis, de Rayleigh thermique et de Rayleigh solutal pour un fluide binaire de Boussinesq

En conclusion : une solution numérique représentative de l'écoulement d'un fluide binaire de Boussinesq devra montrer un écoulement descendant à la paroi chaude verticale lorsque $\bar{M}_A > \bar{M}_B$. Dans le cas où $\bar{M}_A = \bar{M}_B$ il n'y a pas de restriction de compatibilité avec l'hypothèse de Boussinesq (Annexe 4).

Dans les problèmes de croissance cristalline en phase vapeur c'est, en général, l'espèce la plus lourde

qui est l'agent de transport et qui se sublime à la paroi chaude où, par conséquent, elle est la plus concentrée.

3.4. Modélisation mathématique

3.4.1. Géométrie du problème. Équations générales du mouvement

La géométrie du problème est définie ainsi :

La cavité est supposée rectangulaire, la longueur des parois actives étant $2L$ et celle des parois latérales étant $2H$. L'axe joignant les parois actives fait un angle Ω avec la direction de la pesanteur ; la source est portée à la température \bar{T}_2 tandis que le puits l'est à la température \bar{T}_1 : $\bar{T}_2 > \bar{T}_1$. Le rapport de forme est défini par $\ell = L/H$; la température moyenne du fluide est $\bar{T}_0 = (\bar{T}_1 + \bar{T}_2)/2$ et la fraction massique moyenne de l'espèce A est $\bar{W}_0 = (\bar{W}_1 + \bar{W}_2)/2$, \bar{W}_1 et \bar{W}_2 étant la fraction massique de l'espèce A respectivement au puits et à la source.

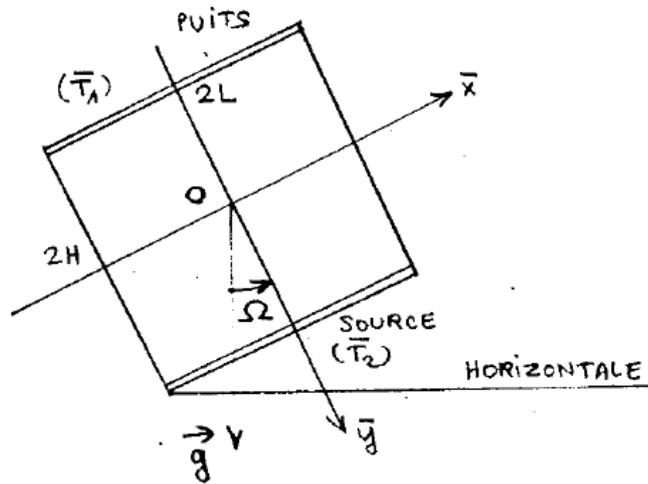


Fig. 3.4.1. Géométrie du problème

Le choix des axes est indiqué par la figure 3.4.1. les équations du mouvement du fluide sont écrites en *variables primitives* et compte tenu des hypothèses de base, de la façon suivante :

- Équations de la quantité de mouvement et de continuité :

$$\bar{\rho}_0 \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{t}} + \bar{\rho}_0 \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \bar{\rho}_0 \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{y}} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{x}} + \bar{\mu}_0 \left(\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{y}^2} \right) - \bar{\rho} g \sin \Omega \quad (3.4.1)$$

$$\bar{\rho}_0 \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{t}} + \bar{\rho}_0 \bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{x}} + \bar{\rho}_0 \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{y}} + \bar{\mu}_0 \left(\frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{y}^2} \right) + \bar{\rho} g \cos \Omega \quad (3.4.2)$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} = 0 \quad (3.4.3)$$

- Équation de l'énergie :

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{t}} + \bar{u} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}} + \bar{v} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{y}} = \bar{\chi}_0 \left(\frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{y}^2} \right) \quad (3.4.4)$$

avec $\bar{\chi}_0 = \bar{k}_0 / \bar{\rho}_0 C_p$.

– Équation de conservation de l'espèce A :

$$\frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{t}} + \bar{u} \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{x}} + \bar{v} \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{y}} = \bar{D}_{AB} \left(\frac{\partial^2 \bar{W}_A}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{W}_A}{\partial \bar{y}^2} \right) \quad (3.4.5)$$

qui provient de l'équation de continuité pour A : $\frac{\partial \bar{\rho}_A}{\partial \bar{t}} + \text{div}(\bar{\rho}_A \bar{\mathbf{v}}_A) = 0$.

3.4.2. Formulation en variables de rotationnel des vitesses et fonction de courant

L'équation qui traduit l'incompressibilité du fluide est automatiquement vérifiée si l'on choisit comme nouvelle variable la **fonction de courant** $\bar{\psi}$ telle que :

$$\bar{u} = \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{y}} \quad \text{et} \quad \bar{v} = -\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{x}} \quad (3.4.6)$$

L'élimination des termes de pression dans les équations (3.4.1-3) permet d'éviter les problèmes d'approximation des conditions aux limites de Neumann sur la pression : elle s'obtient en faisant apparaître le **rotationnel des vitesses** :

$$\bar{\xi} = \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{y}} - \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{x}} \quad (3.4.7)$$

par soustraction des équations (3.4.1) et (3.4.2) dérivées respectivement par rapport à \bar{y} et \bar{x} . Compte tenu de l'équation (3.4.4) et de l'équation (3.4.6), nous obtenons la formulation équivalente des équations de la quantité de mouvement en variables $(\bar{\psi}, \bar{\xi})$:

$$\bar{\rho}_0 \left(\frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{t}} + \bar{u} \frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{x}} + \bar{v} \frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{y}} \right) = \bar{\mu}_0 \left(\frac{\partial^2 \bar{\xi}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{\xi}}{\partial \bar{y}^2} \right) + \bar{\rho}_0 \beta g \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}} \cos \Omega + \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{y}} \sin \Omega \right) + \alpha_A \bar{\rho}_0 g \left(\frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{x}} \cos \Omega + \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{y}} \sin \Omega \right) \quad (3.4.8)$$

$$\bar{\xi} = \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \bar{y}^2} \quad (3.4.9)$$

avec $\bar{u} = \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{y}}$, $\bar{v} = -\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{x}}$.

L'**adimensionnement**, qui consiste à réduire les variables par rapport à des grandeurs de référence, présente l'avantage de s'affranchir des choix particuliers d'unités, de mettre en évidence les paramètres de similitude et de faciliter une meilleure évaluation des importances relatives des divers phénomènes qui contribuent aux mouvements de fluide.

Le changement de variables suivant :

$$\left. \begin{aligned} x &= \bar{x}/L ; y = \bar{y}/H ; t = \bar{t} \cdot \bar{k}_0 / \bar{\rho}_0 C_p H^2 ; \ell = L/H \\ u &= \bar{u} \cdot \bar{\rho}_0 C_p H / \bar{k}_0 ; v = \bar{v} \cdot \bar{\rho}_0 C_p H / \bar{k}_0 \\ T &= (\bar{T} - \bar{T}_0) / \frac{1}{2} \Delta \bar{T} ; W = (\bar{W}_A - \bar{W}_0) / \frac{1}{2} \Delta \bar{W}_A \end{aligned} \right| \quad (3.4.10)$$

permet de centrer les variables entre -1 et +1, ce qui est en conformité avec l'utilisation des polynômes de Chebyshev (chapitre 4). Il implique un adimensionnement du rotationnel et de la fonction de courant suivant :

$$\psi = \bar{\psi} \cdot \bar{\rho}_0 C_p / \bar{k}_0 \quad \text{et} \quad \zeta = \bar{\zeta} \cdot \bar{\rho}_0 C_p H^2 / \bar{k}_0 \quad (3.4.11)$$

Introduisant les paramètres de similitude :

- **nombre de Prandtl** : $Pr = \bar{\mu}_0 \bar{C}_p / \bar{k}_0$
- **nombre de Lewis** : $Le = \bar{k}_0 / \bar{\rho}_0 \bar{C}_p \bar{D}_{AB}$
- **nombre de Rayleigh thermique** : $Ra_T = \bar{\rho}_0^2 \beta g (2H)^3 Pr \Delta \bar{T} / \bar{\mu}_0^2$
- **nombre de Rayleigh solutal** : $Ra_M = \alpha_A \bar{\rho}_0 g (2H)^3 \Delta \bar{W}_A / \bar{\mu}_0 \bar{D}_{AB}$

les équations du mouvement adimensionnées s'écrivent :

- Transport du rotationnel

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{u}{\ell} \frac{\partial \zeta}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta}{\partial y} = Pr \left(\frac{1}{\ell^2} \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{16} Ra_T Pr \left(\frac{\cos \Omega}{\ell} \frac{\partial T}{\partial x} + \sin \Omega \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ + \frac{1}{16} \frac{Ra_M Pr}{Le} \left(\frac{\cos \Omega}{\ell} \frac{\partial W}{\partial x} + \sin \Omega \frac{\partial W}{\partial y} \right) \end{aligned} \right| \quad (3.4.12)$$

- Définition du rotationnel :

$$\zeta = \frac{1}{\ell^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \quad (3.4.13)$$

- Énergie :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{u}{\ell} \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{1}{\ell^2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (3.4.14)$$

- Fraction massique :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{u}{\ell} \frac{\partial W}{\partial x} + v \frac{\partial W}{\partial y} = \frac{1}{Le} \left(\frac{1}{\ell^2} \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \right) \quad (3.4.15)$$

Dans ce système d'adimensionnement, les **nombre de Nusselt et de Sherwood moyens** s'écrivent respectivement :

$$\overline{Nu}(y) = \int_{-1}^1 \left(v T - \frac{\partial T}{\partial y} \right) dx \quad (3.4.16)$$

$$\overline{Sh}(y) = \int_{-1}^1 \left(v W - \frac{\partial W}{\partial y} \right) dx \quad (3.4.17)$$

3.4.3. Conditions aux limites naturelles (absence de sublimation et de condensation aux parois actives)

3.4.3.1. Si l'on ne tient pas compte des processus de sublimation à la source polycristalline et de dépôt sur le puits, les conditions aux limites sur la vitesse sont nulles. De plus, les températures et concentrations étant imposées aux parois actives, les conditions aux limites sur les **variables primitives** aux parois actives sont toutes les conditions de type Dirichlet.

Parois actives :

(i) Vitesse nulle aux parois actives :

$$\bar{u}(\bar{x}, -H) = \bar{u}(\bar{x}, H) = 0 \quad -L < \bar{x} < L \quad (3.4.18)$$

$$\bar{v}(\bar{x}, -H) = \bar{v}(\bar{x}, H) = 0 \quad -L < \bar{x} < L \quad (3.4.19)$$

(ii) Température imposée aux parois actives :

$$\bar{T}(\bar{x}, -H) = \bar{T}_1 \quad -L < \bar{x} < L \quad (\text{puits}) \quad (3.4.20)$$

$$\bar{T}(\bar{x}, H) = \bar{T}_2 \quad -L < \bar{x} < L \quad (\text{source}) \quad (3.4.21)$$

(iii) Fraction massique imposée aux parois actives :

$$\bar{W}_A(\bar{x}, -H) = \bar{W}_1 \quad -L < \bar{x} < L \quad (\text{puits}) \quad (3.4.22)$$

$$\bar{W}_A(\bar{x}, H) = \bar{W}_2 \quad -L < \bar{x} < L \quad (\text{source}) \quad (3.4.23)$$

Parois terminales :

(iv) Aux parois terminales, la condition d'adhérence et d'imperméabilité conduit à des vitesses nulles :

$$\bar{u}(L, \bar{y}) = \bar{u}(-L, \bar{y}) = 0 \quad -H < \bar{y} < H \quad (\text{imperméabilité}) \quad (3.4.24)$$

$$\bar{v}(L, \bar{y}) = \bar{v}(-L, \bar{y}) = 0 \quad -H < \bar{y} < H \quad (\text{adhérence}) \quad (3.4.25)$$

(v) L'imperméabilité des parois terminales aux espèces conduit aux conditions de Neumann pour la fraction massique :

$$\frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{x}}(-L, \bar{y}) = \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{x}}(L, \bar{y}) = 0 \quad -H < \bar{y} < H \quad (3.4.26)$$

(vi) Selon que les parois terminales sont soit conductrices, soit adiabatiques, la température admet les conditions suivantes respectivement :

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{y}}(-L, \bar{y}) = \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{y}}(L, \bar{y}) = \frac{\Delta \bar{T}}{2H} \quad -H < \bar{y} < H \quad (\text{conductrices}) \quad (3.4.27)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}}(-L, \bar{y}) = \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}}(L, \bar{y}) = 0 \quad -H < \bar{y} < H \quad (\text{adiabatiques}) \quad (3.4.28)$$

3.4.3.2. **En formulation fonction de courant – rotationnel des vitesses**, ces conditions aux limites correspondent aux expressions adimensionnelles suivantes :

(i) Vitesse nulle aux parois actives :

$$\psi(x, \pm 1) = \frac{\partial \psi}{\partial y}(x, \pm 1) = 0 \quad -1 < x < 1 \quad (3.4.29)$$

(ii) Imperméabilité et adhérence aux parois terminales :

$$\psi(\pm 1, y) = \frac{\partial \psi}{\partial y}(\pm 1, y) = 0 \quad -1 < y < 1 \quad (3.4.30)$$

(iii) Conditions sur le rotationnel des vitesses :

$$\zeta(\pm 1, y) = \frac{1}{\ell^2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)_{x=\pm 1} \quad (3.4.31)$$

$$\zeta(x, \pm 1) = \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right)_{y=\pm 1} \quad (3.4.32)$$

(iv) Conditions sur la température :

Parois actives isothermes :

$$T(x, \pm 1) = \pm 1 \quad (3.4.33)$$

Parois terminales conductrices :

$$\frac{\partial T}{\partial y}(\pm 1, y) = 1 \quad (3.4.34)$$

Parois terminales adiabatiques :

$$\frac{\partial T}{\partial x}(\pm 1, y) = 0 \quad (3.4.35)$$

(v) Conditions sur la fraction massique :

Concentration imposée aux parois actives :

$$W(x, \pm 1) = \pm 1 \quad (3.4.36)$$

Parois terminales imperméables aux espèces :

$$\frac{\partial W}{\partial x}(\pm 1, y) = 0 \quad (3.4.37)$$

3.5. Solutions asymptotiques pour la convection naturelle et la double diffusion

3.5.1. Introduction. Pour les cavités de faibles allongements ($\ell \ll 1$) et des nombres de Rayleigh pas trop grands, la force motrice du mouvement est assurée par le gradient thermique (ou solutal) au centre de la cavité (Birikh, 1966, Hart, 1972, Klosse et Ullersma, 1973, Bejan et Tien, 1978). L'écoulement admet une similitude en y et le champ de vitesse est parallèle aux parois horizontales dans le cœur de l'écoulement (« core driven regime », CDR). Dans le cas de cavités à allongements finis, les parois actives verticales n'ont pour rôle que de tourner l'écoulement de 180° .

Dans le cas des valeurs élevées du nombre de Rayleigh, il y a transition vers un régime où la force motrice est produite par les gradients localisés au voisinage des parois actives. Elle engendre des couches limites verticales qui déterminent le flux dans toute la cavité (Cormack et al, 1974, Imberger, 1974, Ostrach et al, 1977, 1980, Bejan et al, 1981). Bien que des tentatives pour déterminer des solutions analytiques dans ces régimes (« boundary layer driven regime », BLDR) aient été développées (Tichy et Gadgil, 1982), il n'existe pas actuellement de solutions simples pour prédire complètement ces écoulements. Il existe cependant des théories asymptotiques dans le cas de parois verticales dans les cavités allongées ($\ell \ll 1$).

Dans le cas de cavités d'allongement fini, l'extension de ces théories (Elder, 1965, Gill, 1966, Vest et Arpaci, 1969) s'est avérée satisfaisante (Roux et al, 1980). Dans le cas d'un cylindre horizontal (allongement équivalent $\ell = 0,2$), Schiroky et Rosenberger (1982) ont montré que ces solutions peuvent encore s'appliquer.

3.5.2. Solutions asymptotiques pour la convection entre deux parois verticales

3.5.2.1. Dans le cas où un gaz pur est contenu entre deux parois verticales infiniment allongées, et lorsque l'on suppose que l'écoulement admet une similitude suivant l'axe vertical, il existe une **solution analytique générale** des équations de la convection naturelle (Elder, 1965, Vest et Arpaci, 1969).

Les équations se ramènent à une équation différentielle biharmonique sur la vitesse verticale u :

$$\frac{d^4 u}{dy^4} + m^4 u = 0 \quad (3.5.1)$$

Ceci suppose une faible diffusion thermique sur la verticale, avec :

$$\frac{1}{\ell} \frac{\partial T}{\partial x} = \beta \quad (3.5.2)$$

La solution est :

$$u(y) = k(\sin my \cosh my - \rho \cos my \sinh my) \quad (3.5.3)$$

avec :

$$m = \left(\frac{1}{4} \beta \frac{Ra_T}{16} \right)^{1/4} \quad \text{paramètre de stratification} \quad (3.5.4)$$

$$k = 2 \frac{m^2}{\beta} (\cos m \sinh m + \rho \sin m \cosh m)^{-1} \quad (3.5.5)$$

$$\rho = \tan m / \tanh m \quad (3.5.6)$$

Le paramètre β varie avec le nombre de Rayleigh et l'allongement (Thomas et De Vahl Davis, 1970, Roux et al, 1980) suivant les expressions :

$$\beta \ell \sim 2.10^{-5} (\text{Ra}_T \ell^{-5/4})^{7/4} \quad \text{pour} \quad \text{Ra}_T \ell^{-5/4} > 400 \quad (3.5.7)$$

$$\beta \ell \sim 0,8 \quad \text{pour} \quad \text{Ra}_T \ell^{-5/4} < 400 \quad (3.5.8)$$

Deux types de solutions limites peuvent être déduits de la solution analytique $u(y)$, lorsque $\text{Ra}_T \gg 1$ (régime de type « couche limite ») ou $\text{Ra}_T \ll 1$ (régime de type « conducteur »), pour les cavités vérifiant $\ell > 1$.

3.5.2.2. **Dans le cas $\text{Ra}_T \gg 1$** , et lorsque $y = \pm 1$, $\beta \ell \approx 0,8$, la solution limite peut s'écrire :

$$u(y) = \frac{k}{\cos m} \sin m(y+1) \cdot \frac{e^{-my}}{2} \quad (3.5.9)$$

$$\rho \approx \tan m, \quad k \approx \frac{1}{4\alpha} (\text{Ra}_T \ell)^{1/2} \frac{\cos m}{\cosh m}, \quad m = \left(\frac{\beta}{4} \frac{\text{Ra}_T}{16} \right)^{1/4}, \quad \alpha = \beta \ell$$

En s'appuyant sur l'hypothèse d'une cavité verticale allongée ($\ell > 1$) dans laquelle l'écoulement est strictement unidimensionnel, des études ont montré que la vitesse $u(y)$ et la température $T(y)$ avaient comme expressions analytiques (Gill, 1966, Roux et al, 1980) :

$$\left. \begin{aligned} u(y) &= \frac{C^2}{2} (\text{Ra}_T \ell)^{1/2} \sin \tilde{m} y \cdot e^{-\tilde{m} y} \\ T(y) &= \cos \tilde{m} y \cdot e^{-\tilde{m} y} \end{aligned} \right| \quad (3.5.10)$$

où \tilde{m} est un paramètre que l'on peut identifier à m à condition de choisir :

$$C = \frac{1}{2m} \left(\frac{\text{Ra}_T}{\ell} \right)^{1/4} \quad (3.5.11)$$

Les extrema sont alors :

$$u_{\max} = \frac{C^2}{2} \sin \left(\frac{\pi}{4} \right) e^{-\pi/4} (\text{Ra}_T \ell)^{1/2} \quad (3.5.12)$$

$$\Delta y_{\max} = \frac{\pi}{2m} = \pi C \left(\frac{\text{Ra}_T}{\ell} \right)^{-1/4} \quad (3.5.13)$$

qui correspond à la distance à la paroi du point de vitesse maximale et donc à une épaisseur de couche limite $\delta = \bar{\delta}/H$.

Dans le modèle proposé par Roux et al (1980), la constante C a été choisie de façon à ce que (3.5.10) coïncident avec les solutions numériques pour $\ell = 1$: $C = 0,80$, ce qui donne :

$$u_{\max} \approx 0,105 (\text{Ra}_T \ell)^{1/2} \quad (3.5.14)$$

$$\delta = \Delta y_{\max} \approx 2,4 (\text{Ra}_T / \ell)^{-1/4} \quad (3.5.15)$$

3.5.2.3. **Le cas $Ra_T \ll 1$** caractérise un régime conductif pour les cavités d'allongement $\ell > 1$. Le paramètre de stratification m est très faible, par suite :

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{\tan m}{\tanh m} = 1 + \frac{2}{3} m^2 - \dots \\ k &= \frac{2m^2}{\beta} \frac{1}{(1+\rho)m} = \frac{Ra_T}{4} \frac{1}{8m^3(1+\rho)} \\ \sin my &= my - \frac{(my)^3}{6} + \frac{(my)^5}{120} - \dots \\ \sinh my &= my + \frac{(my)^3}{6} + \frac{(my)^5}{120} + \dots \\ \cos my &= 1 - \frac{(my)^2}{2} + \frac{(my)^4}{24} - \frac{(my)^6}{720} + \dots \\ \cosh my &= 1 + \frac{(my)^2}{2} + \frac{(my)^4}{24} + \frac{(my)^6}{720} + \dots\end{aligned}$$

d'où l'expression approchée de la vitesse verticale :

$$u(y) = \frac{Ra_T}{16} \frac{1}{6} (y^3 - y) \quad (3.5.16)$$

Son maximum est atteint pour $y_{\max} = \pm 1/\sqrt{3}$ et a pour expression :

$$u_{\max} = \frac{1}{144\sqrt{3}} Ra_T \quad (3.5.17)$$

3.5.2.4. Différentes expressions peuvent être déduites pour exprimer le **nombre de Rayleigh de transition** entre les différents régimes. La valeur du nombre de Rayleigh critique peut être définie comme l'intersection des courbes $u_{\max}(Ra_T)$. Ainsi on obtient :

$$Ra_T^{c,u} = \left(72\sqrt{3} C^2 \sin \frac{\pi}{4} e^{-\pi/4} \right)^2 \ell \quad (3.5.18)$$

c'est-à-dire pour $C = 0,8$: $Ra_T^{c,u} \approx 686 \ell$.

Si l'on définit le Ra_T^c sur l'égalité des épaisseurs caractéristiques, on a :

$$Ra_T^{c,\delta} = \left(\frac{3-\sqrt{3}}{3\pi C} \right)^{-4} \ell \quad (3.5.19)$$

c'est-à-dire avec $C = 0,8$: $Ra_T^{c,\delta} \approx 1200 \ell$.

Cette relation est à comparer avec les valeurs dérivées du calcul numérique pour plusieurs valeurs de $\ell < 1$:

$$Ra_T^{c,num} \approx 400 \ell^{5/4} \quad (3.5.20)$$

3.5.3. Solutions asymptotiques pour la convection naturelle en cavité de faible allongement ($\ell < 1$)

3.5.3.1. Solution de type conductif (« core driven regime », CDR)

Dans le cas où l'on fait l'hypothèse de similitude en y , d'un écoulement parallèle aux parois

horizontales de grandes extensions, les équations de Navier-Stokes et d'énergie se ramènent à la forme simplifiée suivante :

$$\frac{1}{\ell^4} \frac{d^4 \psi}{dx^4} = -\frac{Ra_T}{16} \frac{\partial T}{\partial y} \quad (3.5.21)$$

où $\partial T/\partial y$ correspond à un gradient thermique constant, qui génère la force motrice du mouvement. Les conditions naturelles d'adhérence et d'imperméabilité permettent d'intégrer l'équation :

$$\psi(x) = -\frac{Ra_T}{16} \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\ell^4}{24} (x^2 - 1)^2 \quad (3.5.22)$$

d'où pour la vitesse horizontale l'expression :

$$v(x) = \frac{Ra_T}{16} \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\ell^3}{6} (x^3 - x) \quad (3.5.23)$$

qui correspond à un extremum en $x = \pm 1/\sqrt{3}$:

$$v_{\max} = \frac{Ra_T}{16} \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\ell^3}{9\sqrt{3}} \quad (3.5.24)$$

3.5.3.2. Régime de couche limite (« boundary layer driven regime », BLDR)

Pour les valeurs élevées du nombre de Rayleigh, la force motrice résulte de la présence de gradients importants aux proximités des parois actives (chaude et froide). Des couches limites s'y développent et dominent l'écoulement dans l'ensemble de la cavité. Du fait de la forte dépendance entre le cœur de l'écoulement et cet écoulement pariétal, les théories basées sur l'indépendance du mouvement au milieu de la cavité doivent être en défaut. En fait, des extensions ont été proposées pour les régimes de couches limites post-transitionnels où la diminution de $\partial T/\partial y$ permet encore une bonne représentation avec la loi (3.5.23). Une approche beaucoup plus complexe a été également proposée par Tichy et Gadgil (1982) pour les valeurs très élevées de Ra_T .

Afin de caractériser la transition entre le régime dominé par le cœur de la cavité (CDR) et le régime de couche limite (BLDR) de même qu'en (3.5.2), on peut proposer la valeur de Ra_T à l'intersection entre la courbe des maximums de vitesse (3.5.24) et celle de couche limite (3.5.12) :

$$Ra_T \ell^5 \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 = \left(72 \sqrt{3} C^2 \sin \frac{\pi}{4} \cdot e^{-\pi/4} \right)^2 \quad (3.5.25)$$

soit, dans le cas où $C = 0,8$ et $\partial T/\partial y = 1$ (fin du régime conductif) :

$$Ra_T \ell^5 = 686 \quad (3.5.26)$$

Ce résultat est à rapprocher avec la loi de variation de $\partial T/\partial y$ proposée par Bejan et Tien (1978) :

$$Ra_T \ell^{14/3} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)^{5/3} = 944 \quad (3.5.27)$$

qui donne, pour $\partial T/\partial y = 1$ une évaluation du nombre de Rayleigh critique singulièrement proche de la relation (3.5.26) obtenue avec des considérations basées sur la conservation des débits (à travers

v_{\max}) :

$$Ra_T \ell^{4,67} \approx 944 \quad (3.5.28)$$

On peut remarquer également que la relation (3.5.25) pourrait fournir une loi de variation de $\partial T/\partial y$ afin d'évaluer le champ de vitesse au milieu de la cavité (3.5.23).

3.5.4. Solutions asymptotiques pour la double diffusion

Les considérations développées pour la convection naturelle d'un gaz pur peuvent être reprises dans le cas d'un mélange. Les hypothèses similaires conduisent à l'équation :

$$\frac{1}{\ell^4} \frac{d^4 \psi}{dx^4} = -\frac{1}{16} \left(Ra_T \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{Ra_M}{Le} \frac{\partial W}{\partial y} \right) \quad (3.5.29)$$

On introduit ainsi un nombre de Rayleigh équivalent :

$$Ra_{eq} = Ra_T \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{Ra_M}{Le} \frac{\partial W}{\partial y} \quad (3.5.30)$$

La solution s'écrit :

$$\psi(x) = -\frac{Ra_{eq}}{16} \frac{\ell^4}{24} (x^2 - 1)^2 \quad (3.5.31)$$

D'où l'expression de la vitesse horizontale :

$$v(x) = \frac{Ra_{eq}}{16} \frac{\ell^3}{6} (x^3 - x) \quad (3.5.32)$$

similaire à la relation (3.5.23) et maximale pour $x = \pm 1/\sqrt{3}$:

$$v_{\max} = \frac{Ra_{eq}}{16} \frac{\ell^3}{9\sqrt{3}} \quad (3.5.33)$$

L'influence du gradient solutal s'ajoute à celle du gradient thermique. On remarquera dans les applications à la croissance cristalline que $Ra_T < |Ra_M|/Le$, ce qui va entraîner un Ra_{eq} négatif lorsque $\partial T/\partial y \sim \partial W/\partial y \sim 1$ (en régime de type conductif).

Toutes les considérations mentionnées précédemment se retrouvent lorsque l'on permute Ra_{eq} à $Ra_T \partial T/\partial y$.

La variation de $\partial W/\partial y$ au milieu de la cavité est mal connue mais on pourra admettre, en première approximation, qu'elle suit une loi similaire à celle donnée pour le gradient thermique.

3.6. Modèle de la sublimation et de condensation à la source et au puits. Conditions aux limites spécifiques et interprétations physiques

3.6.1. Introduction. Deux modèles ont été considérés pour représenter la sublimation à la source et la condensation au puits de l'agent de transport A.

L'un, purement analytique, a été construit comme une perturbation de l'écoulement convectif de base (3.5.26-27), avec comme paramètre d'échelle le taux mesurant le débit relatif de l'écoulement pariétal avec l'écoulement de base (Manouélian et Roux, 1982).

Le second modèle s'exprime en fonction de la loi de Fick, en faisant intervenir la fraction massique pariétale et son gradient.

3.6.2. Modèle analytique du flux pariétal

À partir des hypothèses suivantes :

(i) la vitesse pariétale ne dépend que de x , et est nulle aux parois terminales :

$$\left. \begin{aligned} \hat{v}(x=\pm 1) &= \hat{\zeta}(x=\pm 1) = 0 \\ \hat{\psi}(-1) &= 0 \end{aligned} \right| \quad (3.6.1)$$

(ii) la vitesse pariétale est maximale sur l'axe :

$$\hat{v}(x=0) \text{ maximale}$$

on a obtenu les profils de v et de la fonction de courant $\hat{\psi}$ sous la forme :

$$\hat{x}(x) = -v_{\max}(x^2-1)^2 \quad (3.6.2)$$

$$\hat{\psi}(x) = -\ell \int \hat{v}(x) dx = \frac{v_{\max} \ell}{15} (3x^5 - 10x^3 + 15x + 8) \quad (3.6.3)$$

Le débit à l'intérieur de la cavité est caractérisé par le maximum de la fonction de courant, $\tilde{\psi}_{\max}$. Le débit pariétal $\hat{\psi}_{\max}$, construit comme une perturbation de l'écoulement convectif de base, s'exprime en fonction de $\tilde{\psi}_{\max}$ sous la forme suivante :

$$\hat{\psi}_{\max} = \frac{16 v_{\max} \ell}{15} = v_d |\tilde{\psi}_{\max}| \quad (3.6.4)$$

où v_d représente le rapport du flux interfacial au flux convectif.

Ainsi que nous l'avons vu au paragraphe (3.5), l'écoulement convectif de base a été déterminé de façon analytique par différents auteurs (Gershuni, Hart, Klosse, Ullersma, Bejan, Tien) pour le régime où le gradient thermique au milieu de la cavité gouverne l'écoulement dans tout le domaine. Ces solutions analytiques conduisent à l'expression suivante pour les valeurs maximales de la fonction de courant :

$$\tilde{\psi}_{\max} = -\frac{Ra_{eq}}{16} \frac{\ell^4}{24} \quad (3.6.5)$$

Dans le cas d'un gaz pur, le nombre de Rayleigh équivalent Ra_{eq} s'exprime en fonction du nombre de Rayleigh thermique, sous la forme suivante : $Ra_{eq} = Ra_T \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_m$ (m : milieu de la cavité).

Dans le cas d'un mélange binaire, il y a une correspondance entre Ra_{eq} , Ra_T et le nombre de Rayleigh solutal Ra_M :

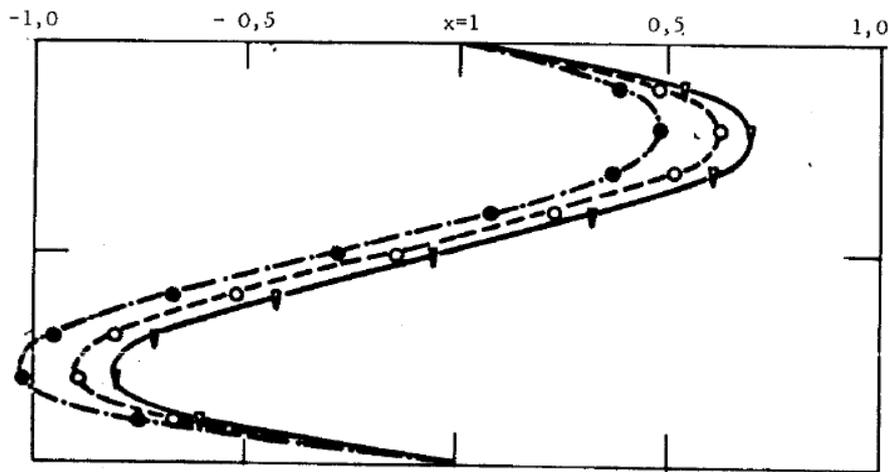
$$Ra_{eq} = Ra_T \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_m + \frac{Ra_M}{Le} \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)_m \quad (3.6.6)$$

La fonction de courant et la vitesse du flux interfacial ont donc pour expressions respectives

$$\hat{\psi}(x) = -v_d \frac{Ra_{eq}}{6144} \ell^4 (3x^5 - 10x^3 + 15x + 8) \quad (3.6.7)$$

$$\hat{v}(x) = \frac{5}{2048} v_d Ra_{eq} \ell^3 (x^2 - 1)^2 \quad (3.6.8)$$

avec $v_d > 0$. la figure 6.1.1 donne \hat{v} et $\hat{\psi}$ au milieu de la cavité pour différents v_d .



profil de $v(x,0)$

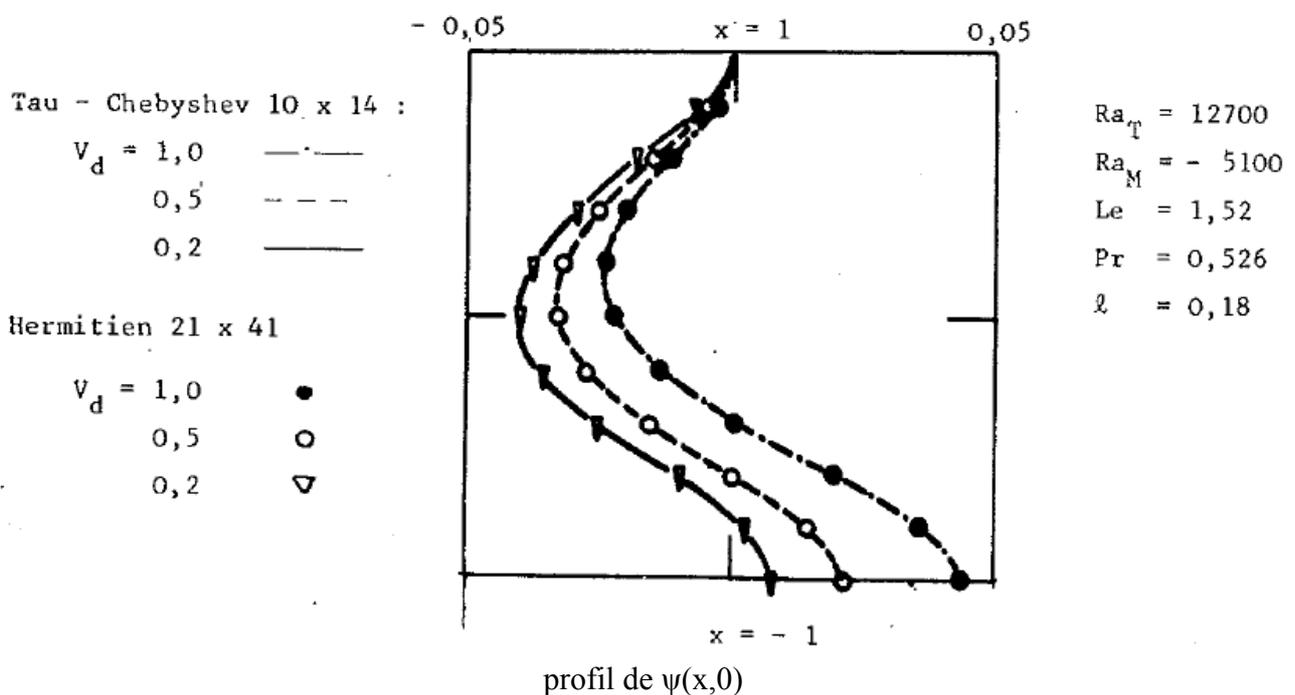


Fig. 6.1.1. profils de la vitesse et de la fonction de courant au milieu de la cavité pour différents flux interfaciaux

3.6.3. Modèle de Fick du flux pariétal

Si l'on tient compte du flux de diffusion de l'espèce A dans le gaz inerte B, que l'on suppose stagnant aux parois actives, on peut obtenir un modèle de conditions aux limites que la vitesse totale \vec{v} .
 Considérons à cet effet le flux total de masse :

$$\vec{n} = \vec{n}_A + \vec{n}_B = \bar{\rho} \vec{v} = \bar{\rho}_A \vec{v}_A + \bar{\rho}_B \vec{v}_B \quad (3.6.9)$$

Or aux parois actives, le composant inerte B est supposé stagnant, donc $\vec{n}_B = \bar{\rho}_B \vec{v}_B = 0$. On admet donc qu'aux parois actives, le flux total est égal au flux de l'espèce A :

$$\bar{\rho} \vec{v} = \bar{\rho}_A \vec{v}_A \quad (3.6.10)$$

Or d'après la loi de Fick :

$$\vec{n}_A = \bar{p}_A \vec{v}_A = \bar{p}_A \vec{v} - \bar{p} \bar{D}_{AB} \text{grad } \bar{W}_A \quad (3.6.11)$$

d'où l'expression de la vitesse moyenne massique aux parois actives :

$$\vec{v} = - \frac{\bar{D}_{AB}}{1 - \bar{W}_A} \text{grad } \bar{W}_A \quad (3.6.12)$$

D'après l'hypothèse selon laquelle la vitesse aux parois n'a qu'une composante suivant \bar{y} , cette expression devient :

$$\bar{v}(\bar{x}, +H) = - \frac{\bar{D}_{AB}}{1 - \bar{W}_2} \left(\frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{y}} \right) (\bar{x}, +H) \quad (\text{source}) \quad (3.6.13)$$

$$\bar{v}(\bar{x}, -H) = - \frac{\bar{D}_{AB}}{1 - \bar{W}_1} \left(\frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{y}} \right) (\bar{x}, -H) \quad (\text{puits}) \quad (3.6.14)$$

Avec le système d'adimensionnement adopté, les équations précédentes se traduisent par les équations en variables réduites :

$$v(x, -1) = - \frac{1}{Le} \frac{1}{E+1} \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right) (x, -1) \quad (3.6.15)$$

$$v(x, +1) = - \frac{1}{Le} \frac{1}{E-1} \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right) (x, +1) \quad (3.6.16)$$

avec $W(x, \pm 1) = \pm 1$, et où E est un paramètre qui résulte de l'adimensionnement et qui s'exprime ainsi :

$$E = \frac{1 - \frac{\bar{W}_2 + \bar{W}_1}{2}}{\frac{\bar{W}_2 - \bar{W}_1}{2}} \quad (3.6.17)$$

La relation au puits (3.6.15) est complétée par un facteur de normalisation basé sur la conservation du débit entre la source et le puits.

3.6.4. « Paramètre de sublimation » E et nombre de Péclet

le paramètre E qui est lié aux valeurs prises par les fractions massiques aux parois actives, peut être exprimé à l'aide des valeurs prises par les pressions partielles aux parois actives.

En effet, si \bar{p}_A et \bar{p}_B désignent respectivement les pressions partielles de A et de B, alors, pour un gaz parfait :

$$\bar{p} = \bar{p}_A + \bar{p}_B \quad (\text{loi de Dalton}) \quad (3.6.18)$$

$$\bar{W}_A = \frac{\bar{p}_A}{\bar{p}_B} \frac{\bar{M}_A}{\bar{M}_B} \left[1 + \frac{\bar{p}_A}{\bar{p}} \left(\frac{\bar{M}_A}{\bar{M}_B} - 1 \right) \right]^{-1} \quad (3.6.19)$$

où la pression totale \bar{p} est supposée constante. On obtient donc :

$$E = \frac{1 - (\bar{W}_2 + \bar{W}_1)/2}{(\bar{W}_2 - \bar{W}_1)/2} = \frac{1 + (1 - \bar{W}_2)/(1 - \bar{W}_1)}{1 - (1 - \bar{W}_2)/(1 - \bar{W}_1)}$$

c'est-à-dire, compte tenu de la relation (3.6.19) :

$$E = \frac{1 + \frac{\bar{p}_{B2}}{\bar{p}_{B1}}}{1 - \frac{\bar{p}_{B2}}{\bar{p}_{B1}}} - 2 \frac{\frac{\bar{p}_{B2}}{\bar{p}} \left(\frac{\bar{M}_A}{\bar{M}_B} - 1 \right)}{\frac{\bar{M}_A}{\bar{M}_B} \left(1 - \frac{\bar{p}_{B2}}{\bar{p}_{B1}} \right)} \quad (3.6.20)$$

Remarque : $\bar{p}_{B2} < \bar{p}_{B1}$ donne $E > 0$.

(i) **Dans le cas où** $\bar{M}_A = \bar{M}_B$, seul reste le premier terme de (3.6.20) et dans ce cas, on peut corrélérer le paramètre E avec une vitesse caractéristique d'un modèle unidimensionnel de la croissance cristalline par transport physique en phase vapeur, ou PVT (Greenwell et al, 1981). En effet, dans ce modèle, le gaz inerte B est supposé stagnant dans toute la cavité, et l'agent de transport A est supposé diffuser à travers lui selon une vitesse unidirectionnelle $\bar{v}(\bar{x})$ parallèle à $O\bar{y}$. De sorte que l'on a :

$$\bar{\rho} \bar{v}(\bar{x}) = \bar{\rho}_A \bar{v} - \bar{\rho} \bar{D}_{AB} \frac{d\bar{W}_A}{d\bar{y}}(\bar{y})$$

dans toute la cavité, soit encore :

$$\bar{v}(\bar{x}) d\bar{y} = -\bar{D}_{AB} \frac{d\bar{W}_A}{1 - \bar{W}_A(\bar{y})}$$

ce qui montre que \bar{v} ne doit pas dépendre aussi de \bar{x} ; d'où en intégrant, \bar{v} étant constante et notée $-\bar{v}^*$:

$$\bar{v} \int_{-H}^H d\bar{y} = -2H\bar{v}^* = \bar{D}_{AB} \ln \frac{1 - \bar{W}_A(H)}{1 - \bar{W}_A(-H)} \quad (3.6.21)$$

donc $\bar{v}^* > 0$ car $\bar{W}_A(H) > \bar{W}_A(-H)$.

On introduit ainsi le **nombre de Péclet solutal** :

$$Pe_M = \frac{2H\bar{v}^*}{\bar{D}_{AB}} \quad (3.6.22)$$

qui, dans le cas du modèle PVT à une dimension, donne une relation entre une vitesse caractéristique de diffusion \bar{v}^* et le rapport des pressions partielles du gaz inerte B aux parois actives :

$$Pe_M = \frac{2H\bar{v}^*}{\bar{D}_{AB}} = -\ln \frac{1 - \bar{W}_2}{1 - \bar{W}_1} = \ln \left(\frac{\bar{W}_{B1}}{\bar{W}_{B2}} \right), \text{ soit encore :}$$

$$Pe_M = \ln \left(\frac{\bar{p}_{B1}}{\bar{p}_{B2}} \right) \quad (3.6.23)$$

puisque $\bar{M}_A = \bar{M}_B$.

Dans le modèle PVT bidimensionnel, on peut alors associer A à un nombre de Péclet solutal Pe_M basé sur le rapport des pressions partielles de B aux parois actives qui permettrait d'introduire une vitesse caractéristique fictive, égale, dans ce modèle, par définition à :

$$\bar{v}^* = \frac{\bar{D}_{AB}}{2H} \ln \left(\frac{\bar{p}_{B1}}{\bar{p}_{B2}} \right)^{-1} \quad (3.6.24)$$

E étant égal à :

$$E = \frac{1 + \bar{p}_{B2}/\bar{p}_{B1}}{1 - \bar{p}_{B2}/\bar{p}_{B1}} = \frac{\exp Pe_M + 1}{\exp Pe_M - 1} \quad (3.6.25)$$

dans le cas où $\bar{M}_A = \bar{M}_B$.

Le modèle unidimensionnel de la PVT permet d'évaluer le champ de fraction massique dans la cavité. En effet, de :

$$-\bar{v}^*(\bar{x})d\bar{y} = -\bar{D}_{AB} \frac{d\bar{W}_A}{1 - \bar{W}_A(\bar{y})}$$

on tire :

$$-\bar{v}^* \int_{-H}^{\bar{y}} d\bar{y} = -\bar{v}(\bar{y}+H) = \bar{D}_{AB} \ln \frac{1 - \bar{W}_A(\bar{y})}{1 - \bar{W}_A(-H)}$$

En introduisant la fraction massique adimensionnée W, par :

$$\bar{W}_A = \frac{1}{2}(\bar{W}_2 - \bar{W}_1) \cdot W + \frac{\bar{W}_2 + \bar{W}_1}{2} \quad (3.6.26)$$

et l'ordonnée adimensionnée $y = \bar{y}/H$, on obtient :

$$W = \frac{1 + \exp(-Pe_M)}{1 - \exp(-Pe_M)} - \frac{2}{1 - \exp(-Pe_M)} \exp\left(-\frac{1}{2}Pe_M(y+1)\right) \quad (3.6.27)$$

Pour de faibles nombres de Péclet solutaux, qui correspondent à des valeurs très voisines pour les pressions partielles de B aux parois actives, on effectue un développement limité :

$$\exp(-Pe_M) \approx 1 - Pe_M$$

qui conduit à l'expression approchée de W :

$$W \approx y \quad (3.6.28)$$

(ii) **Dans le cas où** $\bar{M}_A > \bar{M}_B$, le coefficient E contient un terme contenant $\bar{p}, \bar{p}_{B1}, \bar{p}_{B2}$ et \bar{M}_A/\bar{M}_B , qui se soustrait du terme correspondant au cas $\bar{M}_A = \bar{M}_B$. Ceci montre que dans le cas $\bar{M}_A > \bar{M}_B$, le flux dû à la sublimation à la source ne dépend plus seulement des valeurs aux limites de la pression partielle \bar{p}_B du composant le plus léger, mais dépend aussi du rapport des masses et de la pression totale. Dans ce cas, E est plus petit que pour le cas $\bar{M}_A = \bar{M}_B$ et donc la vitesse à la source et au puits est plus proche en ordre de grandeur de la vitesse au centre et conditionne un régime convectif. Si l'on veut introduire une vitesse caractéristique \hat{v}^* nous définissons un nombre de Péclet solutal tel que :

$$Pe_M^* = \frac{2H\hat{v}^*}{\bar{D}_{AB}} = \ln \frac{1 - \bar{W}_1}{1 - \bar{W}_2} \quad (3.6.29)$$

qui diffère de $Pe_M = \ln(\bar{p}_{B1}/\bar{p}_{B2})$ correspondant au cas $\bar{M}_A = \bar{M}_B$, puisque ici $\bar{M}_A > \bar{M}_B$. dans le cas $\bar{M}_A > \bar{M}_B$ on a donc :

$$Pe_M^* = \ln(\bar{W}_{B1}/\bar{W}_{B2})$$

Comme :

$$\bar{p}_A = \bar{p} \bar{W}_A (\bar{M}_A / \bar{M}_B - \bar{W}_A (\bar{M}_A / \bar{M}_B - 1))^{-1}$$

$$\bar{p}_B = \bar{p} \bar{W}_B (\bar{M}_A / \bar{M}_B) (\bar{W}_B (\bar{M}_A / \bar{M}_B - 1) + 1)^{-1}$$

alors :

$$\bar{W}_B = (\bar{p}_B / \bar{p}) (\bar{M}_A / \bar{M}_B - (\bar{p}_B / \bar{p}) (\bar{M}_A / \bar{M}_B - 1))^{-1}$$

et par suite le nombre de Péclet Pe_M^* du cas $\bar{M}_A > \bar{M}_B$ se décompose en un nombre de Péclet Pe_M du cas $\bar{M}_A = \bar{M}_B$ et en un terme φ_{AB} lié à la différence des masses :

$$Pe_M^* = Pe_M + \varphi_{AB} \quad (3.6.30)$$

avec :

$$Pe_M = \ln(\bar{p}_{B1} / \bar{p}_{B2})$$

$$\varphi_{AB} = \ln \left(\frac{\bar{M}_A / \bar{M}_B - (\bar{p}_{B2} / \bar{p}) (\bar{M}_A / \bar{M}_B - 1)}{\bar{M}_A / \bar{M}_B - (\bar{p}_{B1} / \bar{p}) (\bar{M}_A / \bar{M}_B - 1)} \right)$$

On peut alors exprimer E à l'aide de Pe_M^* . Des égalités :

$$E = 2 \frac{1 - \frac{\bar{W}_2 + \bar{W}_1}{2}}{\bar{W}_2 - \bar{W}_1} = \frac{\bar{W}_{B1} / \bar{W}_{B2} + 1}{\bar{W}_{B1} / \bar{W}_{B2} - 1}$$

on a tiré :

$$E = \frac{\exp Pe_M^* + 1}{\exp Pe_M^* - 1} = \frac{\exp Pe_M \cdot \exp \varphi_{AB} + 1}{\exp Pe_M \cdot \exp \varphi_{AB} - 1} \quad (3.6.31)$$

qui se réduit à :

$$E = \frac{\bar{p}_{B1} / \bar{p}_{B2} + 1}{\bar{p}_{B1} / \bar{p}_{B2} - 1} \quad (3.6.32)$$

dans le cas $\bar{M}_A = \bar{M}_B$.

La vitesse caractéristique \hat{v}^* se décompose en :

$$\hat{v}^* = \frac{\bar{D}_{AB}}{2H} Pe_M^* = \frac{\bar{D}_{AB} Pe_M}{2H} + \frac{\bar{D}_{AB}}{2H} \varphi_{AB} \quad (3.6.33)$$

où apparaissent la vitesse caractéristique $\bar{v}^* = \bar{D}_{AB} Pe_M / 2H$ correspondant au cas $\bar{M}_A = \bar{M}_B$, et un terme $\bar{D}_{AB} \varphi_{AB} / 2H$ lié au cas $\bar{M}_A > \bar{M}_B$.

L'adimensionnement de \hat{v} permet d'écrire la vitesse caractéristique adimensionnelle :

$$v^* = \frac{1}{2} \frac{Pe_M^*}{Le} \quad (3.6.34)$$

Or on peut voir que, dans le cas où le nombre de Péclet Pe_M^* est faible, cette vitesse caractéristique est égale à la vitesse aux parois actives liée aux flux de sublimation à la source et de condensation au puits :

$$v(x, +1) = \frac{1}{Le} \frac{1}{E-1} = \frac{1}{Le} \frac{\exp Pe_M^* - 1}{2} \approx \frac{1}{2} \frac{Pe_M^*}{Le} = v^* \quad (\text{si } Pe_M^* \ll 1) \quad (3.6.35)$$

$$v(x, -1) = \frac{1}{Le} \frac{1}{E+1} = \frac{1}{Le} \frac{1 - \exp(-Pe_M^*)}{2} \approx \frac{1}{2} \frac{Pe_M^*}{Le} = v^* \quad (\text{si } Pe_M^* \ll 1) \quad (3.6.36)$$

Donc, en l'absence d'effets convectifs, la vitesse caractéristique v^* , dans le modèle 1-D est égale à la vitesse interfaciale liée à la sublimation ou à la condensation aux parois actives, lorsque le nombre de Péclet est petit, c'est-à-dire lorsque les pressions partielles aux parois actives ne sont pas très différentes. Dans ce cas, la vitesse est constante dans la cavité.

3.6.5. Importance relative des flux interfacial et convectif selon E

On peut chercher une condition sur les paramètres de similitude pour évaluer les cas où le flux interfacial est comparable au flux convectif.

Pour cela, on considère la vitesse caractéristique de l'écoulement convectif de base

$$\tilde{v} = \frac{Ra_{eq}}{16} \frac{\ell^3}{9\sqrt{3}} \quad (3.6.37)$$

avec $Ra_{eq} = Ra_T + \frac{Ra_M}{Le}$, et celle due au flux interfacial à la source :

$$v^* = \frac{1}{2} \frac{1 - \exp Pe_M}{Le} \quad (3.6.38)$$

Les effets du flux interfacial à la source deviendraient comparables à ceux du flux convectif, à partir du moment où : $v^* > \tilde{v}$, c'est-à-dire :

$$\frac{\exp Pe_M^* - 1}{2Le} \approx \frac{|Ra_{eq}| \ell^3}{16 \times 9\sqrt{3}} \quad (3.6.39)$$

Il existerait donc une valeur « critique » du nombre de Péclet solutal à partir de laquelle le régime d'écoulement serait un mélange des effets convectifs et diffusifs (régime mixte) :

$$Pe_M^{*crit} = \ln \left(\frac{|Ra_{eq}| \ell^3}{72\sqrt{3}} Le + 1 \right) \quad (3.6.40)$$

qui correspond à une valeur critique du nombre E :

$$E^{crit} = \frac{16 \times 9\sqrt{3}}{Le |Ra_{eq}| \ell^3} + 1$$

puisque $v^* = -\frac{1}{Le} \frac{1}{E-1}$ à la source.

Si les effets de la convection thermique sont négligeables devant ceux de la convection solutale, c'est-à-dire si $Ra_T \ll |Ra_M|/Le$, alors $Ra_{eq} = Ra_M/Le$, le nombre E critique devient :

$$E^{crit} = \frac{16 \times 9\sqrt{3}}{|Ra_M| \ell} + 1$$

et donc le changement de régime ne dépend plus du nombre de Lewis.

Le flux interfacial est prédominant sur le flux convectif si :

$$1 < E < \frac{16 \times 9\sqrt{3}}{Le |Ra_{eq}| \ell^3} + 1 = E^{crit} \quad (3.6.41)$$

3.6.6. Condition d'admissibilité sur la vitesse de sublimation pour un fluide de Boussinesq

La condition de compatibilité entre les conditions aux limites représentant la croissance cristalline et l'hypothèse d'un gaz de Boussinesq (hypothèse de quasi-incompressibilité) donnée en (3.3.21) ou (3.3.22), entraîne une limitation supérieure sur les valeurs que le paramètre E peut prendre. En effet, compte tenu des relations (3.3.9) donnant la masse molaire moyenne, et (3.3.17) donnant le coefficient d'expansion solutale α_A défini par rapport à l'espèce A, on peut écrire α_A sous la forme :

$$\alpha_A = \frac{\bar{M}_B - \bar{M}_A}{\bar{W}_{A0}(\bar{M}_B - \bar{M}_A) + \bar{M}_A}$$

où $\bar{W}_{A0} = (\bar{W}_{A2} + \bar{W}_{A1})/2$ est la fraction massique moyenne du gaz A. D'après la définition du paramètre E intervenant dans la vitesse de sublimation à la source et la vitesse de recondensation au puits, on peut exprimer l'écart des fractions massiques de A entre la source et le puits par :

$$\bar{W}_{A2} - \bar{W}_{A1} = 2(1 - \bar{W}_{A0})/E$$

De sorte que le nombre de Rayleigh solutal $Ra_M = \alpha_A \bar{\rho}_0 g (2H)^3 (\bar{W}_{A2} - \bar{W}_{A1}) / (\bar{\mu}_0 \bar{D}_{AB})$ peut s'exprimer à l'aide de \bar{W}_{A0} , E, \bar{M}_A et \bar{M}_B :

$$Ra_M = \frac{2\bar{\rho}_0 (2H)^3}{\bar{\mu}_0 \bar{D}_{AB}} \cdot \frac{(1 - \bar{W}_{A0})(\bar{M}_B - \bar{M}_A)}{E [\bar{W}_{A0}(\bar{M}_B - \bar{M}_A) + \bar{M}_A]}$$

L'inégalité $Ra_T \ll |Ra_M|/Le$ entraîne donc l'inégalité :

$$\beta(\bar{T}_2 - \bar{T}_1) < \frac{2|\bar{M}_B - \bar{M}_A|}{E} \cdot \frac{1 - \bar{W}_{A0}}{\bar{W}_{A0}(\bar{M}_B - \bar{M}_A) + \bar{M}_A}$$

Le gaz étant supposé parfait, $\beta = 1/\bar{T}_0$, on peut encore exprimer cette inégalité par :

$$1 < E < \frac{2\bar{T}_0}{\bar{T}_2 - \bar{T}_1} \cdot \frac{(1 - \bar{W}_{A0})|\bar{M}_B - \bar{M}_A|}{\bar{M}_A + \bar{W}_{A0}(\bar{M}_B - \bar{M}_A)} \quad (3.6.42)$$

Afin de rester dans les conditions de croissance cristalline et de quasi-incompressibilité, le paramètre E ne peut pas être aussi grand que l'on veut. Par suite les vitesses aux parois actives $v(x, \pm 1)$ ne peuvent pas être aussi petites que l'on veut une fois que l'on s'est fixé les températures à la source et au puits, la fraction massique moyenne de A et les masses molaires des espèces chimiques.

3.6.7. Relation de correspondance entre le modèle analytique et le modèle de Fick

Il est possible de trouver une correspondance entre le modèle analytique aux parois actives :

$$\hat{\psi}(x) = -v_d \frac{Ra_{eq}}{6144} \ell^4 (3x^5 - 10x^3 + 15x + 8)$$

$$\hat{v}(x) = \frac{5}{2048} v_d Ra_{eq} \ell^3 (x^2 - 1)^2$$

et le modèle physique de Fick :

$$v(x, \pm 1) = -\frac{1}{Le} \frac{1}{E \mp 1} \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right) (x, \pm 1)$$

La relation de correspondance va faire intervenir le taux de débit relatif v_d et le paramètre de sublimation ainsi que les paramètres habituels Ra_T , Ra_M , Le et ℓ . Elle est construite sur l'égalité des vitesses maximales dans chacun des modèles :

$$\hat{v}_{\max} = \hat{v}(0) = \frac{5}{2048} v_d Ra_{eq} \ell^3$$

Dans le cas où l'on note γ_w le gradient maximal de concentration aux parois :

$$v_{\max} = -\frac{1}{Le} \cdot \frac{\gamma_w}{E \pm 1} \quad (3.6.43)$$

Il en résulte de l'égalisation des deux expressions à la source :

$$v_d = -\frac{2048}{5(E-1)LeRa_{eq}\ell^3}, \quad y = \pm 1 \quad (3.6.44)$$

Au puits, ainsi que nous l'avons mentionné précédemment, le champ de vitesse est modulé en fonction de la conservation du débit à densité constante. De ce fait, l'équivalence s'exprime uniquement à la source.

On a vu au paragraphe précédent qu'il existait une valeur critique de E en-deçà de laquelle le régime dominant est diffusionnel. Les valeurs de E pour ce régime s'écrivent :

$$E = \left(1 + \frac{16 \times 9 \sqrt{3}}{Le |Ra_{eq}| \ell^3} \right) \alpha \quad (3.6.45)$$

où $\alpha < 1$. Il en résulte une expression de v_d indépendante des paramètres, qui s'écrit :

$$v_d = \frac{128}{45 \sqrt{3} \alpha} \quad (3.6.46)$$

soit $v_d = 1,642$ pour $\alpha = 1$.

3.7. Détermination des vitesses de chaque espèce

La vitesse calculée est la vitesse moyenne massique :

$$\vec{v} = \frac{\bar{\rho}_A \vec{v}_A + \bar{\rho}_B \vec{v}_B}{\bar{\rho}_A + \bar{\rho}_B} = \bar{W}_A \vec{v}_A + \bar{W}_B \vec{v}_B \quad (3.7.1)$$

Cette vitesse a pour composantes sur les axes :

$$\bar{u} = \bar{W}_A \bar{u}_A + \bar{W}_B \bar{u}_B \quad (3.7.2)$$

$$\bar{v} = \bar{W}_A \bar{v}_A + \bar{W}_B \bar{v}_B \quad (3.7.3)$$

Connaissant le champ de vitesse moyenne massique, le champ de fraction massique \bar{W}_A de l'espèce A la plus lourde, ainsi que son gradient en chaque point de la cavité, on peut déduire les vitesses (\bar{u}_A, \bar{v}_A) et (\bar{u}_B, \bar{v}_B) des espèces A et B.

En effet, soit \vec{n}_A et \vec{n}_B les flux massiques des espèces A et B : $\vec{n}_A = \bar{\rho}_A \vec{v}_A$ et $\vec{n}_B = \bar{\rho}_B \vec{v}_B$ qui se décomposent sur les axes \bar{x} et \bar{y} suivant :

$$n_{Ax} = \bar{\rho}_A \bar{u}_A = \bar{\rho}_A \bar{u} - \bar{\rho} \bar{D}_{AB} \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{x}}$$

$$n_{Ay} = \bar{\rho}_A \bar{v}_A = \bar{\rho}_A \bar{v} - \bar{\rho} \bar{D}_{AB} \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{y}}$$

et :

$$n_{Bx} = \bar{\rho}_B \bar{u}_B = \bar{\rho}_B \bar{u} - \bar{\rho} \bar{D}_{AB} \frac{\partial \bar{W}_B}{\partial \bar{x}}$$

$$n_{By} = \bar{\rho}_B \bar{v}_B = \bar{\rho}_B \bar{v} - \bar{\rho} \bar{D}_{AB} \frac{\partial \bar{W}_B}{\partial \bar{y}}$$

On en déduit :

$$\bar{u}_A = \bar{u} - \frac{1}{\bar{W}_A} \bar{D}_{AB} \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{x}} ; \quad \bar{v}_A = \bar{v} - \frac{1}{\bar{W}_A} \bar{D}_{AB} \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{y}} \quad (3.7.4)$$

$$\bar{u}_B = \bar{u} + \frac{1}{1-\bar{W}_A} \bar{D}_{AB} \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{x}} ; \quad \bar{v}_B = \bar{v} + \frac{1}{1-\bar{W}_A} \bar{D}_{AB} \frac{\partial \bar{W}_A}{\partial \bar{y}} \quad (3.7.5)$$

L'adimensionnement des relations (3.7.4) et (3.7.5) aboutit à :

$$u_A = u - \frac{1}{Le} \frac{1}{W+F} \frac{1}{\ell} \frac{\partial W}{\partial x} ; \quad v_A = v - \frac{1}{Le} \frac{1}{W+F} \frac{\partial W}{\partial y} \quad (3.7.6)$$

$$u_B = u + \frac{1}{Le} \frac{1}{E-W} \frac{1}{\ell} \frac{\partial W}{\partial x} ; \quad v_B = v + \frac{1}{Le} \frac{1}{E-W} \frac{\partial W}{\partial y} \quad (3.7.7)$$

où l'on a introduit le paramètre :

$$F = \frac{2}{\bar{W}_2 - \bar{W}_1} - E = \frac{2 \bar{W}_{A0}}{\bar{W}_2 - \bar{W}_1} \quad (3.7.8)$$

La définition de la vitesse moyenne s'écrit en fonction de la vitesse de chaque espèce par :

$$u = \frac{W+F}{E+F} u_A + \frac{E-W}{E+F} u_B$$

$$v = \frac{W+F}{E+F} v_A + \frac{E-W}{E+F} v_B$$

Les figures 3.7.1 A et B donnent un exemple des profils de $\bar{v}, \bar{v}_A, \bar{v}_B$. De la définition de E :

$$E = 2 \frac{1 - \bar{W}_{A0}}{\bar{W}_2 - \bar{W}_1}$$

et de la relation 3.7.8, on tire une nouvelle relation entre E et F ne faisant intervenir que la fraction massique moyenne de l'espèce transportée A ou du gaz inerte B :

$$F = E \frac{\bar{W}_{A0}}{1 - \bar{W}_{A0}} = E \frac{1 - \bar{W}_{B0}}{\bar{W}_{B0}} \quad (3.7.9)$$

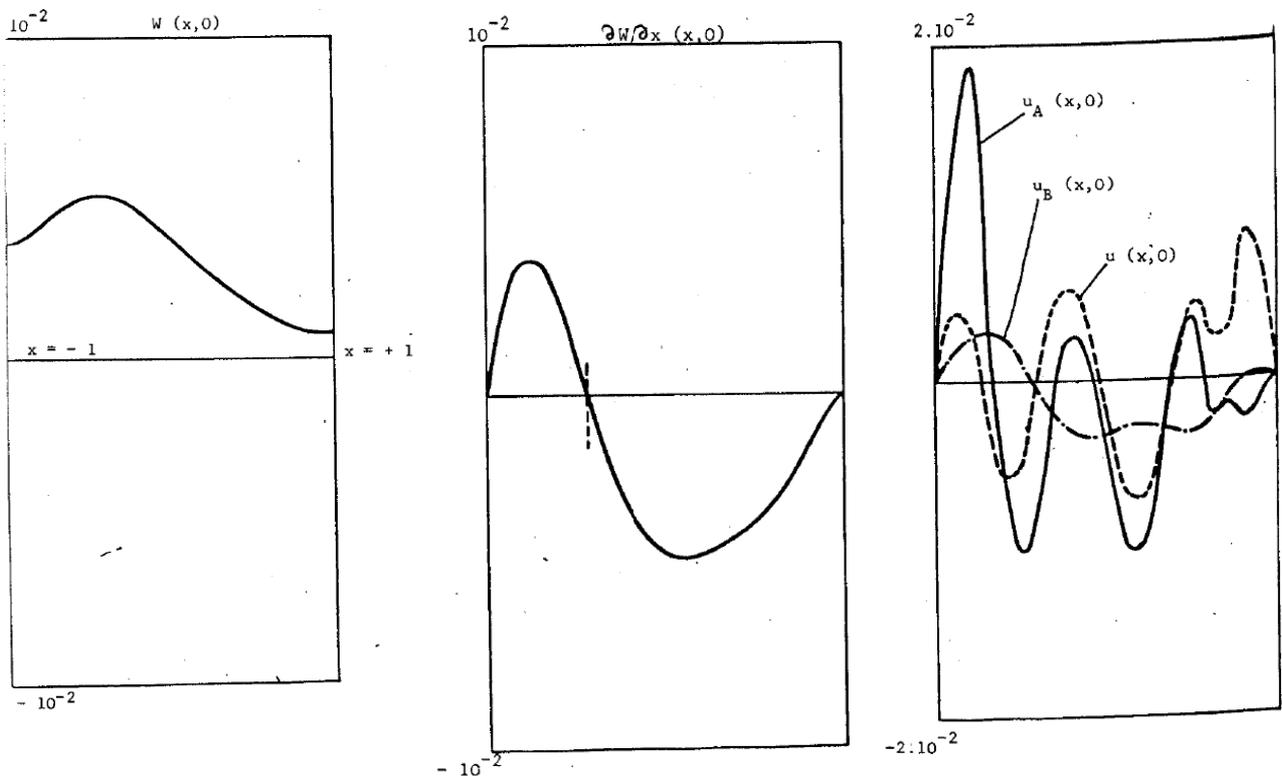
Si E représente le taux global de variation de la fraction massique dans l'enceinte, F représente l'influence de la fraction massique moyenne caractéristique.

Les valeurs limites obtenues pour E, au paragraphe 3.6.7 :

$$1 < E < \frac{2 \bar{T}_0}{\bar{T}_2 - \bar{T}_1} \cdot \frac{(1 - \bar{W}_{A0}) |\bar{M}_B - \bar{M}_A|}{\bar{M}_A + \bar{W}_{A0} (\bar{M}_B - \bar{M}_A)}$$

impliquent alors pour les valeurs limites de F :

$$\frac{\bar{W}_{A0}}{1 - \bar{W}_{A0}} < F < \frac{2\bar{T}_0}{\bar{T}_2 - \bar{T}_1} \cdot \frac{\bar{W}_{A0} |\bar{M}_B - \bar{M}_A|}{\bar{M}_A + \bar{W}_{A0} (\bar{M}_B - \bar{M}_A)} \quad (3.7.10)$$



$$Ra_T = 0, Ra_M = -6400, Le = Pr = 1, \ell = 0,25, E = 5, F = 10$$

Fig. 3.7.1A. Profils des vitesses partielles (composantes u) et fraction massique au milieu de la cavité

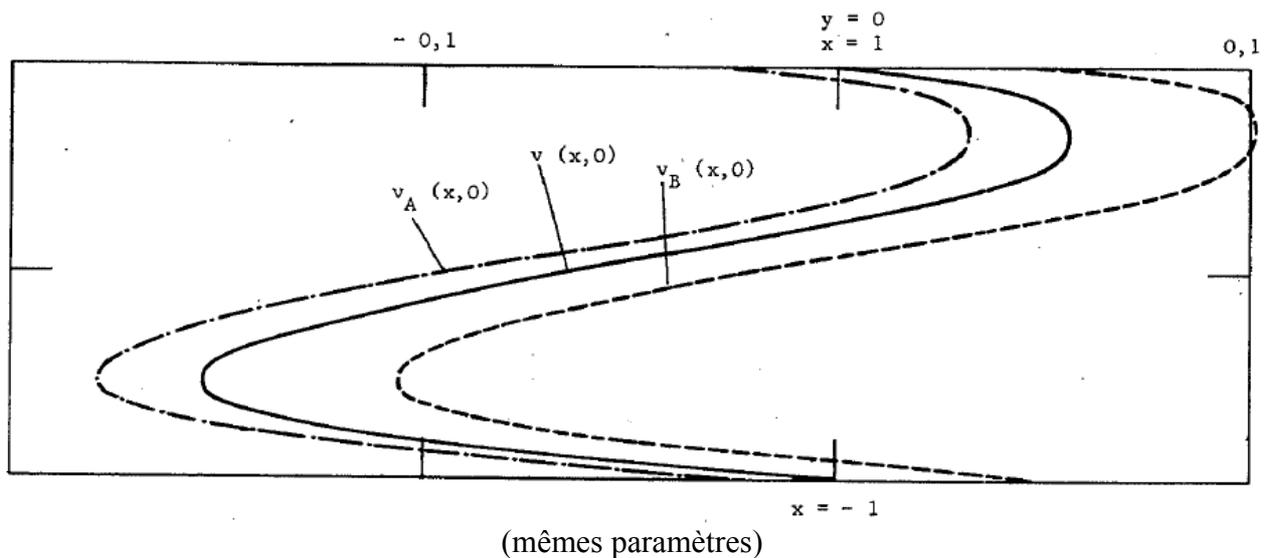


Fig. 3.7.1B. Profils des vitesses partielles (composantes v) au milieu de la cavité

Chapitre 4

Méthodes d'approximation numérique

4.1. Méthode spectrale Tau-Chebyshev : système d'équations différentielles

Les variables ζ , T , ψ et W sont approchées sur la base des polynômes de Chebyshev $T_n(x)$ tronqués à l'ordre (N) en x , et (M) en y , avec respectivement pour composantes a_{nm} , b_{nm} , c_{nm} , d_{nm} . On note $a_{nm}^{(ij)}$ la composante de la dérivée de ζ d'ordre i en x et j en y (Gottlieb et Orszag, 1977), et de façon analogue pour les autres variables.

La méthode Tau-Chebyshev appliquée aux équations s'écrit :

$$\left. \begin{aligned} \frac{da_{nm}}{dt} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\ell} e_{nm}^{(10)} + e_{nm}^{(01)} \right) - \text{Pr} \left(\frac{1}{\ell^2} a_{nm}^{(20)} + a_{nm}^{(02)} \right) - \frac{\text{Ra}_T \text{Pr}}{16} \left(\frac{\cos \Omega}{\ell} b_{nm}^{(10)} + \sin \Omega \cdot b_{nm}^{(01)} \right) \\ - \frac{\text{Ra}_M \text{Pr}}{16 \text{Le}} \left(\frac{\cos \Omega}{\ell} d_{nm}^{(10)} + \sin \Omega \cdot d_{nm}^{(01)} \right) = 0 \end{aligned} \right| \quad (4.1.1)$$

$$\frac{1}{\ell^2} c_{nm}^{(20)} + c_{nm}^{(02)} = a_{nm} \quad (4.1.2)$$

$$\frac{db_{nm}}{dt} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\ell} g_{nm}^{(10)} + g_{nm}^{(01)} \right) - \left(\frac{1}{\ell^2} b_{nm}^{(20)} + b_{nm}^{(02)} \right) = 0 \quad (4.1.3)$$

$$\frac{dd_{nm}}{dt} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\ell} h_{nm}^{(10)} + h_{nm}^{(01)} \right) - \frac{1}{\text{Le}} \left(\frac{1}{\ell^2} d_{nm}^{(20)} + d_{nm}^{(02)} \right) = 0 \quad (4.1.4)$$

où $0 \leq n \leq N-1, 0 < m < M-1$ et $e_{nm}^{(10)}, e_{nm}^{(01)}, g_{nm}^{(10)}, g_{nm}^{(01)}, h_{nm}^{(10)}, h_{nm}^{(01)}$ sont les coefficients des termes convectifs $u \frac{\partial}{\partial x}, v \frac{\partial}{\partial y}$.

Les conditions aux limites ferment le système pour les deux dernières composantes de rang $N-1, N$ et $M-1, M$ (Bondet de la Bernardie, 1980).

4.2. Traitement des conditions aux limites naturelles de type Dirichlet, Neuman, et mixte

(i) Imperméabilité et adhérence aux parois :

$$\sum_{n=0}^N c_{nm} (\pm 1)^n = 0, \quad \sum_{m=0}^M c_{nm} (\pm 1)^m = 0, \quad 0 \leq m \leq M, 0 \leq n \leq N \quad (4.2.1)$$

$$\sum_{n=0}^{N-1} c_{nm}^{(10)} (\pm 1)^n = 0, \quad \sum_{m=0}^{M-1} c_{nm}^{(01)} (\pm 1)^m = 0, \quad 0 \leq m \leq M-1, 0 \leq n \leq N-1 \quad (4.2.2)$$

(ii) Conditions sur le rotationnel des vitesses :

$$\sum_{n=0}^{N-2} (a_{nm} - c_{nm}^{(20)}) (\pm 1)^n = 0, \quad 0 \leq m \leq M-2 \quad (4.2.3)$$

$$\sum_{m=0}^{M-2} (a_{nm} - c_{nm}^{(02)}) (\pm 1)^m = 0, \quad 0 \leq n \leq N-2 \quad (4.2.4)$$

(iii) Parois actives isothermes :

Les conditions $T(x, \pm 1) = \pm 1$ se traduisent par :

$$\sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M b_{nm} T_n(x)(\pm 1)^m = \pm 1, \quad -1 \leq x \leq 1$$

qui s'écrit aux points de collocation $x_i = \cos(i\pi/N)$ et $y_j = \cos(j\pi/M)$ sous la forme du système suivant :

$$\sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M b_{nm} T_n(x_i)(\pm 1)^m = \pm 1, \quad 0 \leq i \leq N$$

En inversant ce système, on obtient :

$$\sum_{m=0}^M b_{nm}(\pm 1) = b_n^{*\pm}, \quad 0 \leq n \leq N \quad (4.2.5)$$

avec :

$$b_n^{*\pm} = \frac{2}{N \bar{c}_n} \sum_{i=0}^N \frac{1}{\bar{c}_i} T(x_i, \pm 1) T_n(x_i) \quad (4.2.6)$$

et : $T(x_i, \pm 1) = \pm 1$, $0 \leq i \leq N$ où : $\bar{c}_0 = \bar{c}_N = \bar{c}_M = 2$ et $\bar{c}_n = \bar{c}_m = 1$ pour $0 \leq n \leq N$, $0 \leq m \leq M$.

(iv) Parois terminales thermiquement conductrices :

La condition $\frac{\partial T}{\partial y}(\pm 1, y) = 1$, $-1 \leq y \leq 1$, permet de calculer les deux dernières composantes $b_{(N-1)0}$ et b_{N0} de la température aux parois terminales. Le calcul fait en annexe 1 fournit les solutions :

$$\begin{aligned} b_{(N-1)0} &= \frac{1-R_1}{(N-1)^2}; & b_{N0} &= -\frac{R_2}{N^2} & \text{si } N \text{ est pair} \\ b_{(N-1)0} &= \frac{-R_2}{(N-1)^2}; & b_{N0} &= \frac{1-R_1}{N^2} & \text{si } N \text{ est impair} \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned} R_1 &= \sum_{n=0}^{N-2} \sum_{n \text{ pair}} \frac{2}{c_n} \cdot \sum_{p=n+1}^{N-2} \sum_{p \text{ impair}} p b_{p0} \\ R_2 &= \sum_{n=1}^{N-2} \sum_{n \text{ impair}} 2 \cdot \sum_{p=n+1}^{N-2} \sum_{p \text{ pair}} p b_{p0} \end{aligned}$$

(v) Fractions massiques fixées aux parois actives :

Les conditions sur la fraction massique à la source et au puits $W(x, \pm 1) = \pm 1$ se traduisent par :

$$\sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M d_{nm} T_n(x)(\pm 1)^m = \pm 1, \quad -1 \leq x \leq 1$$

qui s'écrit aux points de collocation $x_i = \cos(i\pi/N)$ et $y_j = \cos(j\pi/M)$ sous la forme du système suivant :

$$\sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M d_{nm} T_n(x_i)(\pm 1)^m = \pm 1, \quad 0 \leq i \leq N$$

En inversant ce système on obtient :

$$d_n^{*\pm} = \frac{2}{N\bar{c}_n} \sum_{i=0}^N \frac{1}{\bar{c}_i} W(x_i, \pm 1) T_n(x_i)$$

et :

$$W(x_i, \pm 1) = \pm 1, \quad 1 \leq i \leq N$$

(vi) Parois terminales imperméables aux espèces chimiques :

La condition $\frac{\partial W}{\partial x}(\pm 1, y) = 0$ permet de calculer directement les deux dernières composantes d_{Nm} et d_{N-1m} de la fraction massique. Le calcul, fait en annexe 2, montre que l'on a :

$$\begin{aligned} d_{Nm} &= -\frac{S_2}{N^2}; \quad d_{N-1m} = -\frac{S_1}{(N-1)^2} && \text{si } N \text{ est pair} \\ d_{Nm} &= -\frac{S_1}{N^2}; \quad d_{N-1m} = -\frac{S_2}{(N-1)^2} && \text{si } N \text{ est impair} \end{aligned}$$

4.3. Traitements spécifiques en présence d'un flux débitant imposé

4.3.1. Modèle analytique

L'expression de la fonction de courant aux parois actives simulant la sublimation à la source et la recondensation au puits :

$$\hat{\psi}^*(x) = \psi(x, \pm 1) = v_d \frac{Ra_{eq}}{16} \frac{\ell^4}{384} (3x^5 - 10x^3 + 15x + 8) \quad (4.3.1)$$

conduit à décomposer l'équation de Poisson définissant le rotationnel des vitesses :

$$\frac{1}{\ell^2} c_{nm}^{(20)} + c_{nm}^{(02)} = a_{nm} \quad (4.3.2)$$

sous la forme :

$$\frac{1}{\ell^2} \hat{c}_{nm}^{(20)} + \hat{c}_{nm}^{(02)} = a_{nm} - \frac{1}{\ell^2} \hat{c}_{nm}^{(20)}$$

où les $\hat{c}_{nm}^{(20)}$, $\hat{c}_{nm}^{(02)}$ désignent les coefficients de la décomposition de Chebyshev des dérivées secondes de la fonction de courant $\hat{\psi}$ qui vérifie $\hat{\psi} = 0$ aux parois, et où les $\hat{c}_{nm}^{(20)}$ désignent les coefficients de la décomposition de Chebyshev de la dérivée seconde de $\hat{\psi}(x, y)$ vérifiant aux parois :

$$\nabla^2 \hat{\psi} = \zeta - \nabla^2 \hat{\psi}, \quad \nabla^2 = \frac{1}{\ell^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

La décomposition de $\hat{\psi}^*(x)$ sur la base des $T_k(x)$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_N(x) &= \lambda(3x^5 - 10x^3 + 15x + 8) = \sum_{n=0}^N \hat{c}_{n0} T_n(x) \\ &= \lambda(\hat{c}_{50} T_5(x) + \hat{c}_{30} T_3(x) + \hat{c}_{10} T_1(x) + \hat{c}_{00} T_0(x)) \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

où :

$$\left. \begin{aligned} T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x \\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x \\ T_1(x) &= x \\ T_0(x) &= 1 \end{aligned} \right| \quad (4.3.5)$$

avec $\lambda = v_d(\text{Ra}_{\text{eq}}/16)\ell^4/384$.

La dérivée seconde de $\hat{\psi}$ se décompose alors suivant les coefficients :

$$\frac{1}{\ell^2} \frac{\partial^2 \hat{\psi}}{\partial x^2} = \frac{60\lambda}{\ell^2} (x^3 - x) = \frac{15\lambda}{\ell^2} (T_3(x) - T_1(x))$$

d'où :

$$\left. \begin{aligned} \hat{c}_{30}^{(20)} &= 15\lambda \\ \hat{c}_{10}^{(20)} &= -15\lambda \end{aligned} \right| \quad (4.3.6)$$

L'équation de Poisson s'écrit donc :

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\ell^2} \tilde{c}_{10}^{(20)} + \tilde{c}_{10}^{(02)} &= a_{10} + 15\lambda/\ell^2 \\ \frac{1}{\ell^2} \tilde{c}_{30}^{(20)} + \tilde{c}_{30}^{(02)} &= a_{30} - 15\lambda/\ell^2 \\ \frac{1}{\ell^2} \tilde{c}_{nm}^{(20)} + \tilde{c}_{nm}^{(02)} &= a_{nm} \quad \text{si } n \neq 1, 3 \text{ et } m \neq 0 \end{aligned} \right| \quad (4.3.7)$$

4.3.2. Modèle physique (loi de Fick)

La condition aux parois actives :

$$v(x, \pm 1) = \hat{v}^\pm(x) = -\frac{1}{\text{Le}} \frac{1}{E - W(x, \pm 1)} \frac{\partial W}{\partial y}(x, \pm 1) \quad (4.3.8)$$

peut être traduite, dans l'approximation Tau-Chebyshev, de la façon suivante : à partir des coefficients de W_{NM} et $(\partial W/\partial y)_{NM}$, par FFT, les termes $W(x, y)$ et $\partial W(x, y)/\partial y$ sont calculés aux points de collocation $x_i = \cos(i\pi/N)$ et $y_j = \cos(j\pi/M)$. Le produit de leurs valeurs en ces points est effectué pour donner la valeur de la vitesse $v(x_L, y_j)$ en ces points. Une FFT inverse permet alors de calculer l'expansion $v_{NM}(x, y)$ sur les polynômes de Chebyshev à partir des valeurs $v(x_i, y_j)$, donc de calculer les coefficients de $\hat{v}_{NM}^\pm(x)$ aux parois actives. La fonction de courant y est alors calculée par des relations de récurrence sur ces coefficients, puis l'équation de Poisson définissant le rotationnel est résolue, connaissant les valeurs des coefficients de la fonction de courant aux parois actives.

L'équation de Poisson :

$$\nabla^2 \psi = \zeta \quad \text{où} \quad \nabla^2 = \frac{1}{\ell^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

admet la décomposition :

$$\nabla^2 \tilde{\psi} = \zeta - \nabla^2 \hat{\psi}$$

avec $\psi = \tilde{\psi} + \hat{\psi}$, $\tilde{\psi}$ vérifiant la condition $\tilde{\psi} = 0$ en $y = \pm 1$ et $\hat{\psi}$ correspondant à la condition (4.3.8) :

$$\hat{\psi} = -\ell \int \hat{v}^\pm dx \quad (4.3.9)$$

Si l'on désigne par χ_{nm} les coefficients de $\hat{\psi}$ sur la base des T_n , T_m , l'équation de Poisson se traduit par :

$$\frac{1}{\ell^2} \tilde{c}_{nm}^{(20)} + \tilde{c}_{nm}^{(02)} = a_{nm} - \frac{1}{\ell^2} \chi_{nm}^{(20)} \quad (4.3.10)$$

Il reste à calculer les coefficients $\chi_{nm}^{(20)}$ de la dérivée seconde de $\hat{\psi}$. La vitesse aux parois actives $\hat{v}^\pm(x) = v(x, \pm 1)$ se développe suivant :

$$\hat{v}^\pm(x) = - \sum_{n=0}^{N-1} \hat{\alpha}_n^{1\pm} T_n(x)$$

et la fonction de courant aux parois actives se développe par :

$$\hat{\psi}(x, \pm 1) = -\ell \int \hat{v}^\pm(x) dx = \ell \sum_{n=0}^N \hat{\alpha}_n^\pm T_n(x)$$

Entre les coefficients $\hat{\alpha}_n^{1\pm}$ et les coefficients $\hat{\alpha}_n^\pm$ de la fonction primitive existe la relation de récurrence (Gottlieb et Orszag, 1977) :

$$2n\hat{\alpha}_n^\pm = c_{n-1} \hat{\alpha}_{n-1}^{1\pm} - \hat{\alpha}_{n+1}^{1\pm}, \quad n > 1 \quad (4.3.11)$$

qui permet de calculer les $\hat{\alpha}_n^\pm$, les $\hat{\alpha}_n^{1\pm}$ étant déjà calculés par FFT inverse à partir des valeurs de $\hat{v}(x)$ aux points de collocation. D'où :

$$\left. \begin{aligned} \hat{\psi}_N(x, -1) &= \ell \sum_{n=0}^N \hat{\alpha}_n^- T_n(x) \\ \hat{\psi}_N(x, +1) &= \ell \sum_{n=0}^N \hat{\alpha}_n^+ T_n(x) \end{aligned} \right| \quad (4.3.12)$$

Le développement de $\hat{\psi}_{NM}(x, y)$ dans toute la cavité :

$$\hat{\psi}_{NM}(x, y) = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M \chi_{nm} T_n(x) T_m(y)$$

se calcule à partir des $\hat{\alpha}_n^-$ et $\hat{\alpha}_n^+$. En effet :

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_N(x, +1) &= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M \chi_{nm} T_n(x) T_m(+1) = \ell \sum_{n=0}^N \hat{\alpha}_n^+ T_n(x) = \sum_{n=0}^N \chi_{n0} T_n(x) + \sum_{n=1}^N \chi_{n1} T_n(x) \\ \hat{\psi}_N(x, -1) &= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M \chi_{nm} T_n(x) T_m(-1) = \ell \sum_{n=0}^N \hat{\alpha}_n^- T_n(x) = \sum_{n=0}^N \chi_{n0} T_n(x) - \sum_{n=1}^N \chi_{n1} T_n(x) \end{aligned}$$

d'où, par identification des coefficients :

$$\chi_{n0} + \chi_{n1} = \ell \hat{\alpha}_n^+ ; \quad \chi_{n0} - \chi_{n1} = \ell \hat{\alpha}_n^-, \quad 0 \leq n \leq N$$

qui conduit aux solutions :

$$\left. \begin{aligned} \chi_{n0} &= \frac{1}{2} \ell (\hat{\alpha}_n^+ + \hat{\alpha}_n^-) \\ \chi_{n1} &= \frac{1}{2} \ell (\hat{\alpha}_n^+ - \hat{\alpha}_n^-) \\ \chi_{nm} &= 0, \quad m > 1 \end{aligned} \right| \quad (4.3.13)$$

Le calcul des coefficients $\chi_{nm}^{(20)}$ de $\partial^2 \hat{\psi} / \partial x^2$ peut alors être effectué à partir des χ_{nm} :

$$\left(\frac{\partial^2 \hat{\psi}}{\partial x^2} \right)_{N-2, M} = \sum_{n=0}^{N-2} \sum_{m=0}^M \chi_{nm}^{(20)} T_n(x) T_m(y)$$

Les coefficients $\chi_{nm}^{(20)}$ se calculent en fonction des χ_{nm} suivant la relation (Gottlieb et Orszag, 1977) :

$$\chi_{nm}^{(20)} = \frac{1}{c_n} \sum_{p=n+2, p+n \text{ pair}}^N p(p^2 - n^2) \chi_{pm} \quad (4.3.14)$$

Or :

$$\begin{aligned} \chi_{pm} &= \frac{1}{2} \ell (\hat{\alpha}_p^+ + \hat{\alpha}_p^-), \quad m = 0 \\ \chi_{pm} &= \frac{1}{2} \ell (\hat{\alpha}_p^+ - \hat{\alpha}_p^-), \quad m = 1 \\ \chi_{pm} &= 0, \quad m > 1 \end{aligned}$$

Donc l'équation de Poisson s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\ell^2} c_{nm}^{(20)} + c_{nm}^{(02)} &= a_{n0} - \frac{1}{\ell} \frac{1}{c_n} \sum_{p=n+2, p+n \text{ pair}}^N p(p^2 - n^2) \frac{\hat{\alpha}_p^+ + \hat{\alpha}_p^-}{2} \quad (m = 0) \\ &= a_{n1} - \frac{1}{\ell} \frac{1}{c_n} \sum_{p=n+2, p+n \text{ pair}}^N p(p^2 - n^2) \frac{\hat{\alpha}_p^+ - \hat{\alpha}_p^-}{2} \quad (m = 1) \\ &= a_{nm} \quad (m > 1) \end{aligned} \quad (4.3.15)$$

4.3.3. Fonction de « lissage »

Afin de réduire les effets du phénomène de Gibbs (Gottlieb et Orszag, 1977) dus au modèle de vitesse pariétale lorsque $\partial W / \partial y \sim 1$ qui génèrent des oscillations numériques du profil de $v(x, \pm 1)$, on adapte l'expression de la loi de Fick :

$$v(x, \pm 1) = - \frac{1}{Le} \frac{1}{E + W(x, \pm 1)} \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right) (x, \pm 1)$$

de la façon suivante :

$$\tilde{v}(x) = v(x, \pm 1) \tanh(\alpha(\varepsilon)(1-x^2)^2) \quad (4.3.16)$$

où la fonction $\alpha(\varepsilon)$ est choisie de telle façon que :

$$\tanh(\alpha(\varepsilon)(1-x^2)^2) = 0,99, \quad \text{dès que : } -\varepsilon < x < \varepsilon$$

On trouve :

$$\tilde{v}(x) = v(x, \pm 1) \tanh\left(\frac{3,268}{(1-\varepsilon^2)^2} (1-x^2)^2\right) \quad (4.3.17)$$

Lorsque $\varepsilon \ll 1$ la vitesse aux parois actives n'est plus uniforme et varie fortement avec x . Si $\varepsilon < 1$ mais proche de 1 (0,9 par exemple), on observe une importante oscillation du profil de vitesse. Cependant les oscillations sont pratiquement éliminées, sauf aux bords, lorsque l'on choisit un plus grand nombre de composants spectraux (Fig. 4.3.1).

4.4. Détermination du nombre de degrés de liberté efficace pour la simulation de couches limites caractéristiques

4.4.1. Introduction. Dans le cas où l'on est confronté à la simulation de problèmes dans lesquels se

développent des écoulements de recirculation, de couches limites, etc., ce sont les couches limites qui fournissent la contrainte la plus forte sur le nombre de degrés de liberté à assurer pour une bonne représentation globale du phénomène.

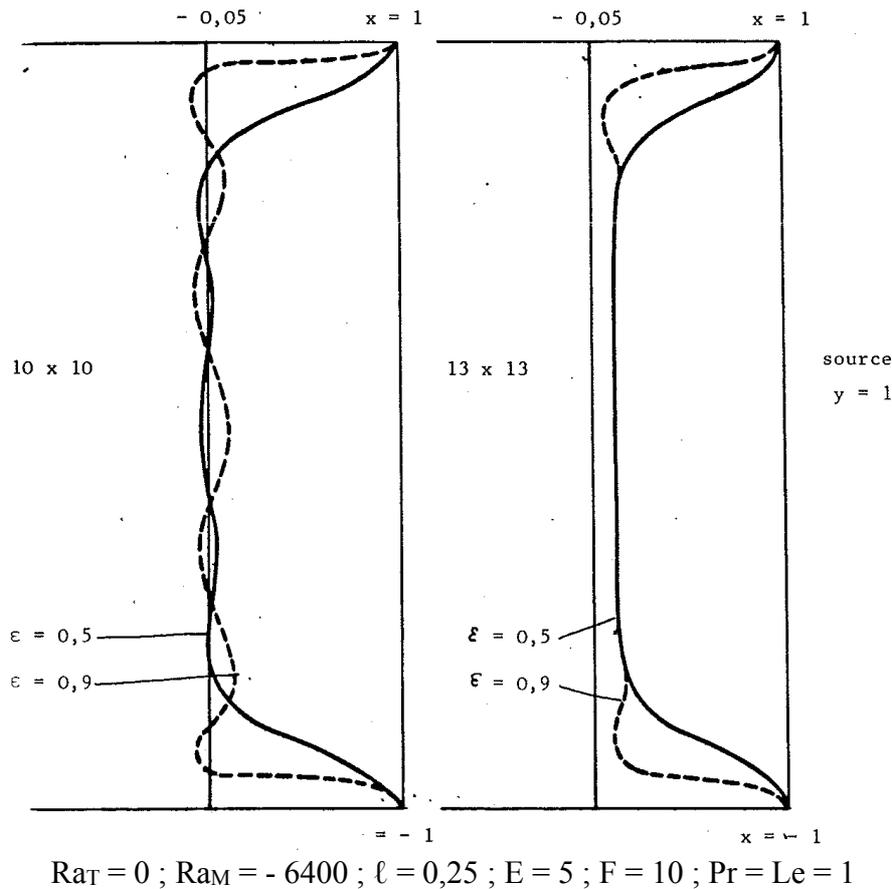


Fig. 4.3.1. Fonction de lissage

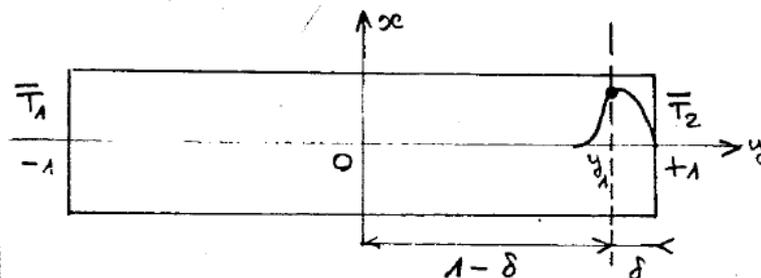


Fig. 4.4.1. Épaisseur caractéristique de la couche limite aux parois verticales

Nous avons recherché un critère pour déterminer le nombre de degrés de liberté efficace, que l'on a fait porter sur l'épaisseur caractéristique de la couche limite dans une solution de type Gill (1966) (3.5.12).

4.4.2. On considère que *pour obtenir une information numérique valable*, il faut qu'au moins un point de discrétisation ou de collocation soit contenu à l'intérieur du domaine de variation de la couche limite d'épaisseur δ (Fig. 4.4.1).

Le maillage induit par le choix de polynôme de Chebyshev pour fonction de base est constitué par les points de collocation :

$$x_i = \cos \frac{i\pi}{N}, y_j = \cos \frac{j\pi}{M}; 1 \leq i \leq i_{\max}, 1 \leq j \leq j_{\max}$$

Les points de collocation sont « concentrés » au voisinage des frontières. De ce fait, les termes non linéaires sont calculés dans le plan physique en ces points situés dans les zones de gradients. Il existe une valeur limite pour le nombre de modes de façon à ce qu'un point de collocation au moins soit dans la couche limite. Le premier point de collocation est :

$$y_1 = \cos \frac{\pi}{M}$$

S'il se trouve à une distance de la paroi δ_y correspondant à l'épaisseur de la couche limite, alors le nombre de modes M_c , dans la direction horizontale, est tel que :

$$\delta_y \sim 1 - \cos \frac{\pi}{M_c}$$

Dans le cas où M_c est assez grand, cette relation prend la forme approchée :

$$\delta_y \sim \frac{\pi^2}{2M_c^2}$$

Les études analytiques donnant une évaluation de l'épaisseur de la couche limite en fonction des paramètres de l'écoulement (Elder, 1965, Gill, 1966, Roux et al, 1980), fournit la relation :

$$\frac{\pi^2}{2M_c^2} \sim 2,4 \left(\frac{Ra_T}{\ell} \right)^{-1/4}$$

Par suite, le nombre de modes critiques M_c dans la direction horizontale est de l'ordre de :

$$M_c \sim \frac{\pi}{\sqrt{1,2}} \left(\frac{Ra_T}{\ell} \right)^{1/8} \quad (4.4.1)$$

et les solutions numériques fournies par l'approximation Tau-Chebyshev fourniront une solution numérique d'autant plus précise que M sera grand par rapport à M_c :

$$M \gg \frac{\pi}{\sqrt{1,2}} \left(\frac{Ra_T}{\ell} \right)^{1/8}$$

Dans le cas d'une approximation aux différences finies à pas constants, l'ordonnée du premier point de maillage correspondant à δ , permet de déterminer un nombre critique \tilde{M}_c de points de discrétisation, tel que :

$$\frac{1}{\tilde{M}_c} \sim \delta = 1,2 \left(\frac{Ra_T}{\ell} \right)^{-1/4}$$

soit :

$$\tilde{M}_c \sim \frac{1}{1,2} \left(\frac{Ra_T}{\ell} \right)^{1/4} < M_c \quad (4.4.2)$$

On remarque que pour un écoulement à Ra_T et ℓ donnés, la méthode Tau-Chebyshev fournit une résolution spatiale de la couche limite aux parois actives équivalente à celles d'une méthode aux différences finies avec un nombre nettement inférieur de dimensions (Fig. 4.4.2). Les méthodes spectrales Tau-Chebyshev semblent donc mieux adaptées que les méthodes aux différences finies, pour des études numériques de la couche limite aux parois actives. La simulation de l'apparition de tourbillons dans des zones non localisées reste néanmoins un problème puisque les points de collocation correspondent à une « maille » assez relâchée au cœur du domaine.

Ayant déterminé le degré de liberté minimal M_c nécessaire pour obtenir au moins un point de la couche limite aux parois actives, le choix du degré de liberté minimal N_c est alors imposé.

En effet, à une épaisseur δ_y dans la direction y

$$\delta_y = 1 - y_j \sim \frac{1}{2} \left(\frac{j\pi}{M} \right)^2$$

correspond une épaisseur δ_x dans la direction x , proche des parois terminales :

$$\delta_x = 1 - x_i \sim \frac{1}{2} \left(\frac{i\pi}{N} \right)^2$$

telle que :

$$\delta_x \sim \delta_y / \ell$$

D'où :

$$M/j \sim (N/i)\ell^{-1/2}$$

où il y a i points dans δ_y et j points dans δ_x .

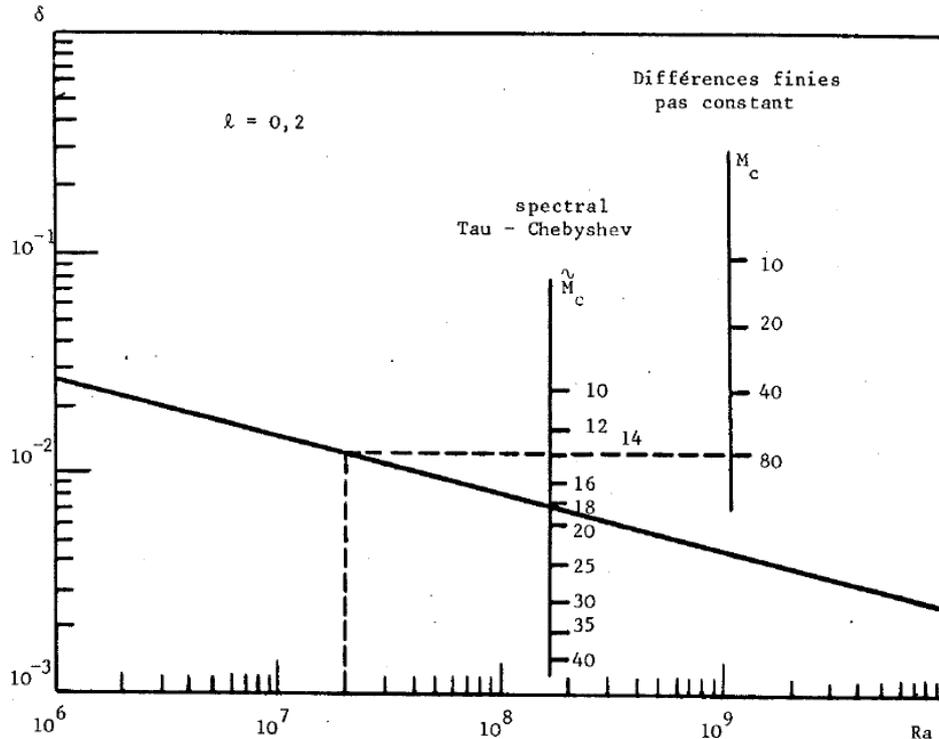


Fig. 4.4.2. Résolution spatiale de la couche limite aux parois verticales

Dans les cas de forts nombres de Rayleigh où l'on doit avoir une couche limite le long des parois verticales mais aussi le long des parois horizontales, laissant au centre une zone de fluide mort, on peut supposer en première approximation que les épaisseurs caractéristiques sont équivalentes suivant les deux directions. Il en découle alors une relation entre les nombres efficaces des composantes dans les deux directions, qui est la suivante : si $\delta_x \sim \delta_y / \ell$ alors

$$M_c \ell^{1/2} \sim N_c$$

4.5. Algorithmes de résolution

4.5.1. Résolution de l'équation de Poisson (Direct Poisson Solver)

La résolution de l'équation, avec des conditions homogènes ou non homogènes aux frontières, est effectuée en utilisant la méthode de diagonalisation matricielle (Haidvogel et Zang, 1979, Bondet de la Bernardie et al, 1980). L'efficacité de cette méthode directe a été récemment confirmée par rapport à d'autres méthodes, pseudo-spectrales et aux directions alternées ADI (Abboudi, 1982, Labrosse et al, 1982) pour $N < 1000$.

4.5.2. Évaluation des termes non linéaires (FFT)

Le calcul direct des termes non linéaires (par exemple $u \frac{\partial \zeta}{\partial x}$) pour des expressions de la forme :

$$e_{nm}^{(10)} = \frac{1}{c_n c_m} \sum_{p=-N}^N \sum_{q=-M}^M c_{|n-p|} c_{|m-q|} c_{|p|} c_{|q|} c_{|n-p||m-q|}^{(01)} a_{|p||q|}^{(10)} \quad (4.5.1)$$

peut être remplacé avantageusement par approximation pseudo-spectrale (Gottlieb et Orszag, 1977). La méthode pseudo-spectrale de résolution des équations de transport repose sur l'évaluation des termes non linéaires dans le plan physique au moyen des FFT. Des améliorations ont été apportées aux algorithmes classiques de Cooley-Tukey (1965) et Singleton (1969) pour accroître leur efficacité en particulier sur les calculateurs vectoriels (Temperton, 1979, Lhomme et al, 1980, 1982).

Les FFT mises au point par Lhomme permettent un gain de temps de calcul appréciable lorsqu'on évalue les termes non linéaires. À titre d'exemple, lorsqu'on effectue le même calcul sur IBM 3033, ordinateur scalaire classique, et sur CRAY 01, ordinateur vectoriel, avec les FFT de Singleton et un nombre de composantes *non* puissance de 2 ($N \neq 2^k$, courbe haute de coût des FFT de Singleton), le rapport de temps est de l'ordre de 5 ce qui correspond à un faible taux de vectorisation. Ce taux relatif peut être amélioré lorsqu'on utilise un nombre de composantes $N = 2^k$, il est alors de l'ordre de 10. Pour le même nombre de composantes, le rapport passe à 20 lorsqu'on utilise les FFT vectorisées de Lhomme et à 40 lorsqu'on utilise pleinement la FFT réalisée pour des nombres complexes.

Si l'on sait que dans le cas d'un calcul de convection naturelle 2D, le calcul des termes non linéaires se chiffre à 66% du temps nécessaire pour une étape temporelle lorsque $Pr \rightarrow \infty$ (une seule équation de transport), à 80% dans le cas où Pr est fini, et à plus de 86% dans le cas d'un mélange binaire, on réalise l'importance de ces algorithmes dans l'élaboration de codes spectraux efficaces.

Des comparaisons systématiques ont été réalisées sur ce point, en particulier en prenant les FFT de Temperton dont l'intérêt vient de ce qu'elles sont limitées aux nombres pairs de composantes seulement (Randriamampianina, 1984).

4.5.3. Optimisation

D'autres améliorations ont été également effectuées au niveau du calcul des coefficients de dérivation et de la résolution des équations de Poisson (ou de Helmholtz) avec la méthode de diagonalisation matricielle. Dans la version ancienne du code, $Pr = \infty$, ces étapes pourraient correspondre respectivement à 4% et à 20% du temps de calcul sur IBM 3033 et à 5% et 34% sur CRAY 01, du fait de leur formulation non vectorielle. Par la vectorisation ou l'utilisation d'algorithmes vectorisables, il a été possible de les ramener à seulement 1% et 5% sur CRAY 01. Pour une étape de temps dans le cas $Pr = \infty$, le temps total de calcul a été divisé par 16 entre IBM et CRAY (c'est 3 à 4 fois le rapport de vitesse entre les deux ordinateurs) du fait de la vectorisation. L'évaluation des termes non linéaires (l'équation de transport pour $Pr = \infty$) correspond à 50% du temps, le Poisson Solver à 14% et le calcul des dérivations à 2,5%.

4.6. Schémas temporels et méthode « False Transient »

4.6.1. Schéma d'Adams-Bashforth

L'évaluation optimale des termes non linéaires au moyen des FFT implique l'utilisation d'un schéma explicite pour leur avancement dans le temps (ou pour une résolution avec relaxation). Le schéma d'Adams-Bashforth précis à l'ordre $O(\Delta t^2)$ est très intéressant de ce point de vue et même lorsqu'il est appliqué aussi aux termes de diffusion (Bontoux et al, 1981). Dans certains cas ($\ell > 1$), il permet d'obtenir la convergence avec des pas de temps correspondant au critère de stabilité le moins contraignant ($[\text{Min}(N.M)]^2 \Delta t_c \sim 1$).

$$a^{k+1} = a^k + \Delta t \left[\frac{3}{2} \left(\frac{da}{dt} \right)^k - \frac{1}{2} \left(\frac{da}{dt} \right)^{k-1} \right]$$

4.6.2. Stabilité numérique et convergence

Dans le cas de cavités allongées $\ell < 1$, les pas de temps correspondant au critère de stabilité vérifient la condition que nous avons établie par expérimentation numérique.

Dans l'optique où le nombre de composantes nécessaires n'est pas trop grand (inférieur à 20×20), la méthode actuelle repose sur le schéma d'Adams-Bashforth :

$$[\text{Min}(N.M)]^2 \Delta t_c / \ell^2 \sim \text{Pr}$$

Néanmoins, les conditions de stabilité ont pu, par ailleurs, être considérablement améliorées en utilisant une méthode semi-implicite comportant un schéma de Crank-Nicolson pour les termes de diffusion. Dans le cas de la convection naturelle, le pas de temps a pu ainsi être augmenté dans un rapport d'au moins 20 pour l'équation d'énergie, ce schéma semi-implicite n'entraînant que la résolution supplémentaire d'équations de type Helmholtz avec la même méthode de diagonalisation matricielle (Élie et al, 1983, Randriamampianina, 1984).

Dans le cas où l'on recherche les solutions stationnaires, la méthode « false transient » (Mallinson et De Vahl Davis, 1973) consistant à utiliser, comme paramètre de relaxation, les pas de temps optimaux adaptés à chacune des équations, permet de réduire le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence. Sur la Fig. 4.6.1 ont été représentés les nombres d'itérations à la convergence (taux de convergence $\sim 10^{-6}$). Les courbes obtenues pour $\ell > 1$ et $\ell < 1$ mettent en évidence des différences significatives entre les pas de temps caractéristiques Δt_ζ , Δt_T et Δt_w . Il apparaît que la diminution de ℓ rend la convergence plus difficile. Le pas de temps sur ζ paraît être singulièrement réduit.

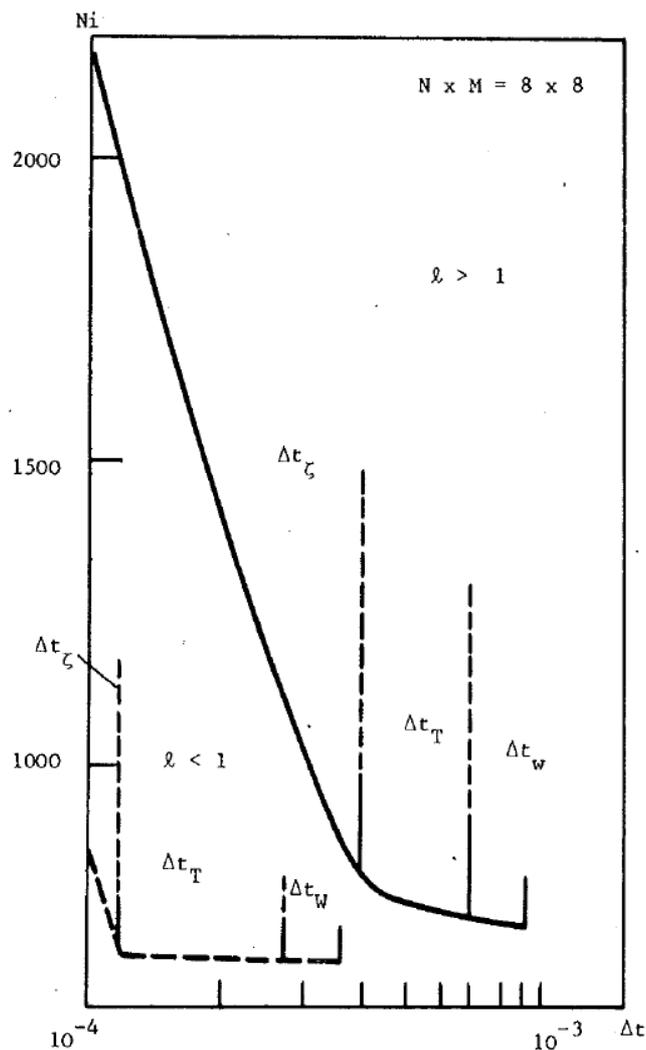


Fig. 4.6.1. Méthode « False Transient »

On a représenté sur la Fig. 4.6.2 l'évolution du résidu pour $\ell = 0,5$ avec les pas de temps optimaux et pour les conditions initiales nulles. Le résidu Res_N tombe à 10^{-3} au bout d'environ 900 itérations.

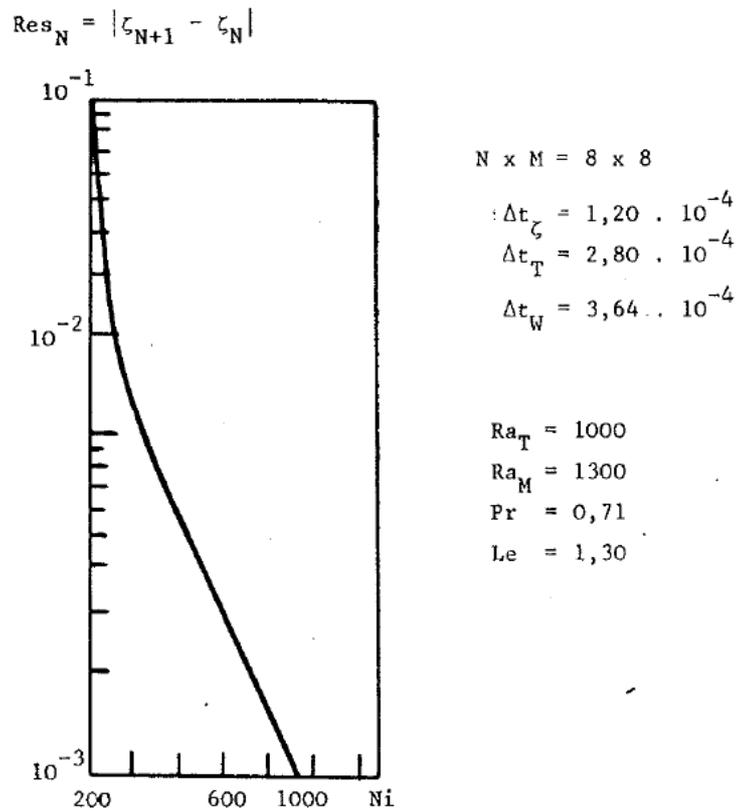


Fig. 4.6.2. Évaluation du résidu au cours des itérations

la convergence de la solution Nu_x est mise en évidence sur la Fig. 4.6.3 lorsqu'on augmente le nombre de composantes de l'approximation.

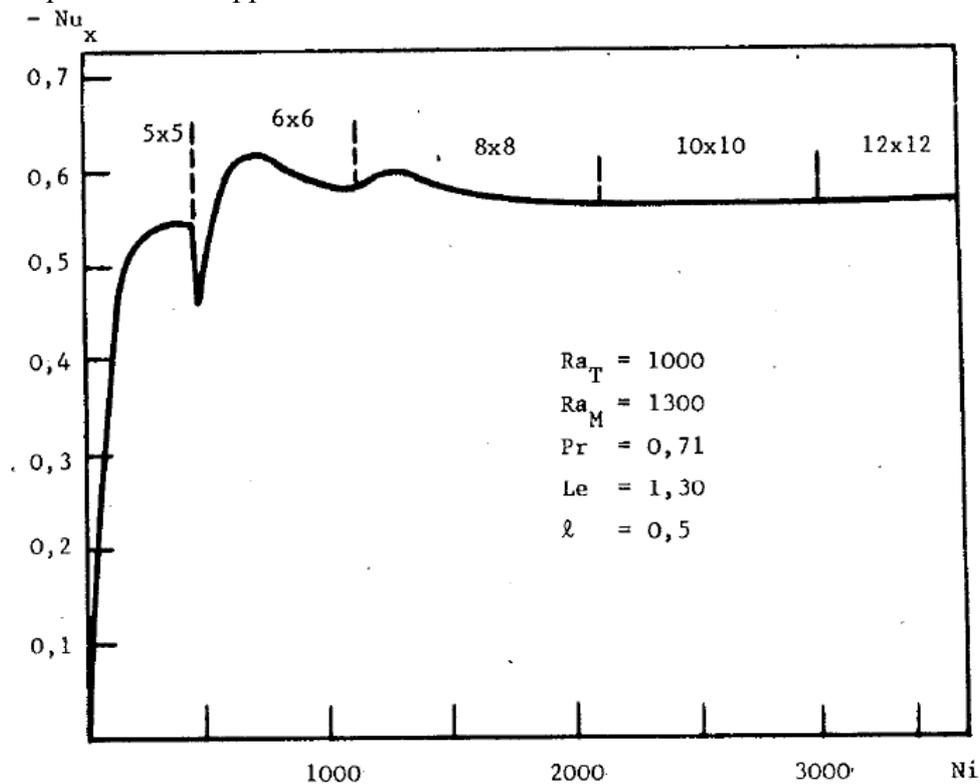


Fig. 4.6.3. Convergence du nombre de Nusselt Nu_x

4.6.3. Conditions initiales et accélération de la convergence

Pour des nombres de Rayleigh pas très élevés, le régime est du type conductif (cf. paragraphe 3.5). On peut alors accélérer la convergence vers la solution stationnaire, en prenant comme condition initiale la fonction de courant sous la forme (3.5.22).

Afin de raccorder la solution dans le cœur aux conditions physiques sur les frontières, on a utilisé la fonction de raccordement suivante :

$$\varepsilon(y) = \tanh \left[\frac{C_H}{\ell^2(1-\ell)^2} \cdot \frac{(1-y^2)^2}{16} \right] \quad (4.6.1)$$

On a alors pour condition initiale :

$$\psi(x, y) = -\frac{Ra_{eq} \ell^4}{384} (x^2 - 1)^2 \cdot \varepsilon(y)$$

Il est possible d'adapter C_H de façon à ce que $\varepsilon(y) \sim 1$ sur la partie centrale de la cavité, soit à une distance des parois égale à 2ℓ : $-1+2\ell < y < 1-2\ell$.

Si l'on fixe : $\varepsilon(2\ell-1) = \varepsilon(1-2\ell) = 0,99$, alors :

$$C_H = 3,268$$

On a représenté sur la fig. 4.6.4 la valeur de la fonction de courant du milieu de la cavité, ψ_m , en fonction du temps, pour des paramètres fixés à : $Ra_T = 10^3$, $Ra_M = 1,3 \cdot 10^3$, $Pr = 0,71$, $Le = 1,3$, $\ell = 0,2$.

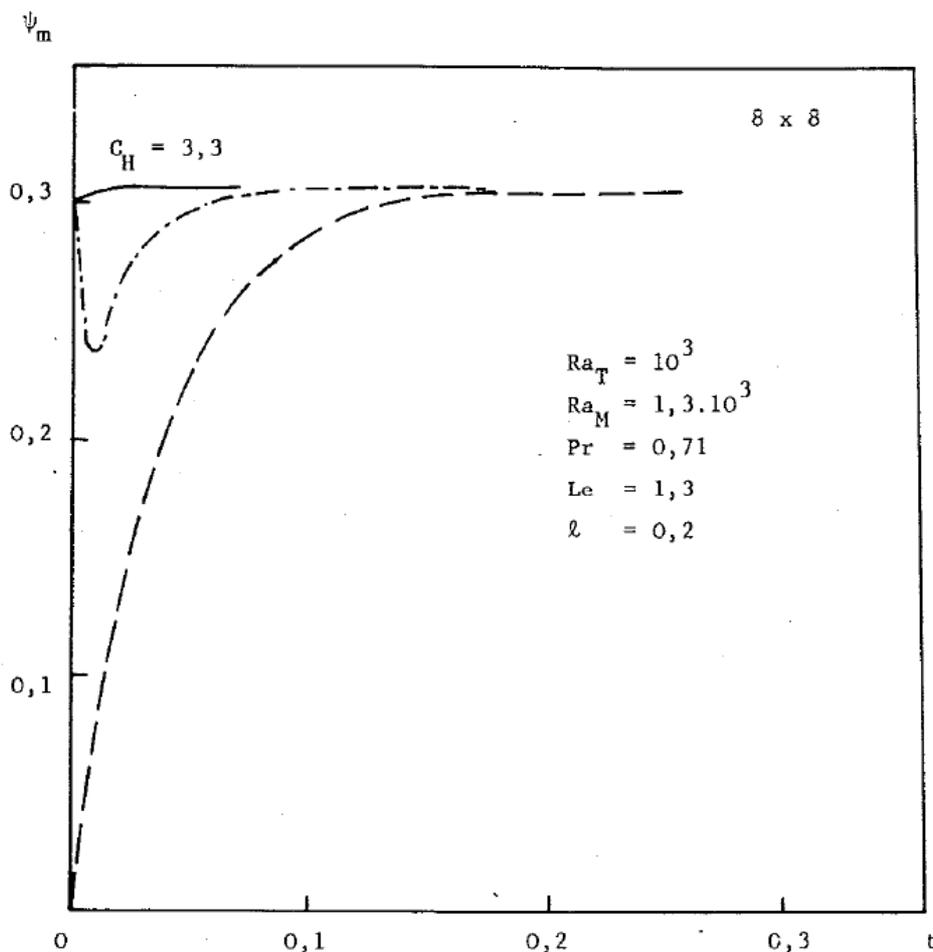


Fig. 4.6.4. Évolution de la fonction de courant avec conditions initiales conductrices

Pour $C_H = 3,268$, ces résultats montrent une réduction de l'ordre de 10 des étapes transitoires, pour un nombre de degrés de liberté de 8×8 .

4.7. Étude de la précision

4.7.1. Étude comparative de la précision avec les résultats d'une méthode aux différences finies hermitienne mixte

La précision du schéma a été testée pour un écoulement du type conductif, et comparée avec les résultats d'une méthode aux différences finies hermitienne (Manouélian, 1982). La figure 4.7.1 montre différents profils de la vitesse horizontale au milieu de la cavité, calculés avec différents nombres de degrés de liberté en méthode Tau-Chebyshev, ainsi que par la méthode hermitienne. Avec les paramètres $Ra_T = 1,27 \cdot 10^4$, $Ra_M = 5,10 \cdot 10^3$, $Pr = 0,526$, $Le = 1,52$, $\ell = 0,18$, les résultats montrent une parfaite coïncidence de la solution obtenue avec 12×16 polynômes de Chebyshev et de celle obtenue avec 21×21 points de maillage en méthode hermitienne.

Avec les mêmes valeurs des paramètres, la figure 4.7.2 montre une forte oscillation du profil $v(1/2,y)$ le long de la plus grande longueur de la cavité, pour 8×8 polynômes de Chebyshev. C'est une conséquence du phénomène de Gibbs que l'on peut réduire en utilisant un plus grand nombre de composants spectraux.

12×16 polynômes de Chebyshev suffisent pour obtenir un profil constant dans le cœur de la cavité, qui coïncide avec la solution calculée par la méthode hermitienne avec 21×41 points de maillage.

Les mêmes constatations peuvent être faites pour le profil de la vitesse verticale aux parois actives (cf. figure 4.7.3).

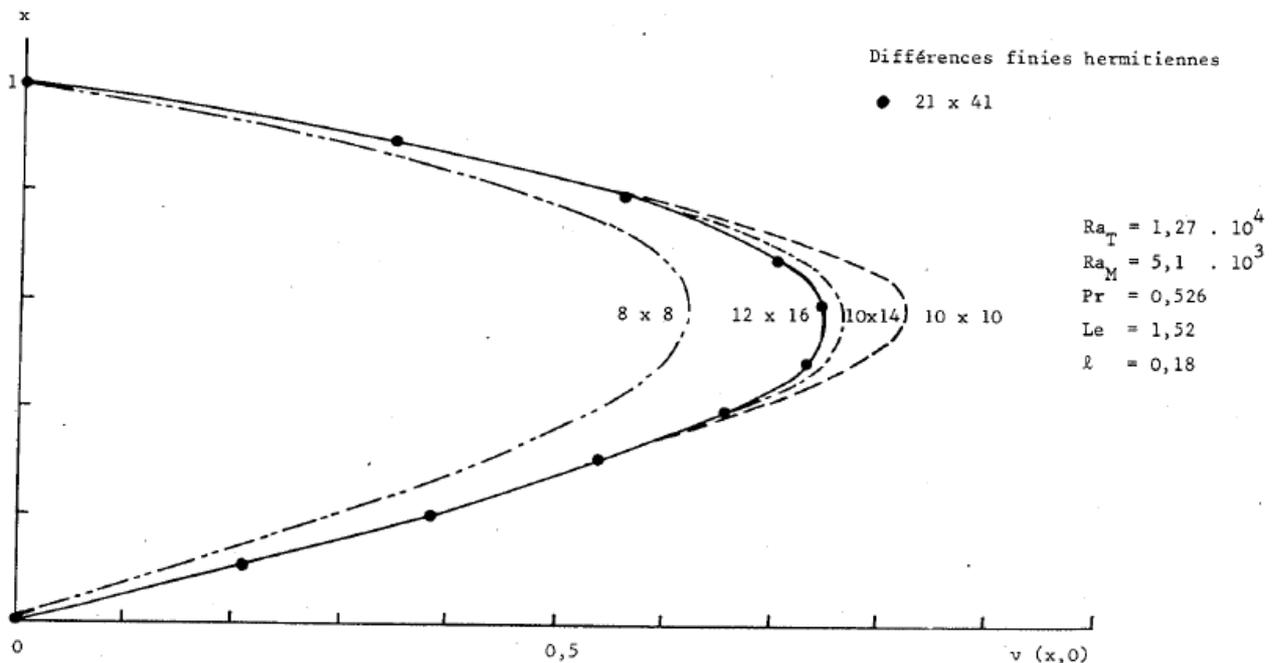
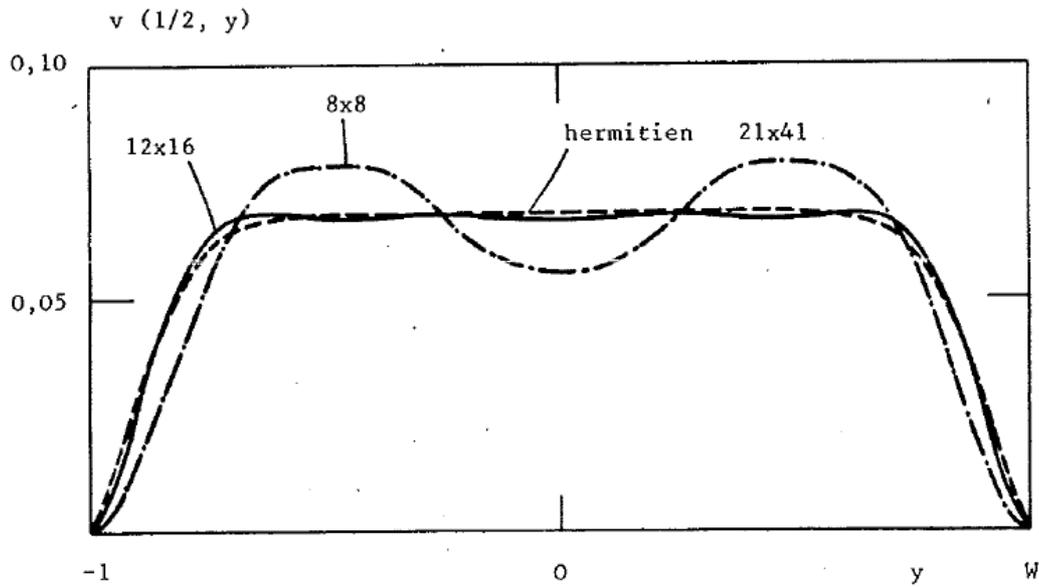
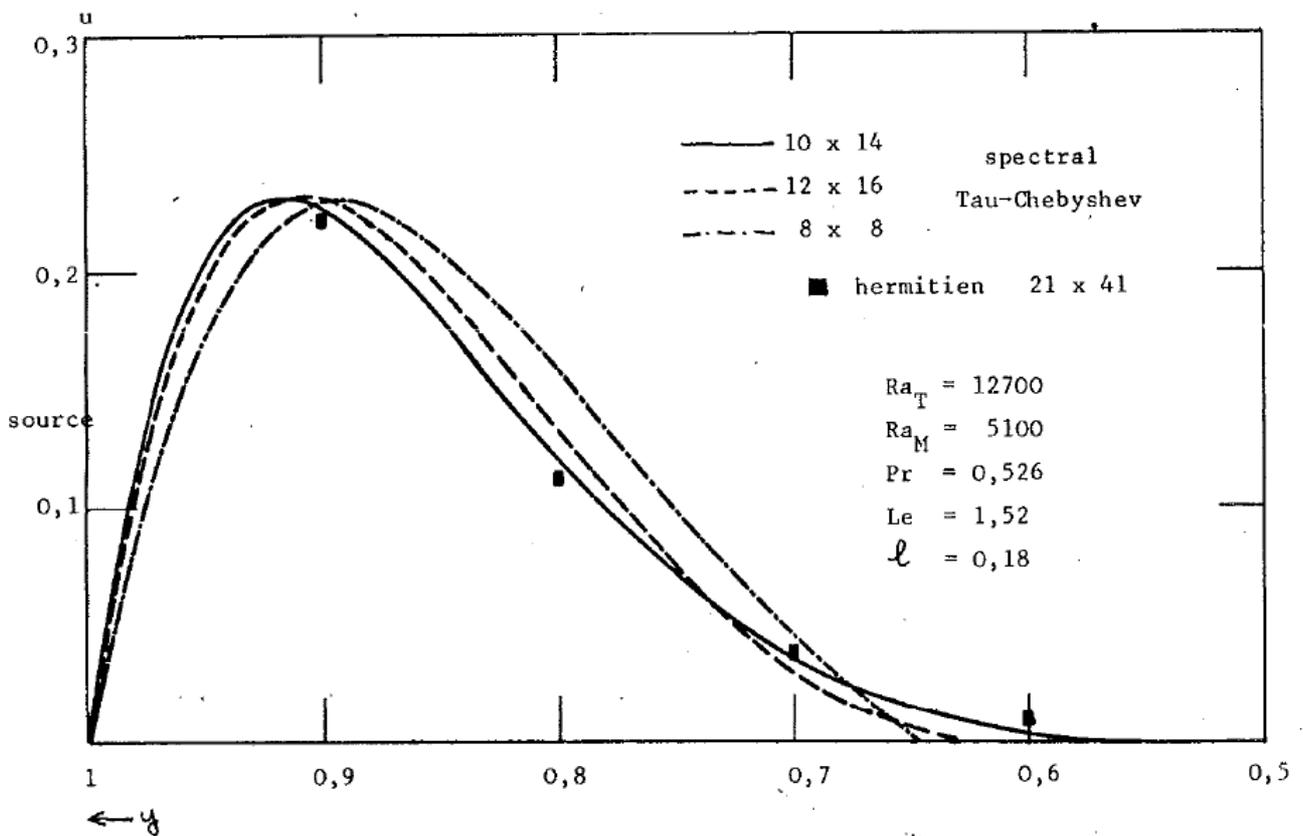


Fig. 4.7.1. Étude de la précision



$Ra_T = 12700$
 $Ra_M = 5100$
 $Le = 1,52$
 $Pr = 0,526$
 $\ell = 0,18$

Fig. 4.7.2. Étude de la précision



$Ra_T = 12700$
 $Ra_M = 5100$
 $Pr = 0,526$
 $Le = 1,52$
 $\ell = 0,18$

Fig. 4.7.3. Étude de la précision

4.7.2. Configuration d'états transitoires. Effets du nombre de degrés de liberté

4.7.2.1. Des configurations du fluide soumis à un flux interfacial, caractérisé par E , ont été examinées pour différentes étapes transitoires et pour des nombres de degré de liberté de 10×10 et de 13×13 .

L'influence de la fonction de lissage de la vitesse interfaciale $\varepsilon(x)$ est également étudiée. Les cas suivants :

$$\begin{aligned} E = 5 ; \varepsilon = 0,9 \\ E = 5 ; \varepsilon = 0,5 \\ E = 3,49 ; \varepsilon = 0,9 \end{aligned}$$

sont reportés sur la figure 4.7.4. Pour un même taux de sublimation E , on observe une différence assez sensible entre les configurations des lignes de courant convergées pour 10×10 polynômes de Chebyshev et celles pour 13×13 . Pour un même nombre de degré de liberté (10×10), l'évolution des états transitoires du fluide est très prononcée.

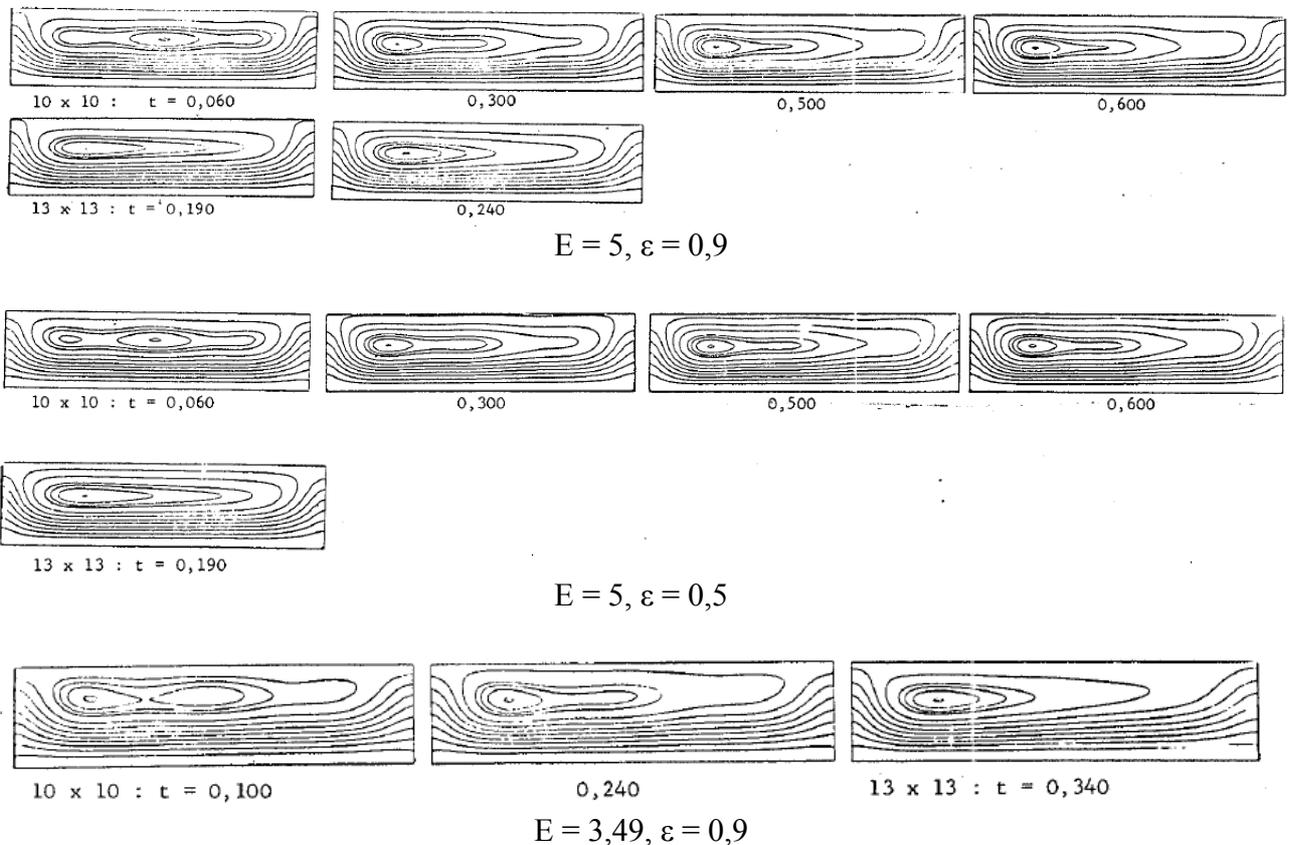


Fig. 4.7.4. Configurations d'états transitoires pour 10×10 et 13×13 polynômes de Chebyshev

On remarquera d'autre part que le profil de la vitesse interfaciale, contrôlé par $\varepsilon(x)$, a une influence sur l'écoulement central comme le montrent les lignes de courant obtenues pour $\varepsilon = 0,5$ et $\varepsilon = 0,9$; le débit pariétal est plus important pour $\varepsilon = 0,9$ que pour $\varepsilon = 0,5$ ainsi que le montrent les lignes de courant supplémentaires reliant les deux parois actives.

4.7.2.2. On a représenté l'effet du nombre de degrés de liberté sur le profil horizontal de fraction massique. Les différences sont très faibles entre les solutions obtenues à $N = M = 10$ et 13 (Fig. 4.7.5). On a mis en évidence le léger décalage des valeurs de W au milieu sur la Fig. 4.7.6 où sont les profils verticaux pour les mêmes valeurs de N et M .

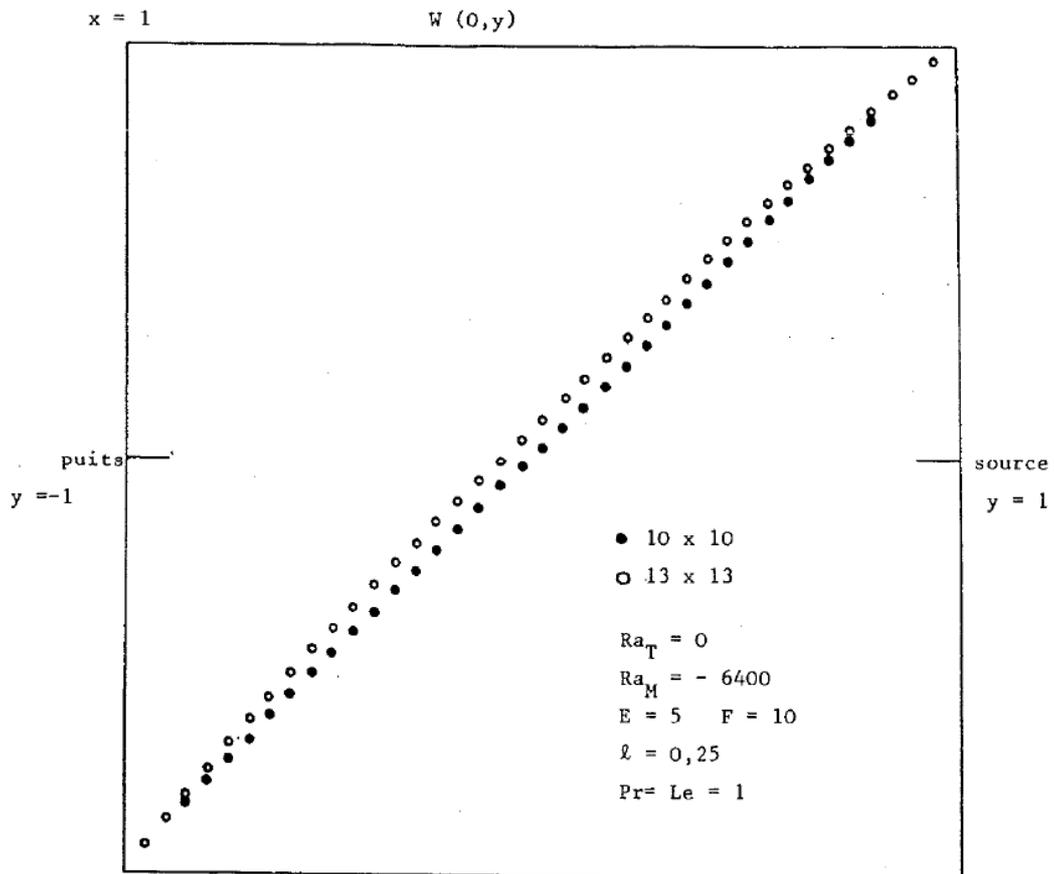


Fig. 4.7.5. Étude de la précision

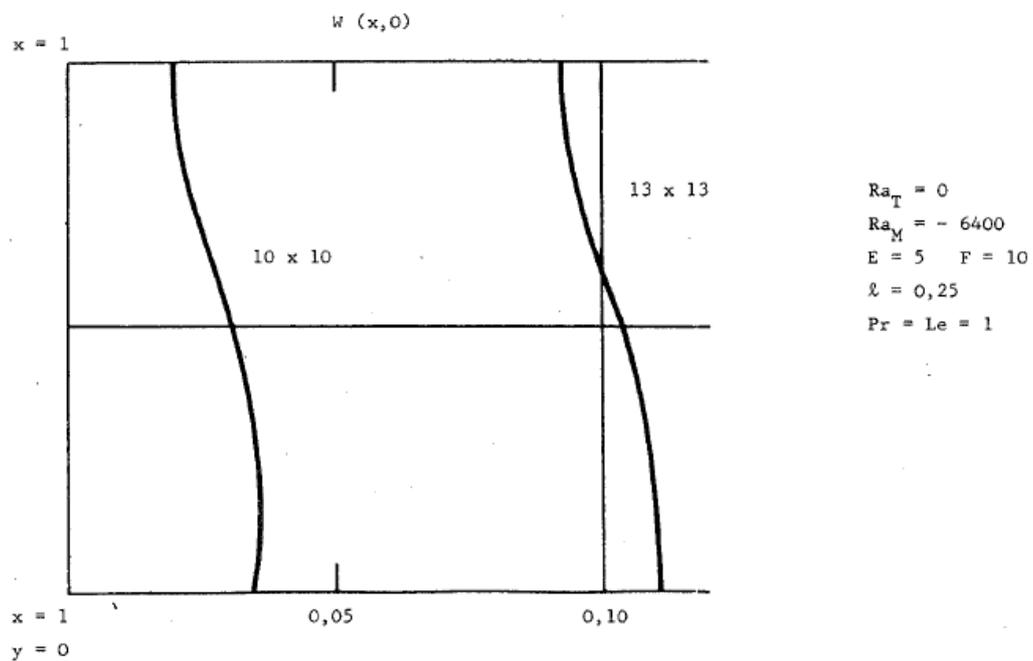


Fig. 4.7.6. Étude de la précision

Chapitre 5

Validité de l'approximation bidimensionnelle pour la convection dans le plan de symétrie d'un cylindre horizontal

5.1. Introduction

L'enceinte cylindrique est le modèle habituel pour les ampoules qui sont utilisées en croissance cristalline. La connaissance des configurations d'écoulements est très importante pour optimiser les différents processus. Les approximations asymptotiques et les simulations bidimensionnelles pour le plan de symétrie sont les moyens d'analyse les plus couramment utilisés. Les études récentes conduites par Schiroky et Rosenberger (1984) ont montré, par anémométrie laser-Doppler, que des mouvements de convection fortement tridimensionnels pouvaient se développer dans les configurations cylindriques.

L'objectif de ce chapitre est de tester l'applicabilité du modèle 2D pour représenter de façon suffisamment satisfaisante l'écoulement dans le plan de symétrie, cet écoulement étant caractéristique des régimes dans l'ampoule. Les limites de l'approximation ont été recherchées dans les cas de « core driven regime » et de « boundary layer driven regime ». Cette étude est développée dans le cas d'un cylindre, de rapport de forme $\ell = 0,2$, pour lequel on dispose de résultats expérimentaux (Schiroky et Rosenberger, 1984), et numériques dans le cas d'une simulation 3D (Smutek et al, 1983, 1984). de plus, les solutions asymptotiques de Birikh, 1966, Hart, 1972, Klosse et Ullersma, 1973, Bejan et Tien, 1978 A et B..., fournissent des confrontations supplémentaires.

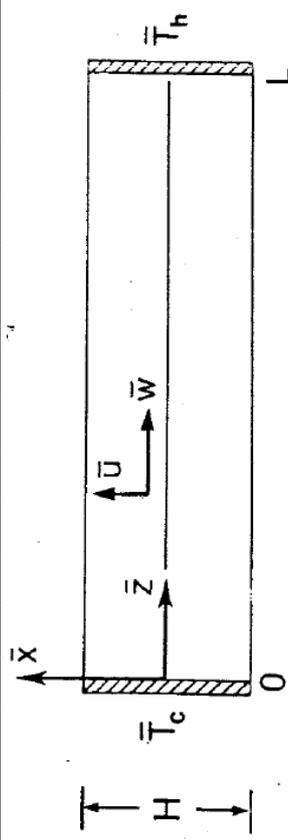
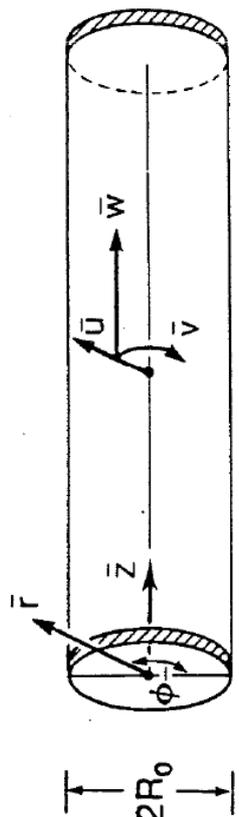
	Notation des grandeurs dans ce chapitre 5	Notation des grandeurs dans les autres chapitres	
2D	H	2L hauteur	
	L	2H longueur	
	a	1/ℓ rapport de forme	
	Ra	(ℓ/2) ³ Ra _T nombre de Rayleigh	
	u	uℓ vitesse verticale	
	w	vℓ vitesse horizontale	
3D	R ₀	L rayon	
	L	2H longueur	
	a	1/ℓ rapport de forme	
	Ra	(ℓ/2) ³ Ra _T nombre de Rayleigh	
	u	vℓ vitesse radiale	
	w	uℓ vitesse axiale	
v	vitesse azimuthale		

Tableau 5.1.1. correspondance entre les notations utilisées dans ce chapitre 5 et l'ensemble du mémoire

Fig. 5.1.1 Géométries 2D et 3D du problème

La figure 5.1.1 représente la géométrie du problème pour une cavité rectangulaire (modèle 2D) et pour une cavité cylindrique (modèle 3D). Les référentiels et les notations utilisés dans ce chapitre ont été choisis pour uniformiser les variables dans le cylindre et la cavité rectangulaire (Smutek, 1984). Le tableau 5.1.1 donne les correspondances avec celles utilisées dans notre mémoire.

5.2. Théories asymptotiques

5.2.1. Vitesse horizontale au cœur de l'écoulement

Des solutions ont été proposées pour l'écoulement dans le cœur de la cavité rectangulaire et dans le cas de cylindres très allongés (Birikh, 1966, Hart, 1972, Klosse et Ullersma, 1973, Bejan et Tien 1978 A et B). Des approximations plus élaborées ont été proposées par Cormack et al (1974) : elles autorisent la description d'écoulements secondaires, tels que ceux obtenus expérimentalement par Ostrach et al (1980). Bejan et Tien (1978), et Shih (1981), ont proposé des adaptations permettant de prendre en compte l'effet des régions terminales (donc, d'une certaine façon, dans le but d'y décrire la couche limite), mais les solutions dans le cœur restent toujours un profil en « S » pour la composante axiale. Des améliorations ultérieures ont été proposées pour étendre la théorie aux valeurs élevées du nombre de Rayleigh (Tichy et Gadgil, 1982). Schiroky et Rosenberger ont récemment calculé la composante d'ordre 3 du développement en série de Ra. Ce terme supplémentaire permet de rendre compte du déplacement de la position du maximum de vitesse vers la paroi, aux bas régimes de couche limite. Les différentes expressions pour l'écoulement horizontal dans le cœur sont données dans le tableau (5.2.1) dans lequel k_1 est proportionnel au gradient thermique horizontal :

$$k_1 = \frac{H}{2\Delta\bar{T}} \cdot \frac{\partial\bar{T}}{\partial\bar{z}} \quad (5.2.1)$$

Geometry	Model	Power Series Approximations		
		1st Order	3rd Order	
Rectangular Cavity	w^{2D}	$\frac{1}{6} k_1 Ra (x^2 - 1) x$		(a)
				(b)
				(c)
				(d)
Cylinder	w^{3D}	$-\frac{1}{8} k_1 Ra \cos \phi (r^2 - 1) r$		(e)
Cylinder	w^{3D}	$-\frac{1}{8} k_1 Ra \cos \phi (r^2 - 1) r$	$-\frac{(k_1 Ra)^3}{1474560 Pr} [(-\frac{143}{1680} r^{10} + \frac{3}{4} r^8$ $-\frac{21}{40} r^6 + \frac{125}{48} r^4 - \frac{201}{140} r^2 + \frac{4}{15}) r \cos \phi$ $+ (\frac{1}{28} r^8 - \frac{1}{6} r^6 + \frac{3}{10} r^4 - \frac{1}{4} r^2 + \frac{17}{210})$ $r^3 \cos^3 \phi]$	(f)

(a) Klosse et Ullersma, 1973, (b) Birikh, 1966, (c) Hart, 1972, (d) Bejan et Tien, 1978, (e) Bejan et Tien, 1978, (f) Schiroky et Rosenberger, 1984

Tableau 5.2.1. Expressions analytiques pour l'écoulement central

5.2.2. Détermination de k_1

Dans le cas de *cavités rectangulaires*, Cormack et al (1974) ont proposé des relations pour k_1 en fonction de Ra^2 et a , dans le cas des régimes CDR (« core driven regime ») et les faibles régimes BLDR (« boundary layer driven regime »). Pour des écoulements BLDR pleinement développés, Bejan et Tien (1978) ont proposé une dépendance de k_1 en $Ra^{-3/5}$. Hart (1983) a donné une expression de k_1 valable pour des écoulements CDR et BLDR à partir des travaux de Cormack et al (1974). Pour de grandes valeurs de Ra , cette expression s'explique en :

$$k_1 = (1024\phi)^{-1/3} Ra^{-2/3} \quad (5.2.2)$$

où ϕ est un paramètre sans dimension. Les expressions de k_1 sont regroupées dans le tableau 5.2.2. Dans le cas des *cylindres*, Schiroky (1982) a étendu le modèle de Bejan et Tien (1978 B) en proposant une détermination de k_1 tenant compte de la conservation du débit dans les régions terminales.

Regime	Approximation	Parameter	Wall Condition	
CDR and beginning of BLDR	$k_1 = \frac{1}{2a} (1 - 128Q Ra^2/a^3)$	$10^6 Q = 1.74$	Conducting	Cormack et al, 1974
BLDR	$k_1 = 8.75 \gamma^{1/10} Ra^{-3/5}$	$\gamma = 1.0$	Insulating	Bejan et Tien, 1978
CDR and BLDR	$1024 Ra^2 Q k_1^3 + 2ak_1 = 1$	$10^6 Q = 1.70$ to 2.23	Conducting	Hart, 1983

Tableau 5.2.2. Expressions de k_1

Solution	Regime	
$u(\tilde{z}) = \frac{k}{a} (\sin m\tilde{z} \cosh m\tilde{z} - \rho \cos m\tilde{z} \sinh m\tilde{z})$		Elder, 1965 Vest et Arpaci, 1969
$u(z) = \frac{a Ra}{12} z \left(\frac{z}{a} - 1\right) \left(\frac{z}{a} - 2\right)$	conducting (small Ra , $m \rightarrow 0$)	Elder, 1965 Vest et Arpaci, 1969
$u(z) = 2\sqrt{2} ac^2 Ra^{1/2} \sin \frac{mz}{a} e^{-\frac{mz}{a}}$	boundary layer (high Ra , $m \gg 1$, $\beta = ab$)	Gill, 1966

Tableau 5.2.3. Expressions analytiques pour l'écoulement vertical

5.2.3. Vitesse verticale le long des parois verticales différentiellement chauffées (modèle 2D)

L'expression de la vitesse verticale au voisinage des parois actives a été rappelée au § 3.5.2. Avec les notations correspondant au référentiel introduit dans ce chapitre (cf. tableau 5.1.1), on peut résumer les différents résultats dans le tableau 5.2.3.

5.3. Méthodes numériques

les méthodes numériques qui ont été utilisées pour les cavités rectangulaires (2D) et les cylindres (3D) sont données dans le tableau 5.3.1 avec les principales caractéristiques.

Il faut également mentionner des résultats obtenus par la méthode TEACH, utilisée par Markham et Rosenberger avec la densité variable mais les propriétés physiques constantes.

Method	Model	Governing Hypotheses	Formulation	Method	Variables (r,φ,z)/(x,z)
I	3D	Boussinesq; Constant Properties	Vorticity, Velocity	Centered Finite Differences; Samarskii-Andreev Scheme; False transient	9 x 32 x 33, uniform grid spacing
II	2D	Boussinesq; Constant Properties	Vorticity, Stream-function	Hermitian Finite Differences; ADI Scheme; False Transient	21 x 41, 101 uniform grid spacing
III	2D	Boussinesq; Constant Properties	Vorticity, Stream-function	Pseudo-Spectral-Tau-Chebyshev; Adam Bashforth/semi-implicit Scheme; instationary	10 x 14 to 12 x 27, collocation points
IV	2D	Compressible; Constant Properties	Primitive Variables	TEACH Method	16 x 32, 2 different uniform grid spacings

Tableau 5.3.1. Liste des méthodes numériques mentionnées

5.4. Présentation des résultats, étude comparative

5.4.1. Champ de vitesse dans le cœur de la cavité

Les valeurs maximales de la vitesse axiale w dans le cœur de la cavité, déduites des solutions asymptotiques (tableau 5.2.1), sont respectivement pour une cavité rectangulaire et pour le cylindre :

$$\left. \begin{aligned} |w_{\max}^{2D}| &= \frac{Ra k_1}{9\sqrt{3}} & \text{en } x = \pm \frac{1}{\sqrt{3}} \\ |w_{\max}^{3D}| &= \frac{Ra k_1}{12\sqrt{3}} & \text{en } r = \frac{1}{\sqrt{3}} \text{ pour } \phi = 0, \pi \end{aligned} \right\} (5.4.1)$$

La figure 5.4.1 représente w_{\max} en fonction de Ra , obtenue à partir des solutions asymptotiques, des résultats expérimentaux et des simulations numériques dans les cas 2D et 3D. Le rapport de forme a été choisi égal à $a = 5$ ($\ell = 0,2$). En régime conductif (CDR), k_1 peut être évalué à $k_1 = (2a)^{-1}$.

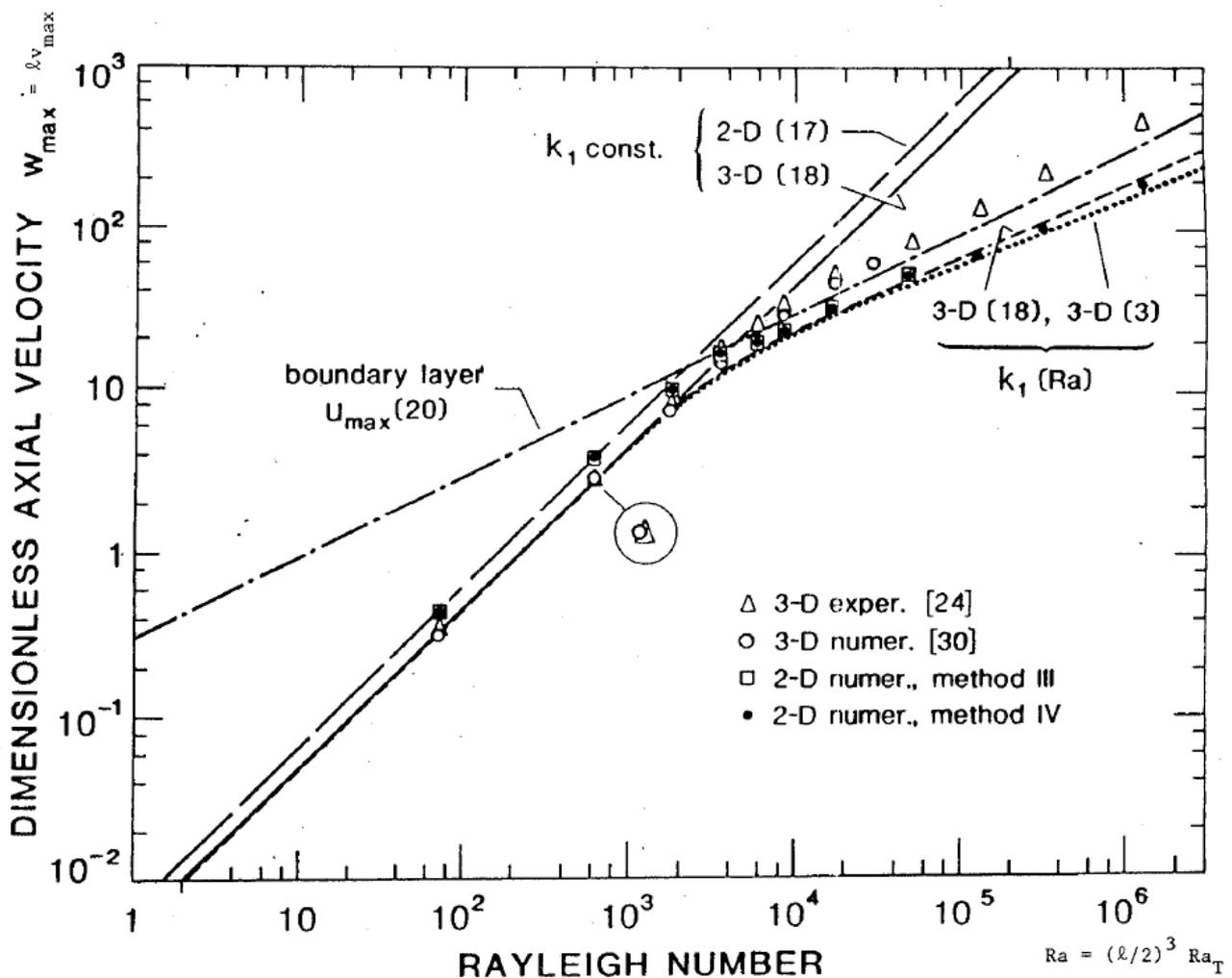


Fig. 5.4.1. Vitesse axiale en fonction du nombre de Rayleigh

La transition CDR-BLDR au-delà de laquelle k_1 décroît en fonction de Ra représente l'état à partir duquel le mouvement dans la cavité commence à être dominé par le mouvement vertical aux parois actives. Ainsi que nous l'avons développé au chapitre 3, la transition peut être le point critique où les lois de variation de w au milieu de la cavité intersectent la loi de Gill. Effectivement, ainsi que nous pouvons le voir sur la figure 5.4.1, et que cela va être discuté dans la suite, le changement de pente de la variation de w_{max} en fonction de Ra s'opère en un point qui est très voisin du point d'intersection des différentes lois. Ceci est le cas pour le cylindre et la cavité rectangulaire. Les valeurs de w_{max} restent alors plus sur une parallèle à une loi de variation en $Ra^{1/2}$ qui laisserait supposer une dépendance de k_1 en $Ra^{-1/2}$ si l'on suppose que les lois asymptotiques restent formellement valables. Les variations obtenues pour k_1 lorsque Ra varie, et dans le cas des approximations analytiques, numériques et de l'expérience, font apparaître une certaine dispersion qui reste néanmoins organisée autour d'une loi de variation de l'ordre de $Ra^{-1/2}$ (Fig. 5.4.2).

Concernant la figure 5.4.1, on peut faire les observations suivantes :

a) Les résultats expérimentaux et numériques 3D coïncident bien pour toute la gamme $74 < Ra < 30000$ correspondant aux données numériques.

Les résultats numériques 2D montrent des écarts appréciables aussi bien pour les écoulements CDR que BLDR.

b) Parmi les solutions numériques 2D, celles utilisant le modèle compressible (Markham et Rosenberger, 1984) sont en bon accord avec celles utilisant l'approximation de Boussinesq, dans la gamme des Ra utilisées.

c) Pour des Ra assez faibles (CDR) les solutions analytiques 3D coïncident parfaitement avec les solutions numériques 3D et les résultats expérimentaux. La solution analytique 2D fournit un extremum de w de valeur de 33% supérieure à la vitesse axiale maximale obtenue pour le cylindre, ainsi que le prédisent les relations (5.4.1). De plus, il y a également coïncidence complète entre les résultats numériques 2D et les solutions analytiques 2D.

d) A de grands nombres de Rayleigh (BLDR), les résultats expérimentaux et numériques 3D pour la vitesse horizontale au cœur de la cavité, montrent une variation de l'ordre de $Ra^{1/2}$, sensiblement parallèle à la loi de Gill correspondant à la vitesse verticale u près des parois actives. Les résultats numériques 2D montrent un comportement $w_{max}(Ra)$ de même tendance, mais donnant une vitesse 1,5 fois plus petite que dans le cas 3D.

e) Si l'on définit un nombre de Rayleigh critique Ra_c pour la transition CDR-BLDR, alors la figure 5.4.1 donne approximativement, pour $a = 5$, $Ra_c^{2D} \sim 2000$, et $Ra_c^{3D} \sim 8000$, ce qui correspond à un facteur de l'ordre de 4 entre les comportements 2D et 3D. Ces valeurs sont à rapprocher de celle déduite de l'analyse asymptotique développée au § 3.5 et qui donne pour Ra critique de transition 2D la valeur suivante :

$$Ra = 343/4a^4$$

A titre indicatif, on a donné sur les figures 5.4.3-6 les profils caractéristiques de vitesses obtenues par l'expérience dans un cylindre (Schiroky et Rosenberger, 1984), par le calcul 3D (Smutek et al, 1984), par le calcul 2D (méthodes II, III, IV), ainsi que les solutions analytiques 3D (Bejan et Tien, 1978 B, Schiroky et Rosenberger, 1984) et 2D (Bejan et Tien, 1978 A), avec pour k_1 les expressions implicites (Schiroky, 1982) ou numériques.

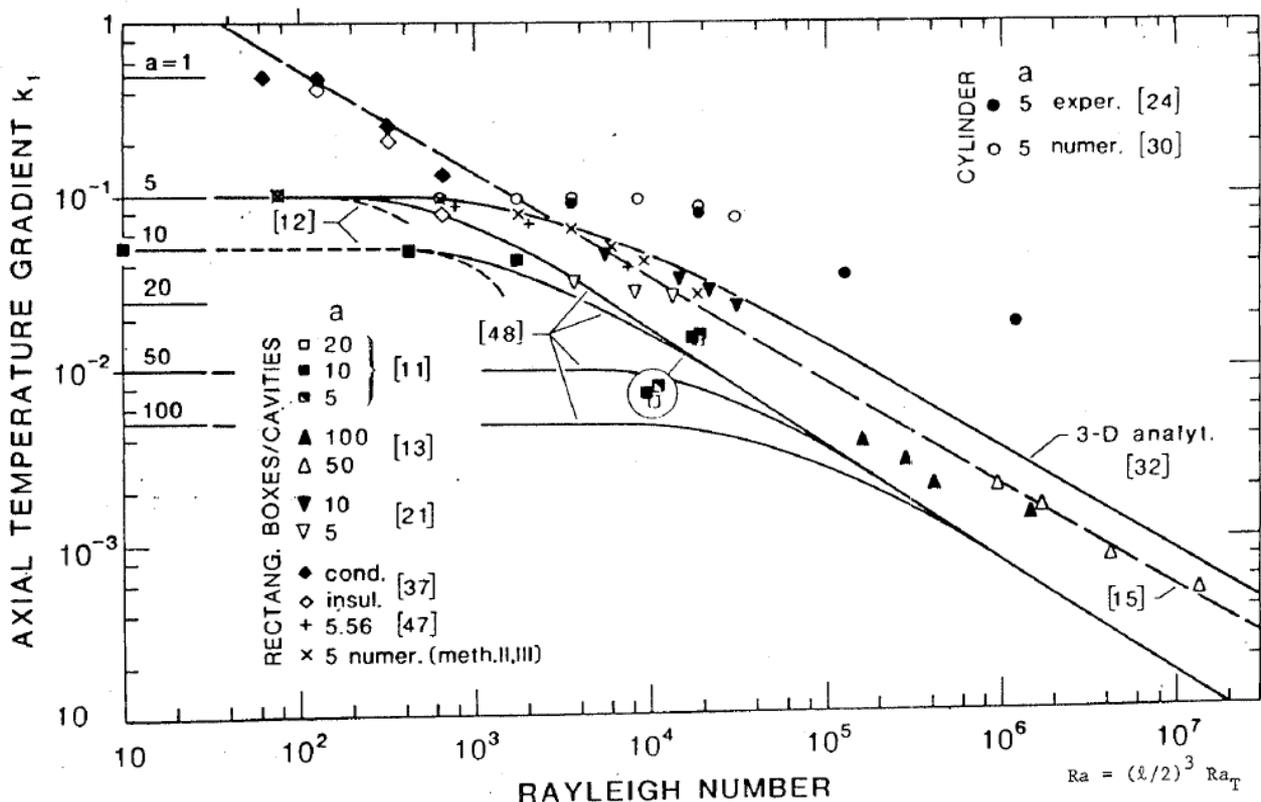


Fig. 5.4.2. Gradient thermique axial en fonction du nombre de Rayleigh

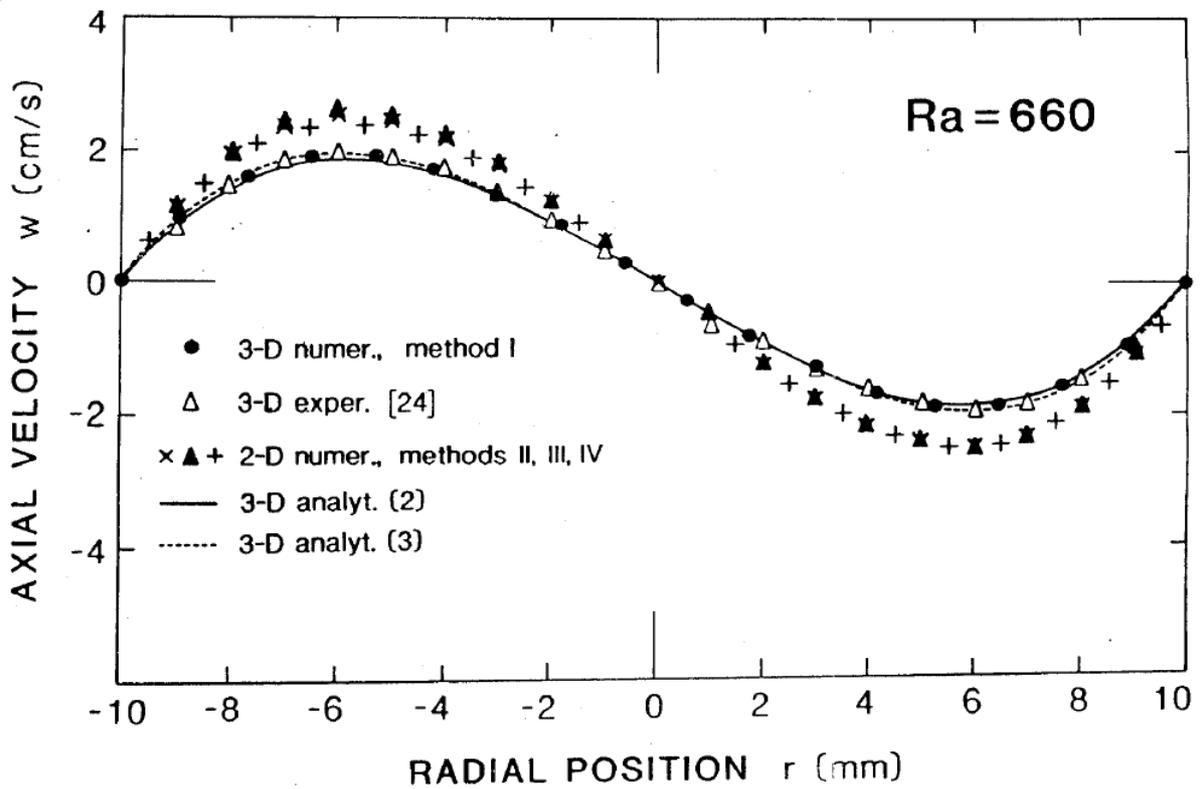


Fig. 5.4.3. Profil de la vitesse axiale

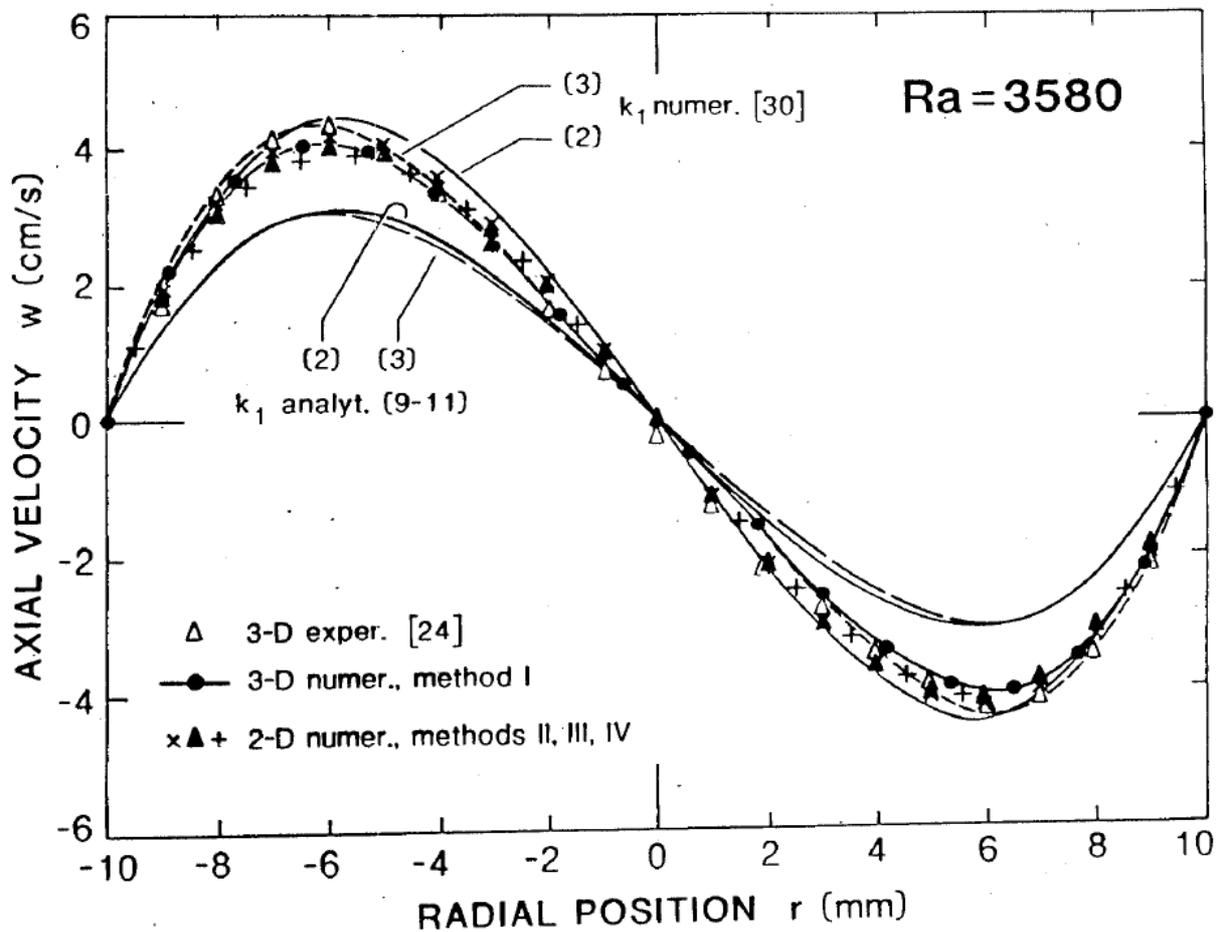


Fig. 5.4.4. Profil de la vitesse axiale

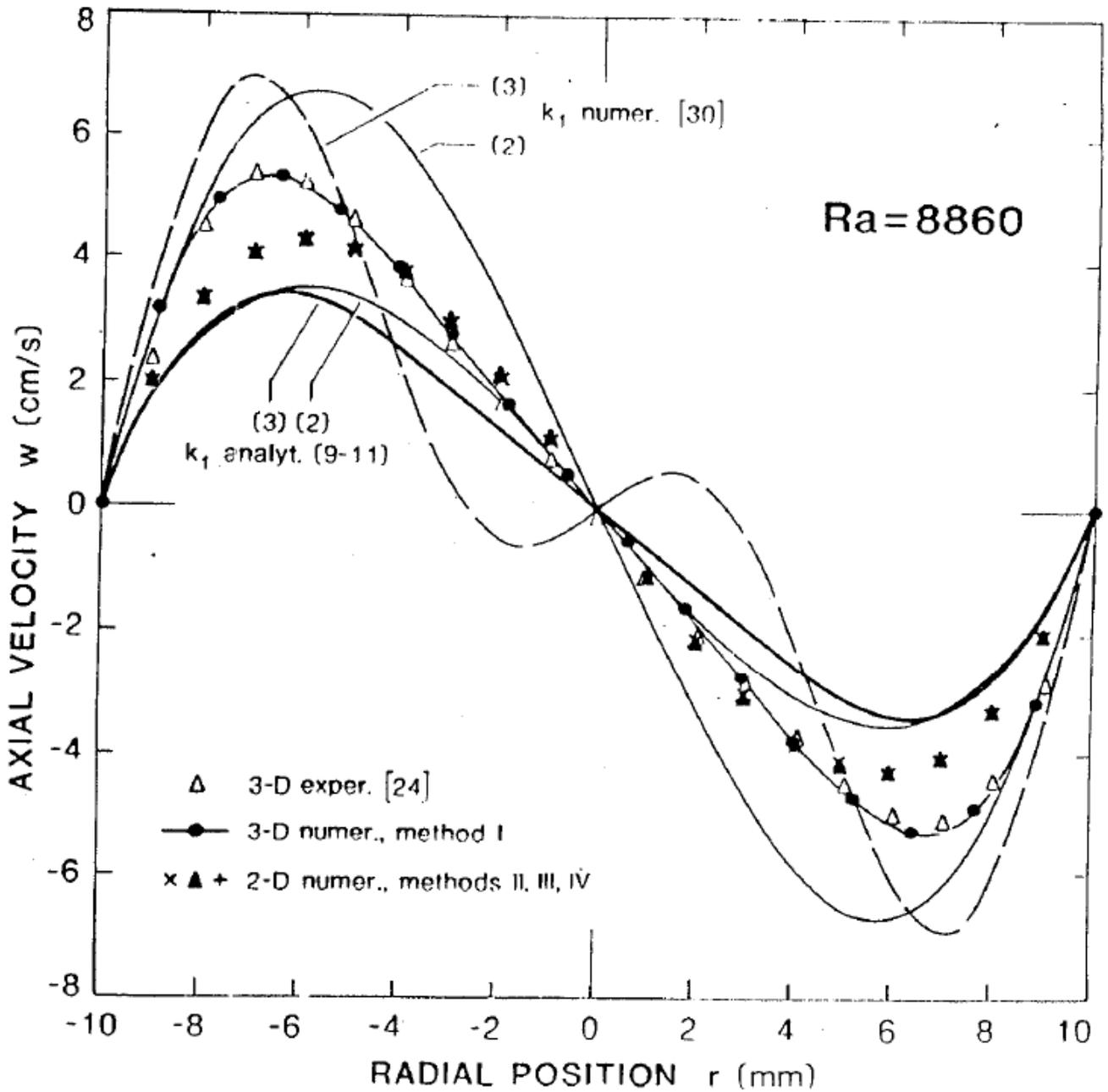


Fig. 5.4.5. Profil de la vitesse axiale

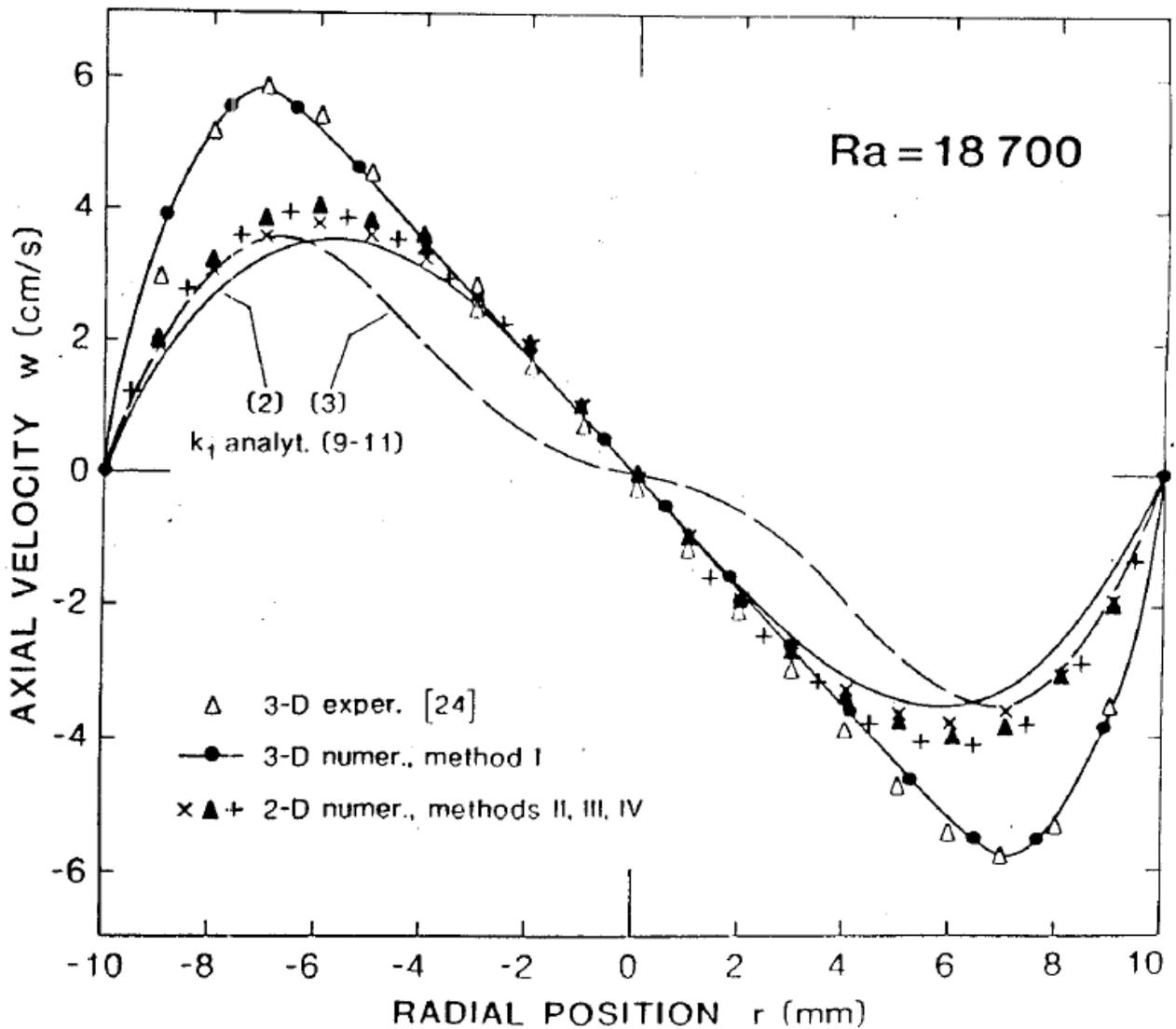


Fig. 5.4.6. Profil de la vitesse axiale

5.4.2. Vitesse dans la région des parois verticales différentiellement chauffées

Les résultats numériques 2D pour les profils de vitesses verticales près des parois actives sont montrés sur la figure 5.4.7 pour $Ra = 18700$ (méthodes II et III). Sont également portés les résultats expérimentaux et numériques dans les modèles du cylindre (Schiroky et Rosenberger, 1984, Smutek et al, 1984). La comparaison de ces résultats fait apparaître par rapport aux résultats expérimentaux :

- une sous-estimation de l'ordre de 15% pour la solution numérique 3D qui ne peut être attribuée à un effet de maillage (Smutek, 1984).

- une sur-estimation de l'ordre de 50% pour les solutions 2D obtenues avec la méthode hermitienne et la méthode Tau-Chebyshev. On remarque la précision de l'approximation spectrale qui fournit, avec seulement 10×14 à 12×27 composantes de Chebyshev, w maximum de vitesse tout à fait équivalent à celui obtenu avec les différences finies hermitiennes comprenant 21×201 et 21×101 points de discrétisation. On a représenté sur les figures 5.4.8a,b,c les différents profils obtenus lorsque Ra varie par la voie expérimentale et numérique avec les modèles 3D et 2D d'un fluide de Boussinesq.

D'un point de vue physique, la différence entre les solutions 3D et les résultats expérimentaux

pourrait être attribuée à un effet de compressibilité. Cela est à comparer avec la réduction de la vitesse convective observée par Leonardi (1984) avec l'introduction de densité et de viscosité variables. Il est à noter que les résultats numériques obtenus avec le modèle compressible (méthode IV, Markham et Rosenberger, 1984) ont mis en évidence des différences avec les solutions 2D obtenues avec l'approximation de Boussinesq. Les maillages considérés pour la solution compressible sont composés de deux maillages uniformes : l'un resserré près des parois, le second plus relâché pour le milieu du domaine. Une étude de l'effet de maillage doit cependant être faite avant de tirer des conclusions définitives sur ce problème. Il faut cependant noter que ces différences ne se répercutent pas de façon trop sensible sur les solutions au milieu de la cavité comme l'attestent les résultats présentés sur les figures 5.4.3-6.

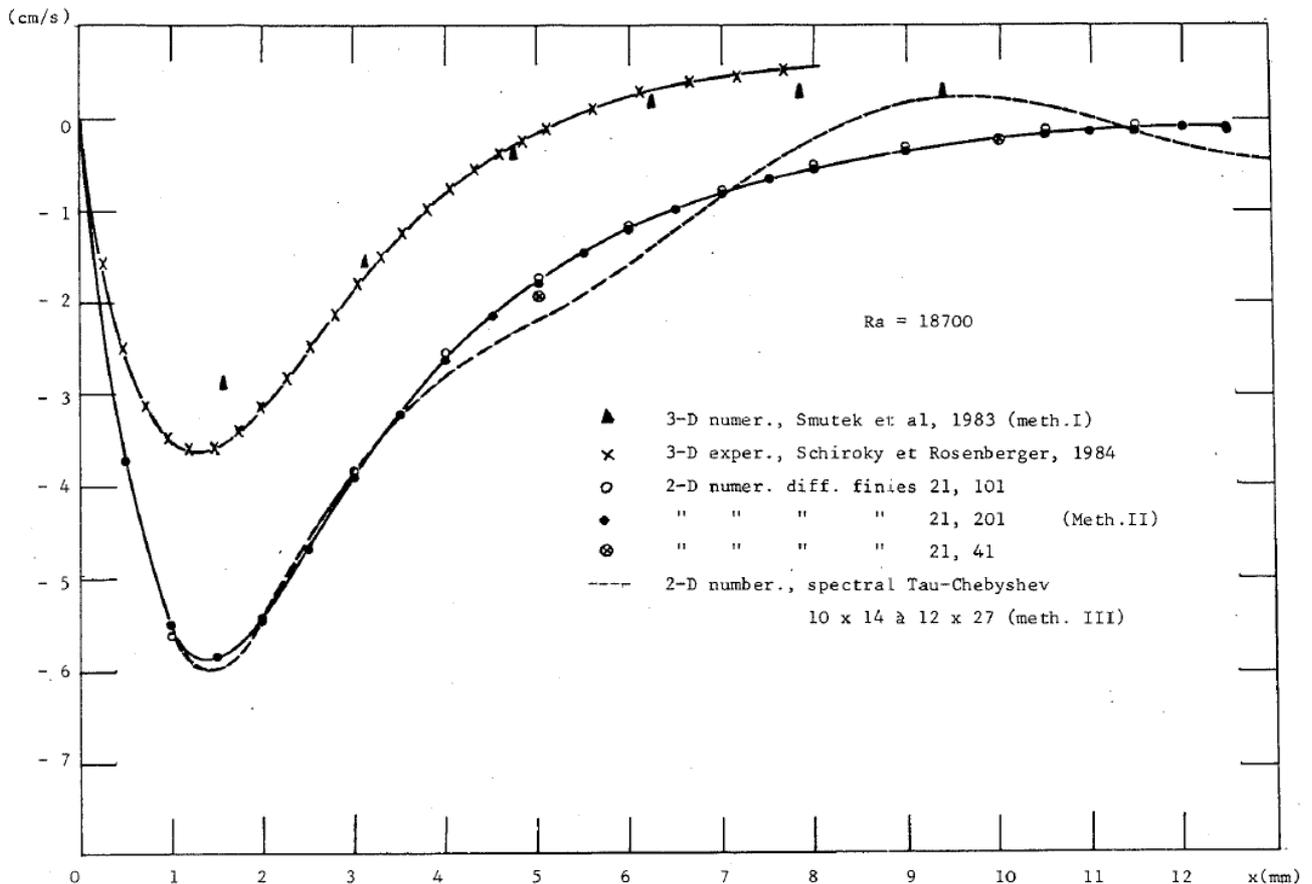


Fig. 5.4.7. Vitesse verticale

Les expressions analytiques de la vitesse verticale maximale u_{\max} le long des parois différentiellement chauffées ont été rappelées au § 3.5.2. Elles ont été confrontées avec les résultats numériques et expérimentaux dans la figure 5.4.9 en régime CDR et BLDR. Une analyse de cette figure montre que :

- Les résultats numériques 3D et expérimentaux coïncident très bien dans le domaine CDR jusque pour des $Ra \sim 2000$.
- Pour des Ra allant jusqu'à $Ra \sim 2000$, tous les résultats montrent une proportionnalité avec Ra , et une évolution parallèle à la solution analytique w_{\max}^{3D} .
- Pour $74 < Ra < 20000$, les résultats numériques 2D basés sur l'approximation de Boussinesq surévaluent les vitesses maximales obtenues par l'expérience et qui sont elles-mêmes sous évaluées par les solutions numériques 3D également avec l'approximation de Boussinesq.

d) Les résultats numériques 2D du modèle compressible présentent une différence de vitesse entre les deux parois verticales différentiellement chauffées de l'ordre de 5%. Ces résultats sont supérieurs à ceux obtenus par l'approximation de Boussinesq, pour toute la gamme de Ra utilisée.

e) A partir de $Ra \sim 6000$, tous les résultats suivent une dépendance approximative en $Ra^{1/2}$, correspondant à un écoulement de type BLDR.

f) Les relations analytiques pour l'écoulement vertical (cf. § 3.5.2) prédisent la transition vers une structure de type couche limite dans l'écoulement vertical pour des valeurs de Ra de plusieurs ordres de grandeur inférieures au Ra critique correspondant à la transition CDR-BLDR.

On voit dans le paragraphe suivant que la transition vers une structure de type couche limite dans l'écoulement vertical s'est effectivement produite bien en-deçà de la valeur de Ra critique (CDR-BLDR).

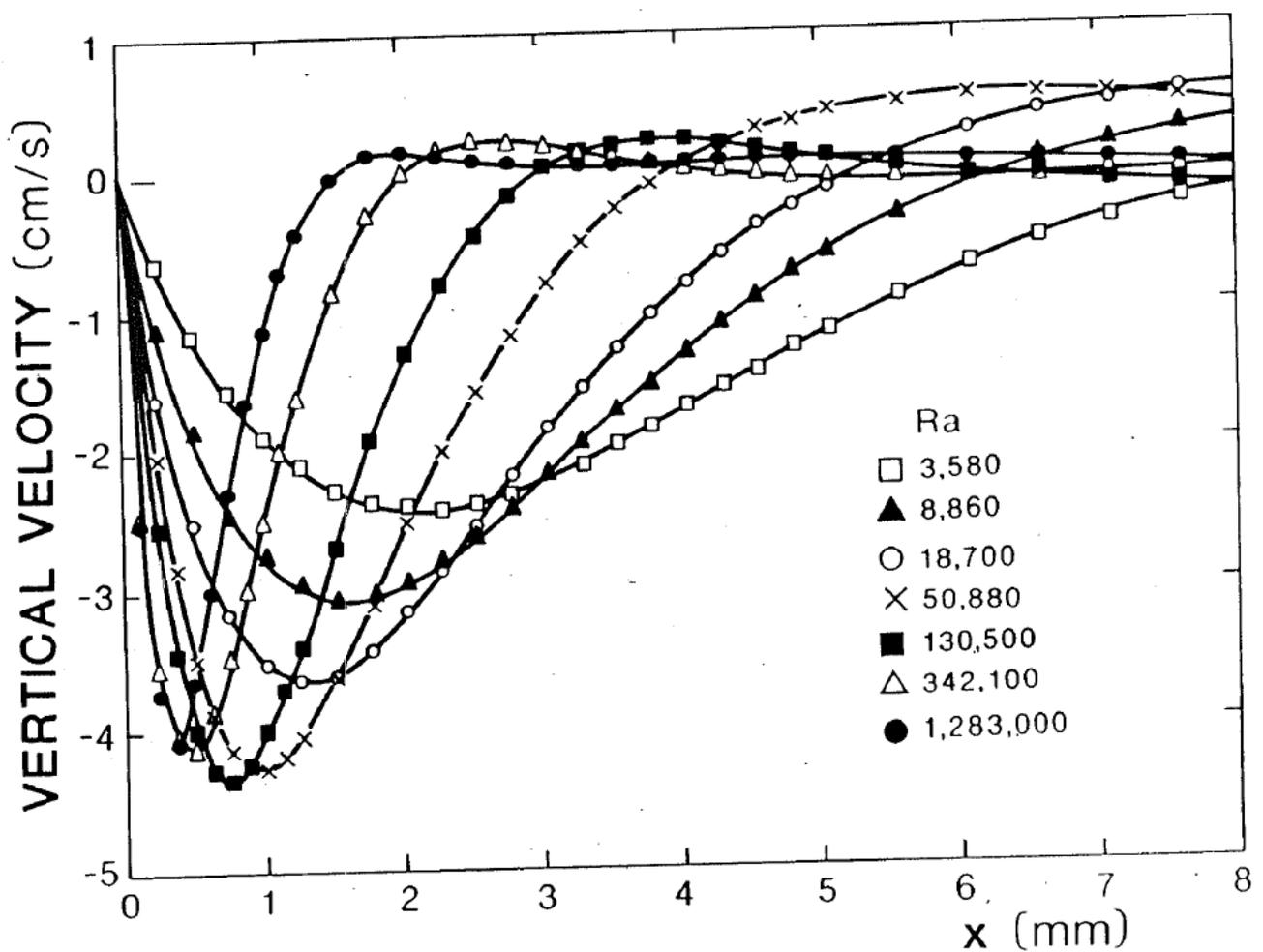


Fig. 5.4.8a. Vitesse verticale pour différents Ra (expériences 3D, Schiroky et Rosenberger, 1984)

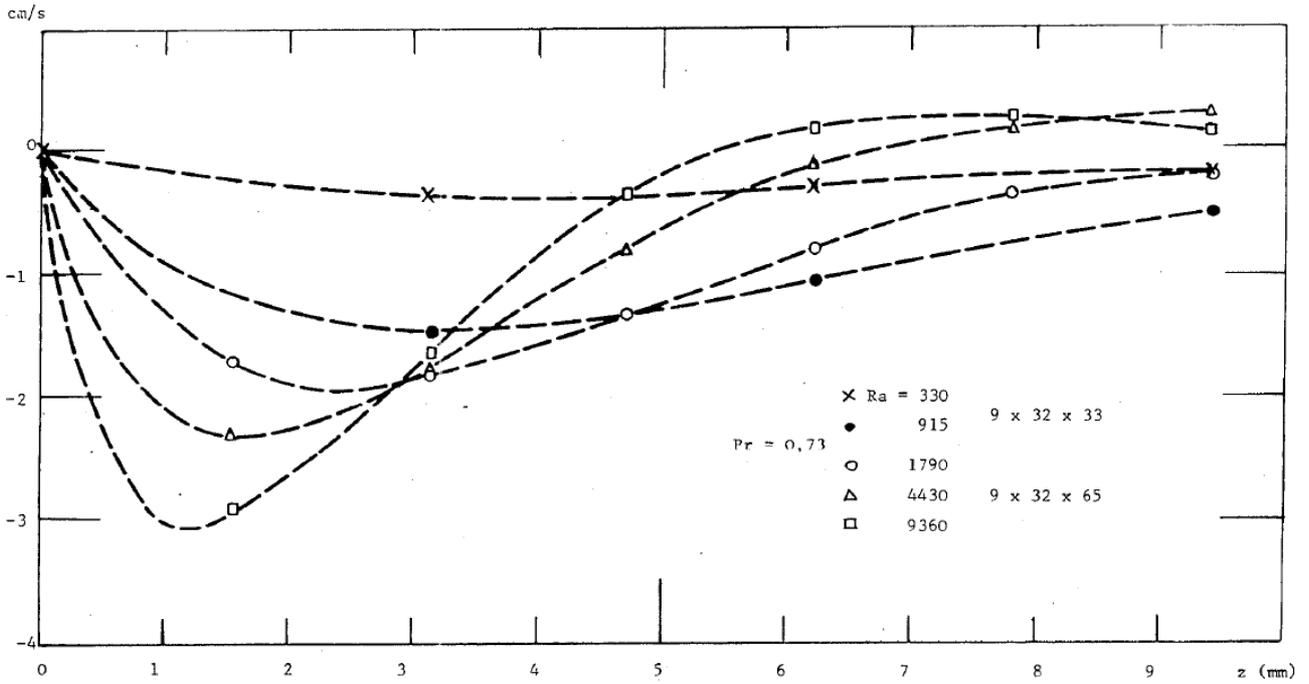


Fig. 5.4.8b. Vitesse verticale pour différents Ra
(méthode numérique 3D, I)

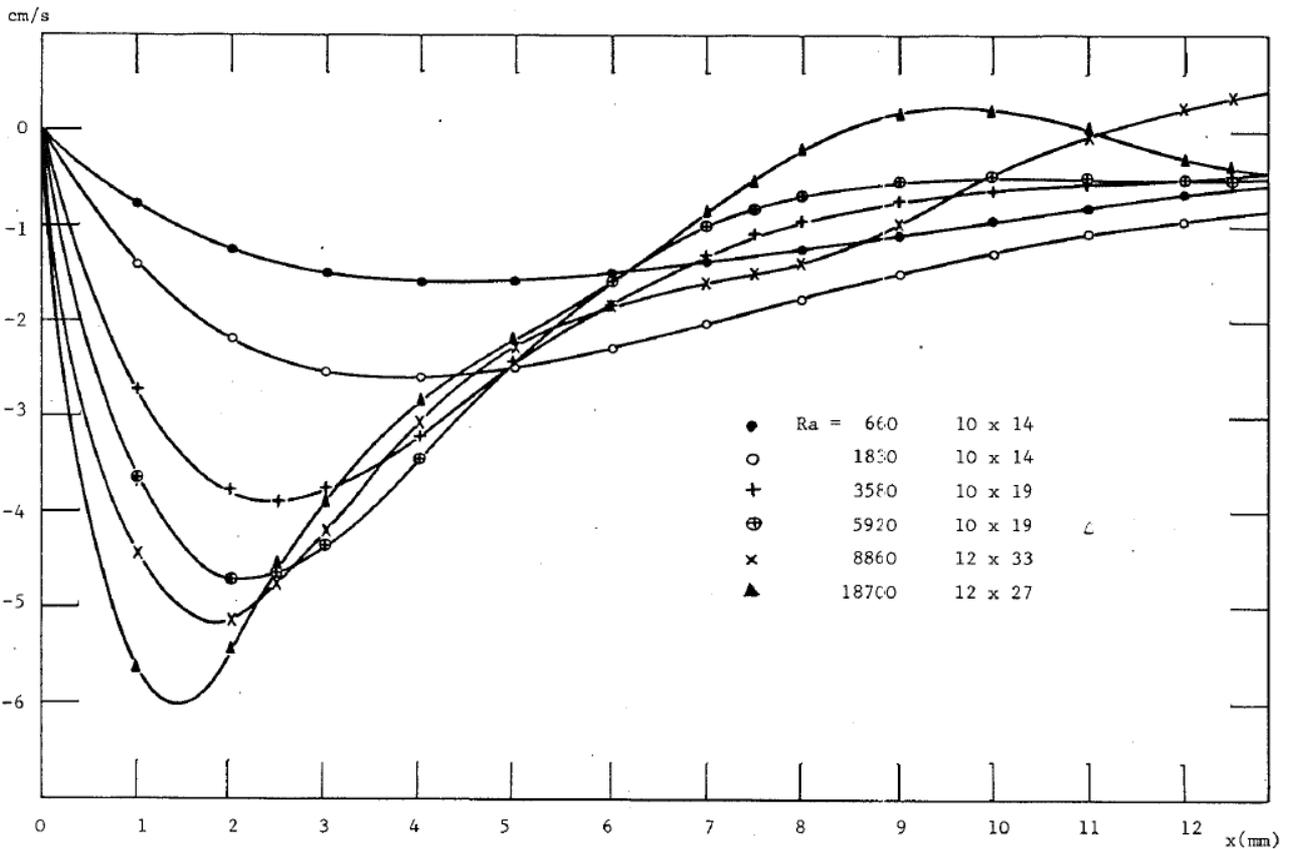


Fig. 5.4.8c. Vitesse verticale pour différents Ra
(Tau-Chebyshev, 2D, méthode III)

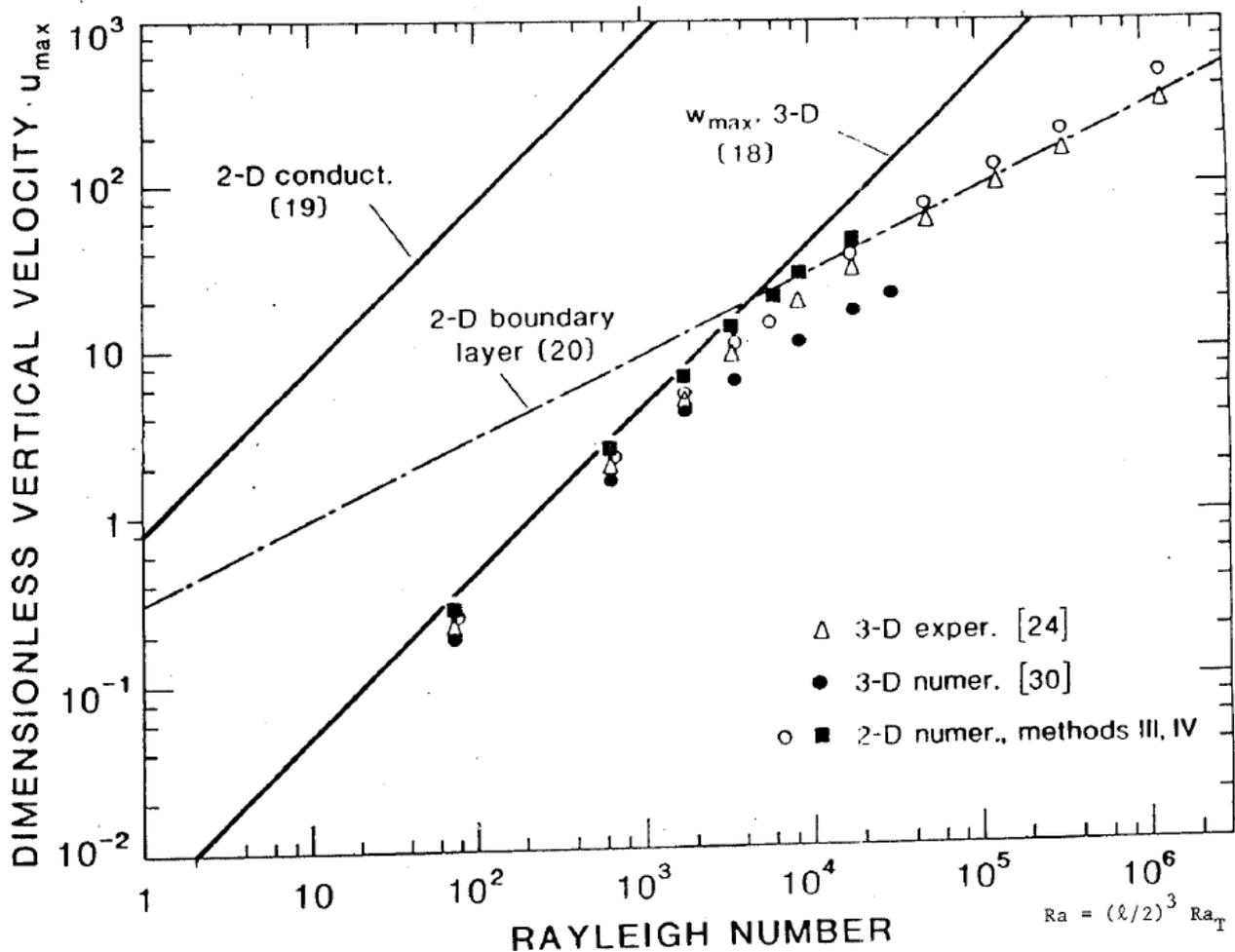


Fig. 5.4.9. Vitesse verticale en fonction du nombre de Rayleigh

5.4.3. Épaisseur caractéristique de l'écoulement

On définit l'épaisseur caractéristique d'un écoulement, $\bar{\delta}$, comme la distance entre une paroi et le lieu maximum de la composante de vitesse parallèle à cette paroi. Ce paramètre peut servir à prévoir la transition entre les écoulements CDR et BLDR. Pour les parois verticales et horizontales, on utilise les quantités sans dimension : $\frac{\bar{\delta}(w)}{2R_0}$ ou $\frac{\bar{\delta}(w)}{H}$, et $\frac{\bar{\delta}(u)}{L}$ (notations tableau 5.1.1).

Sur la figure 5.4.10 on a représenté les valeurs de ces quantités déterminées par les théories asymptotiques, les méthodes numériques et les expériences. Pour l'épaisseur de l'écoulement horizontal $\frac{\bar{\delta}(w)}{2R_0}$ les résultats numériques 3D sont en bon accord avec les valeurs expérimentales jusqu'au $Ra = 30000$. Le lieu du maximum de vitesse est décalé vers la paroi horizontale lorsque Ra augmente. La solution analytique basée sur le développement à l'ordre 3 en Ra^{-1} proposé par Schiroky et Rosenberger (1984) donne comme valeur brute pour $\bar{\delta}$ lorsque $Ra \rightarrow \infty$ la relation suivante :

$$\frac{\bar{\delta}(w)}{2R_0} = 0,1065$$

Cette valeur limite paraît être en bon accord avec la tendance asymptotique des valeurs expérimentales. Les solutions numériques 2D montrent un certain retard dans la transition par rapport au cas du cylindre vers un profil en « Z » au milieu de la cavité.

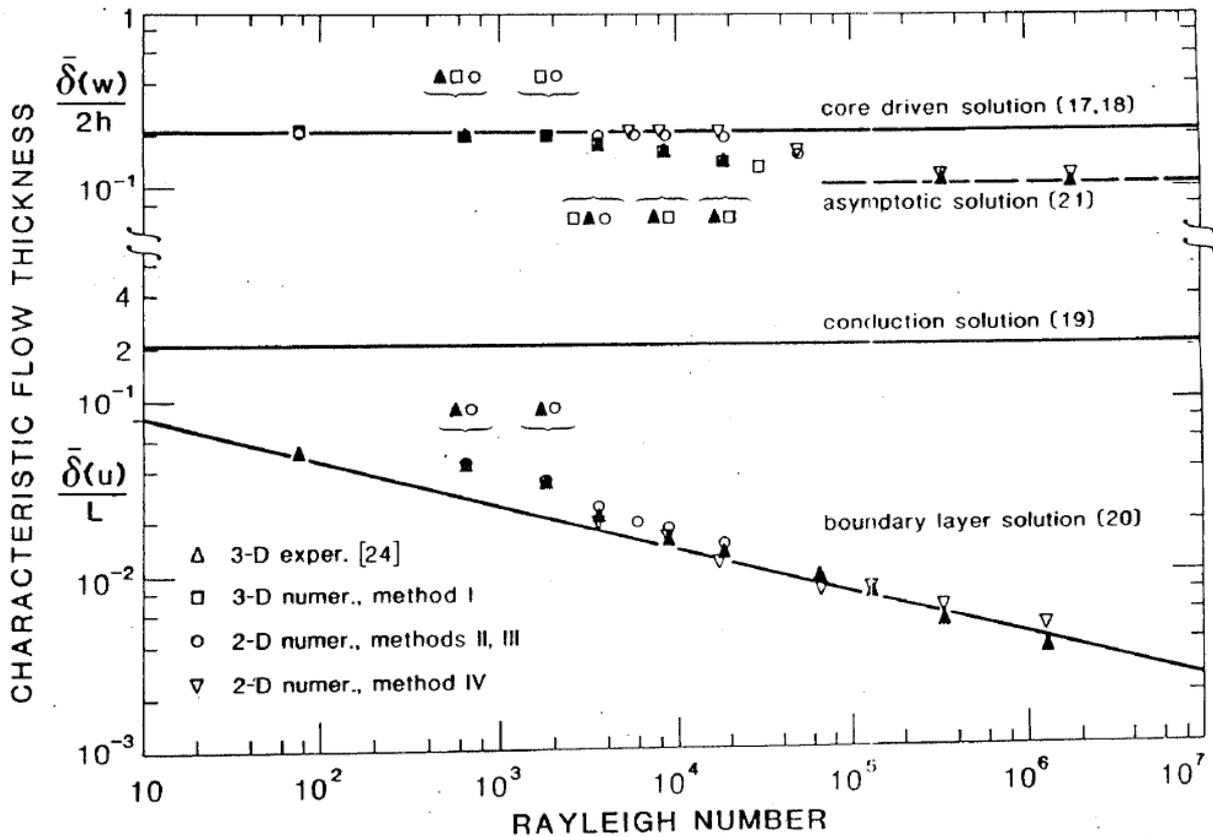


Fig. 5.4.10. Épaisseurs caractéristiques des écoulements

L'épaisseur caractéristique de l'écoulement vertical $\bar{\delta}(u)/L$ suit une loi voisine de $Ra^{-1/4}$ comme le prévoit l'analyse de Gill, à la fois dans le régime CDR comme dans le régime BLDR. Ceci montre que dans les régions proches des parois verticales, une structure de type « couche limite » apparaît même pour de faibles Ra, tandis que l'amplitude de vitesse maximale est encore gouvernée par le mécanisme de l'écoulement au cœur de la cavité, jusqu'à des $Ra \sim 2000$. Les résultats numériques 2D et 3D donnent des valeurs de $\bar{\delta}(u)/L$ du même ordre, bien que les u_{max} obtenus soient fortement différents. Dans le cas du cylindre, se superpose à ce phénomène de couche limite verticale, un phénomène de couche limite le long des parois latérales cylindriques qui s'accompagne de l'apparition d'extremums en-dehors de phase de symétrie. Ce phénomène a été mis en évidence par l'expérience (Schiroky et Rosenberger, 1984) et également par la simulation numérique 3D (Smutek, 1984).

5.5. Conclusions

Pour le régime CDR, les approximations 2D sur-évaluent de 33% la vitesse maximale horizontale au cœur de la cavité. De même, sur les parois verticales, les solutions numériques 2D prédisent les vitesses caractéristiques de l'ordre de 30% au-dessus des valeurs expérimentales et numériques 3D. Pour des écoulements BLDR, les approximations 2D présentent par rapport aux solutions numériques 3D et à l'expérience :

- une sous-estimation de l'ordre de 40-50% des vitesses au cœur de la cavité, avec des structures de profil en « S », alors qu'en 3D, elles sont typiquement en « Z ».
- une sur-estimation de l'ordre de 30-40% des vitesses verticales dans la région des parois différentiellement chauffées.

La transition entre les mécanismes CDR et BLDR, lorsqu'on la caractérise par le changement de la pente de variation de w , apparaît être obtenue plutôt en ra avec le modèle 2D que dans le cylindre.

Il est à noter que la vitesse verticale le long des parois différentiellement chauffées, conserve une structure de type « couche limite » quelle que soit la valeur de Ra ($74 < Ra < 30000$).

Chapitre 6

Étude des différents régimes hydrodynamiques avec ou sans gradients thermique et solutal, en présence d'un flux interfacial aux parois actives

6.1. Classement des régimes du fluide moyen et comportements hydrodynamiques des composants A et B

6.1.1. Introduction

Un fluide soumis aux conditions mentionnées au chapitre 3, de flux interfacial, de gradient thermique et solutal de confinement, est représenté par les équations de Navier-Stokes compressibles.

A l'intérieur des domaines concernés par les équations de Navier-Stokes compressibles, il existe un sous-domaine dans lequel les hypothèses de Boussinesq permettent de décrire le mécanisme.

Les mécanismes résultant du flux interfacial et de la convection thermique et solutale s'ajoutent ou se compensent en déterminant des régimes dominés par la convection ou par la diffusion.

A l'intérieur de ces régimes, le fluide peut vérifier une incompressibilité du fluide moyen recouvrant des masses volumiques partielles constantes (*incompressibilité générale*) ou variables (*compressibilité partielle*). Pour ces deux états, les caractéristiques d'un fluide de Boussinesq s'appliquent. Dans le cas le plus complexe, l'hypothèse de Boussinesq est en défaut et on est confronté à une compressibilité générale.

Ces notions d'incompressibilité partielle, mesurées par un taux de l'écart à zéro de la divergence de la vitesse de chacun des composants, pourront être mises en rapport avec les valeurs de E et F qui apportent une transition entre un régime et un autre, et qui font intervenir les paramètres de l'écoulement Ra_{eq} , Le, Pr, l (cf. § 3.6.5).

Réciproquement, si l'on impose les fractions massiques à la source et au puits \bar{W}_2 et \bar{W}_1 , le flux interfacial et la fraction massique moyenne ne sont pas quelconques. Ce seront alors certaines valeurs de \bar{W}_2 et \bar{W}_1 qui décideront de la transition d'un régime à l'autre.

6.1.2. Les conditions imposées au fluide moyen selon le choix de (E, F) d'une part, ou \bar{W}_2 et \bar{W}_1 d'autre part

6.1.2.1. Avant de chercher le classement des régimes hydrodynamiques du fluide moyen, il est nécessaire de distinguer les deux types de choix des conditions aux limites données au fluide. Cela revient à une interprétation des relations qui existent entre E, F, \bar{W}_1 et \bar{W}_2 .

6.1.2.2. **Imposer E** revient à imposer le flux interfacial. Par suite le choix de F implique celui de la fraction massique moyenne \bar{W}_0 , puisque :

$$F = \frac{\bar{W}_0}{1 - \bar{W}_0} E \quad \text{ou} : \quad \bar{W}_0 = \frac{F}{E + F}$$

Donc fixer (E,F) c'est fixer le flux interfacial et la fraction massique moyenne.

La valeur des fractions massiques \bar{W}_2 et \bar{W}_1 n'est alors plus arbitraire puisque :

$$\bar{W}_2 = \frac{F+1}{F+E}, \quad \bar{W}_1 = \frac{F-1}{F+E} \quad (6.1.1)$$

Puisque E et F peuvent, dans ce cas, varier indépendamment l'un de l'autre, il est commode de représenter, par un diagramme, comment \bar{W}_2 et \bar{W}_1 sont déterminés pour chaque couple de valeurs (E,F).

Pour cela, il est nécessaire de construire deux réseaux de courbes (\bar{W}_2, \bar{W}_1) dont les équations sont paramétrées l'une par E, l'autre par F :

$$\left. \begin{aligned} \bar{W}_2 &= \frac{E-1}{E+1} \bar{W}_1 + \frac{2}{E+1} = f(\bar{W}_1; E) \\ \bar{W}_2 &= \frac{F+1}{F-1} \bar{W}_1 = g(\bar{W}_1; F) \end{aligned} \right\} \quad (6.1.2)$$

Lorsque E et F sont fixées, l'intersection des courbes f et g donne alors directement les valeurs \bar{W}_2 et \bar{W}_1 de la fraction massique aux parois actives.

Le gaz étant considéré de Boussinesq, nous avons la condition (Annexe 4) : $Ra_T < |Ra_M|/Le$, qui entraîne (cf. relation 3.3.22) :

$$\bar{W}_2 > \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2} \bar{W}_1 + \left(1 - \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2}\right) \frac{\bar{M}_A}{\bar{M}_A - \bar{M}_B} \quad (6.1.3)$$

délimitant ainsi, par une droite que nous appelons « *droite de Boussinesq* » qui renseigne sur la température et les masses molaires du fluide, un domaine du plan (\bar{W}_1, \bar{W}_2) qui représente le domaine de validité directe de l'approximation de Boussinesq. De plus, la condition $\bar{W}_2 > \bar{W}_1$ supprime le domaine du plan (\bar{W}_1, \bar{W}_2) situé au-dessous de la première bissectrice. On obtient alors le diagramme suivant (Fig. 6.1.1) :

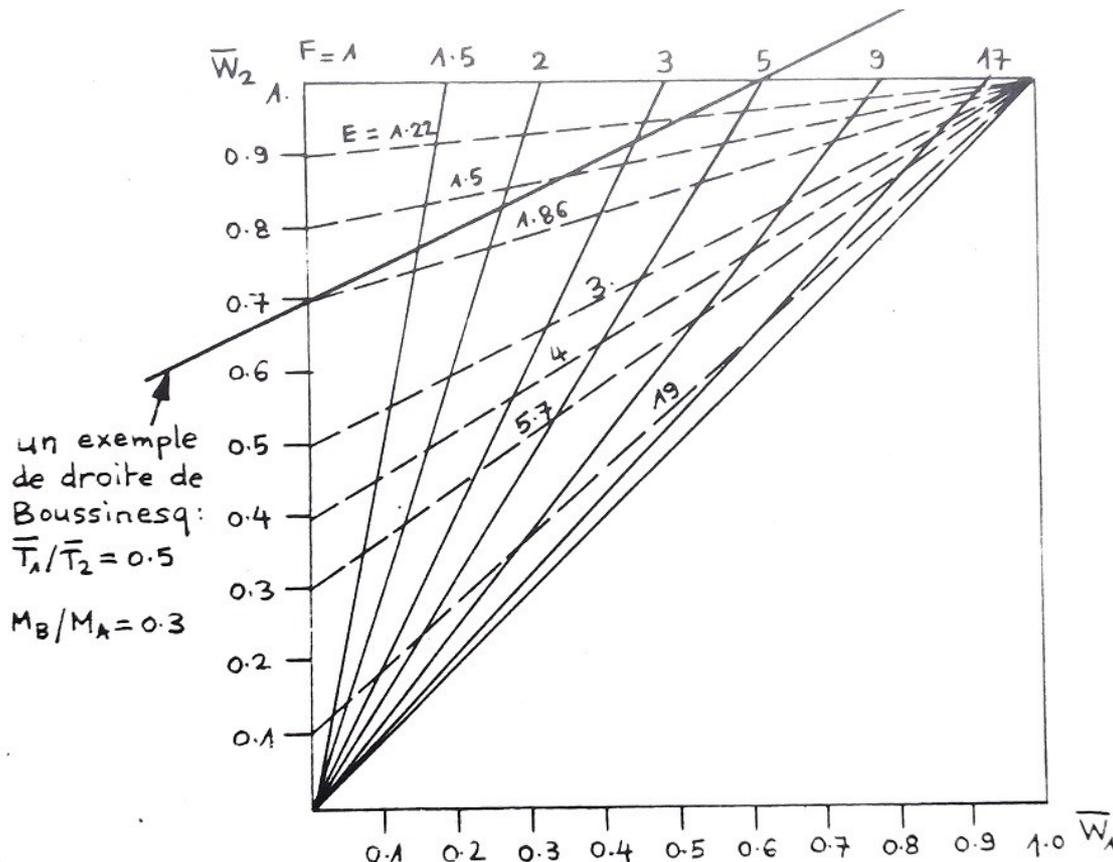


Fig. 6.1.1. Domaine de validité directe de l'approximation de Boussinesq (Annexe 4)

6.1.2.3. **Remarque** : La « droite de Boussinesq » étant d'équation

$$\bar{W}_2 = \alpha \bar{W}_1 + \beta$$

on a : $\alpha = \bar{T}_1 / \bar{T}_2$ et $\beta = (1 - \alpha) / (1 - \bar{M}_B / \bar{M}_A)$. On voit alors que le fluide, soumis à un flux interfacial, cesse d'être considéré comme un fluide de Boussinesq si :

$$\frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2} = \frac{\bar{M}_B}{\bar{M}_A}$$

quel que soit le flux interfacial et la fraction massique moyenne, puisque la droite de Boussinesq s'écrit alors : $\bar{W}_2 = \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2} \bar{W}_1 + 1$.

Dans les cas où $\bar{T}_1 / \bar{T}_2 \neq \bar{M}_B / \bar{M}_A$, il est facile de vérifier que les droites de Boussinesq ne recouvrent jamais aucune droite f ou g, autrement dit on ne peut jamais avoir :

$$\frac{E-1}{E+1} = \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2} \quad \text{et} \quad \frac{2}{E+1} = \left(1 - \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2}\right) \left(1 - \frac{\bar{M}_B}{\bar{M}_A}\right)$$

d'une part,

ou :

$$\frac{F+1}{F-1} = \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2} \quad \text{et} \quad \beta = 0$$

d'autre part.

Cela suggère que pour qu'un fluide soit un fluide de Boussinesq, il n'y a pas de limitation sur E ou F séparément mais sur leur dépendance. En effet, les états du fluide (E,F) qui sont compatibles avec l'hypothèse de Boussinesq sont ceux qui vérifient :

$$\frac{F+1}{F+E} > \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2} \cdot \frac{F-1}{F+E} + \left(1 - \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2}\right) \left(1 - \frac{\bar{M}_B}{\bar{M}_A}\right)$$

c'est-à-dire :

$$\frac{\bar{M}_B}{\bar{M}_A} F > E - \left(1 - \frac{\bar{M}_B}{\bar{M}_A}\right) \cdot \frac{1 + \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2}}{1 - \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2}}$$

Dans le cas où l'on se donne la fraction massique moyenne \bar{W}_0 cette condition se traduit par la condition sur le flux interfacial tel que :

$$E < \frac{1 + \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2}}{1 - \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2}} \cdot \frac{1 - \frac{\bar{M}_B}{\bar{M}_A}}{1 - \frac{\bar{M}_B}{\bar{M}_A} \cdot \frac{\bar{W}_0}{1 - \bar{W}_0}}$$

Quand l'on fixe $\bar{T}_1, \bar{T}_2, \bar{M}_A, \bar{M}_B$, E et F (donc \bar{W}_1 et \bar{W}_2) de façon que les inégalités ci-dessus soient vérifiées, on détermine alors les valeurs des nombres de Rayleigh thermique et solutal Ra_T et Ra_M , pour un fluide donné (Pr et Le déjà connus) : Ra_T et Ra_M vérifient automatiquement la condition $Ra_T < |Ra_M| / Le$.

6.1.2.4. *Lorsque l'on fixe les valeurs de la fraction massique à la source et au puits*, \bar{W}_1 et \bar{W}_2 , le flux interfacial ne peut plus être arbitraire : E et F sont calculés à partir de \bar{W}_1 et \bar{W}_2 :

$$E = 2 \frac{1 - (\bar{W}_2 + \bar{W}_1)/2}{\bar{W}_2 - \bar{W}_1}, \quad F = \frac{\bar{W}_2 + \bar{W}_1}{\bar{W}_2 - \bar{W}_1} \quad (6.1.4)$$

Dans ce cas, pour un fluide donné, lorsque l'on se donne $\bar{T}_1, \bar{T}_2, \bar{M}_A, \bar{M}_B, \bar{W}_1, \bar{W}_2$, donc lorsque l'on se donne Ra_T et Ra_M , on détermine automatiquement E et F.

6.1.2.5. Si l'on fixe en même temps Ra_M , \bar{M}_A et \bar{M}_B , et l'un des couples (\bar{W}_1, \bar{W}_2) ou (E,F), il faut considérer que le groupe $\bar{\rho}_0 g(2H)^3 / \bar{\mu}_0 \bar{D}_{AB}$ varie également puisque

$$Ra_M = \frac{2\bar{\rho}_0 g(2H)^3}{\bar{\mu}_0 \bar{D}_{AB}} \cdot \frac{\bar{M}_B - \bar{M}_A}{E\bar{M}_A + E\bar{M}_B} \quad (6.1.5)$$

6.1.2.6. *En résumé*, si pour un fluide donné l'on se fixe $\bar{T}_1, \bar{T}_2, \bar{M}_A, \bar{M}_B$, E et F, on doit vérifier que :

$$\frac{\bar{M}_B}{\bar{M}_A} F > E - \left(1 - \frac{\bar{M}_B}{\bar{M}_A}\right) \cdot \frac{1 + \bar{T}_1/\bar{T}_2}{1 - \bar{T}_1/\bar{T}_2}$$

Les nombres de Rayleigh thermique Ra_T et solutal Ra_M sont déterminés, ainsi que les fractions massiques aux parois actives :

$$\bar{W}_2 = (F+1)/(F+E), \quad \bar{W}_1 = (F-1)/(F+E)$$

Les transitions de régime de convection et de diffusion définis au § 3.6.5 sont caractérisées par des valeurs « critiques » de E et F, E_c et F_c , obtenues à l'aide de considérations sur les divergences des vitesses partielles \bar{v}_A et \bar{v}_B .

Par contre lorsque, pour le même fluide donné, l'on se fixe $\bar{T}_1, \bar{T}_2, \bar{M}_A, \bar{M}_B, \bar{W}_1, \bar{W}_2$, on doit vérifier que :

$$\bar{W}_2 > \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2} \bar{W}_1 + \left(1 - \frac{\bar{T}_1}{\bar{T}_2}\right) / \left(1 - \frac{\bar{M}_B}{\bar{M}_A}\right)$$

Les nombres de Rayleigh thermique Ra_T et solutal Ra_M ,

$$Ra_M = \frac{2\bar{\rho}_0 g(2H)^3}{\bar{\mu}_0 \bar{D}_{AB}} \cdot \frac{(\bar{M}_B - \bar{M}_A)(\bar{W}_2 - \bar{W}_1)}{(\bar{M}_B - \bar{M}_A)(\bar{W}_2 + \bar{W}_1) + 2\bar{M}_A}$$

sont déterminés, ainsi que E, qui caractérise le flux interfacial, et F qui donne la fraction massique moyenne :

$$E = 2 \frac{1 - (\bar{W}_2 + \bar{W}_1)/2}{\bar{W}_2 - \bar{W}_1}, \quad F = \frac{\bar{W}_2 + \bar{W}_1}{\bar{W}_2 - \bar{W}_1}$$

Les transitions de régime introduiront alors des valeurs « critiques » de \bar{W}_1 et \bar{W}_2 , \bar{W}_{1c} et \bar{W}_{2c} , obtenues de la même façon que pour E et F.

6.1.3. Lien entre le comportement du fluide moyen, la compressibilité des composants A et B, et le flux interfacial aux parois actives

6.1.3.1. Pour un « fluide moyen » supposé incompressible ($\bar{\rho}$ constant), la vitesse moyenne

$$\vec{v} = \bar{W}_A \vec{v}_A + \bar{W}_B \vec{v}_B$$

est à divergence nulle. Puisqu'il y a conservation des espèces A et B, on a également les équations :

$$\text{div } \bar{W}_A \vec{v}_A = 0 \quad , \quad \text{div } \bar{W}_B \vec{v}_B = 0$$

qui correspondent à l'équation stationnaire de conservation des espèces. En particulier, pour l'espèce B, cela entraîne :

$$\text{div } \vec{v}_B = \frac{1}{1 - \bar{W}_A} \vec{v}_B \cdot \overrightarrow{\text{grad}} \bar{W}_A \quad (6.1.6)$$

Donc, la divergence de la vitesse du gaz inerte B est proportionnelle au produit scalaire de cette vitesse et du gradient de la fraction massique. Par suite, l'espèce B est incompressible si, en tout point, sa vitesse est perpendiculaire au gradient de la fraction massique. Dans ce cas, une recirculation de B est prévisible puisque dans la cavité, du fait des conditions aux limites aux parois actives et de l'imperméabilité des parois terminales, le gradient de \bar{W}_A change de direction (fig. 6.1.2).

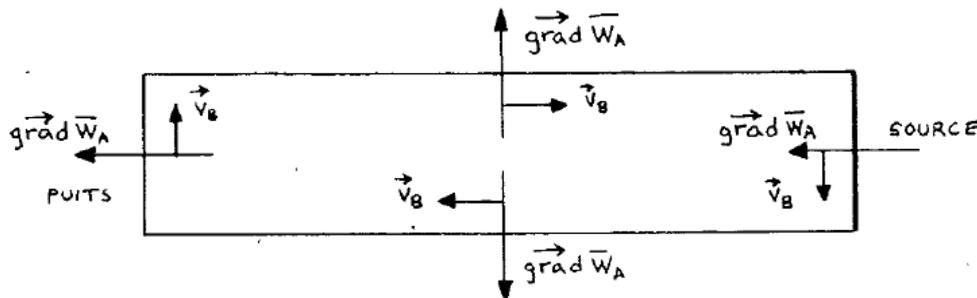


Fig. 6.1.2. Condition de recirculation de B

Comme B n'est pas nécessairement incompressible, la recirculation n'a pas toujours lieu, ainsi que doivent le montrer les champs de vitesse \vec{v}_B .

Les cas où la recirculation de B est constatée doivent correspondre à des valeurs des paramètres de l'écoulement conduisant à $\text{div } \vec{v}_B = 0$, c'est-à-dire à une quasi-incompressibilité partielle de B.

6.1.3.2. On le voit en exprimant sous forme adimensionnelle la divergence de \vec{v}_B en fonction de E :

$$\text{div } \vec{v}_B = \left(\frac{\vec{v}}{E - W} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}} W}{Le(E - W)^2} \right) \cdot \overrightarrow{\text{grad}} W \quad (6.1.7)$$

compte tenu des relations qui donnent \vec{v}_B en fonction de \vec{v} et $\overrightarrow{\text{grad}} W$ (relations 3.7.6-7).

La relation ci-dessus montre que si E devient suffisamment grand (donc si le flux interfacial diminue), alors la divergence de \vec{v}_B devient très petite, et donc B est presque incompressible.

6.1.3.3. Si, comme cela arrive pour de grandes valeurs de E, $\bar{\rho}_B$ varie peu dans toute la cavité, alors

$\bar{\rho}_A$ varie peu aussi dans toute la cavité, puisque $\bar{\rho} = \bar{\rho}_A + \bar{\rho}_B$, et donc on peut observer la recirculation de l'espèce A, même près des parois actives où, malgré la colinéarité locale de \vec{v}_A et de $\vec{\text{grad}} W$, le flux interfacial est si faible que l'espèce A est immédiatement entraînée dans une direction perpendiculaire à $\vec{\text{grad}} W$, dès qu'elle se trouve à une distance assez faible des parois actives. Dans ce cas, le gradient de la fraction massique W varie peu dans la cavité et, par suite, les lignes iso-fractions massiques sont équidistantes.

L'influence de E et de F sur le comportement de A dans la cavité peut être analysée en exprimant le divergence de la vitesse de A :

$$\text{div } \vec{v}_A = \left(\frac{\vec{v}}{W+F} - \frac{\vec{\text{grad}} W}{\text{Le}(F+W)^2} \right) \cdot \vec{\text{grad}} W \quad (6.1.8)$$

Pour E fixé, la valeur de F détermine la fraction massique moyenne \bar{W}_0 par : $F = E \bar{W}_0 / (1 - \bar{W}_0)$. C'est pourquoi même si E est suffisamment grand pour entraîner une faible valeur de $\text{div } \vec{v}_B$, le nombre F peut être suffisamment petit pour ne pas entraîner une valeur aussi faible de $\text{div } \vec{v}_A$, dans le cas où la fraction massique moyenne \bar{W}_0 est trop petite.

Tout le problème est de déterminer ce qu'il faut comprendre par « valeurs suffisamment grandes » de E et de F . Pour évaluer ces valeurs de transition de régime, qui entraîneront la recirculation de A ou de B, ou des deux en même temps, ainsi que l'importance relative du flux interfacial par rapport au flux convectif (puisque E intervient à la fois dans \vec{v}_B et dans le flux interfacial), il faut évaluer les ordres de grandeur de $\text{div } \vec{v}_A$ et de $\text{div } \vec{v}_B$ exprimées sous forme adimensionnelle.

6.1.4. Évaluations des ordres de grandeur de E et de F pour lesquelles il y a transition de régime

6.1.4.1. Écrivons l'expression adimensionnelle de la divergence de la vitesse de B afin de chercher à évaluer pour quelles valeurs de E elle est proche de zéro :

$$\text{div } \vec{v}_B = \frac{u}{E-W} \frac{1}{\ell} \frac{\partial W}{\partial x} + \frac{v}{E-W} \frac{\partial W}{\partial y} + \frac{1}{\ell^2} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 \frac{1}{\text{Le}(E-W)^2} + \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 \frac{1}{\text{Le}(E-W)^2} \quad (6.1.9)$$

Le raisonnement repose sur les deux points suivants :

(i) On néglige toute variation dans le sens des x par rapport à celle dans le sens y , ce qui suppose que le tube est suffisamment long :

$$\frac{1}{\ell} \frac{\partial W}{\partial x} = 0$$

L'expression de $\text{div } \vec{v}_B$ se simplifie en :

$$\text{div } \vec{v}_B \sim v + \frac{1}{\text{Le}} \frac{1}{E-W} \frac{\partial W}{\partial y}$$

(ii) Il est possible d'exprimer la divergence de \vec{v}_B en fonction des paramètres caractéristiques en explicitant les variables v , W et $\partial W / \partial y$ à leurs valeurs qui rendent chacun des termes du membre de droite maximum. Ces valeurs sont les conditions correspondant à une répartition linéaire de W donnant $W = \pm 1$ et $\partial W / \partial y = 1$. Pour v , il s'agit de l'expression fournie par la solution asymptotique en régime de type conductif.

Pour assurer $\text{div } \vec{v}_B \sim 0$ on considère que les différents termes ainsi évalués se compensent d'où il découle une relation entre les paramètres caractéristiques.

Lors de la transition entre le régime où le flux interfacial domine le flux convectif, et celui où c'est le flux convectif qui domine le flux interfacial, la valeur maximale de la vitesse horizontale v peut être prise égale à la vitesse caractéristique des écoulements convectifs :

$$v^* = \pm \frac{|\text{Ra}_{\text{eq}}| \ell^3}{16 \times 9 \sqrt{3}}$$

Le terme $\frac{1}{\text{Le}(E-W)} \frac{\partial W}{\partial y}$ est maximal pour $\partial W / \partial y = 1$ et $W = 1$. Si $\text{div } \vec{v}_B \sim 0$ on a alors :

$$E-1 \sim -\frac{1}{\text{Le} v^*} = \mp \frac{1}{\text{Le} |\text{Ra}_{\text{eq}}| \ell^3}$$

E étant toujours plus grand que l'unité, cette égalité n'est possible que si v^* est négative, c'est-à-dire lorsque l'écoulement moyen est dans une zone de la cavité où il circule de la source vers le puits. Dans ce cas la valeur de E, lorsqu'elle est de l'ordre de :

$$E \sim 1 + \frac{16 \times 9 \sqrt{3}}{\text{Le} |\text{Ra}_{\text{eq}}| \ell^3} \quad (6.1.10)$$

représente une valeur de transition au-delà de laquelle le gaz B présente une recirculation localisée dans les zones de la cavité où l'écoulement se développe de la source vers le puits.

On remarque que cette valeur de E est égale à celle de E_c pour laquelle le flux convectif commence à être prépondérant par rapport au flux interfacial.

Cette coïncidence n'est pas fortuite. Dans l'analyse précédente, E_c figure la transition en régime dominé par la diffusion et régime dominé par la convection. Pour $E > E_c$, la convection donnait source à une perturbation très importante de la répartition des espèces, donc à une compressibilité partielle constante. Suite à l'analyse présente, il apparaît que la recirculation de \vec{v}_B pour ce régime traduit un entraînement par le fluide moyen. Dans le cas où $E < E_c$ il s'agit d'un régime diffusif correspondant à de « fortes » vitesses caractéristiques. Ce flux moyen entraîne une variation importante des fractions massiques, avec accumulation vers le puits. L'analyse ci-dessus montre qu'il n'y a alors qu'un mouvement de retour de la composante inerte vers la source, et qui traduit la réaction à l'accroissement de la densité de B dans la zone du puits, en raison de la conservation du débit masse de l'espèce B. Si donc, à un régime convectif de base, caractérisé par Ra_{eq} , on superpose un flux interfacial caractérisé par E tel que

$$E > 1 + \frac{16 \times 9 \sqrt{3}}{\text{Le} |\text{Ra}_{\text{eq}}| \ell^3}$$

la divergence de la vitesse de A

$$\text{div } \vec{v}_A = \frac{u}{W+F} \frac{1}{\ell} \frac{\partial W}{\partial x} + \frac{v}{W+F} + \frac{v}{W+F} \frac{\partial W}{\partial y} - \frac{1}{\text{Le}(W+F)^2} \frac{1}{\ell^2} \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{1}{\text{Le}(W+F)^2} \frac{\partial W}{\partial y} \quad (6.1.11)$$

est proche de zéro lorsque, avec les mêmes hypothèses que pour $\text{div } \vec{v}_B$ on a approximativement :

$$v - \frac{1}{\text{Le}(W+F)} \frac{\partial W}{\partial y} \sim 0$$

Chacun des termes de cette expression est maximal pour $v = v^*$, $\partial W / \partial y = 1$ et $W = -1$, et donc

$$\pm \frac{\text{Ra}_{\text{eq}} \ell^3}{16 \times 9 \sqrt{3}} \sim \frac{1}{\text{Le}(F-1)}$$

Cette égalité n'est possible que si v^* est positive, c'est-à-dire lorsque l'écoulement est dans une zone où il est orienté du puits vers la source, puisque $F - 1 > 0$. Dans ce cas, la valeur de F, lorsqu'elle est de l'ordre de :

$$F \approx 1 + \frac{16 \times 9 \sqrt{3}}{\text{Le} |\text{Ra}_{\text{eq}}| \ell^3} \quad (6.1.12)$$

représente une valeur de transition à partir de laquelle l'agent de transport A présente une recirculation dans les zones de la cavité où l'écoulement est orienté du puits vers la source. Cette valeur de transition de F est égale à celle de E, elle-même égale à E_c .

Si donc, à un régime convectif de base, caractérisé par Ra_{eq} , on superpose un flux interfacial caractérisé par E, et si l'on fixe la valeur moyenne \bar{W}_0 de la fraction massique telle que

$$F > 1 + \frac{16 \times 9 \sqrt{3}}{Le |Ra_{eq}| \ell^3}$$

on doit s'attendre à une recirculation du gaz A dans les endroits de la cavité où l'écoulement moyen est orienté du puits vers la source. Ce sont dans ces zones que $\text{div } \vec{v}_A$ est proche de zéro.

6.1.5. Récapitulation

6.1.5.1. Dans le cas d'un tube de croissance cristalline horizontal, on sait que $Ra_{eq} < 0$ et que le fluide moyen descend au voisinage de la source et monte au voisinage du puits. De plus, la présence d'un flux interfacial caractérisé par E permet de prévoir la présence ou l'absence de zones de recirculation de A et B, selon les valeurs que peut prendre la fraction massique moyenne \bar{W}_0 (donc les valeurs que peut prendre F).

Les considérations que nous avons proposées dans ce paragraphe offrent de façon plus qualitative que précise, des critères de transition de régime que l'on peut classer en trois familles principales :

a) – Le flux interfacial est très important (c'est-à-dire E est proche de 1), d'où $\text{div } \vec{v}_A$ et $\text{div } \vec{v}_B$ sont très différentes de zéro : les fluides A et B ne recirculent pas et donc le fluide moyen non plus. De plus, A et B étant fortement compressibles, la fraction massique W varie fortement, et les configurations d'iso-W font apparaître une zone proche du puits où elles sont très resserrées, traduisant ainsi une forte augmentation de la densité de l'espèce.

b) – Le flux interfacial est tel que E est de l'ordre de E_c , tandis que la fraction massique moyenne \bar{W}_0 est telle que F reste inférieur à E_c : dans ce cas, une zone de recirculation de B devient possible, tandis que A recircule très peu. Avec la valeur E_c atteinte, l'écoulement moyen est le résultat d'une compétition entre le flux interfacial et le flux convectif.

c) – E et F ont dépassé tous deux E_c : le flux convectif est prédominant par rapport au flux interfacial et les deux gaz A et B présentent de larges zones de recirculation. Ils sont alors presque incompressibles chacun. Le nombre de lignes de courant joignant la source au puits diminue fortement : les iso-fractions massiques sont équidistantes et le gradient de W dans le sens horizontal est de l'ordre de 1 : $\partial W / \partial y \sim 1$. le fluide moyen présente un large rouleau de convection transversal qui est étendu sur toute la section de la cavité et qui annule presque totalement les effets du flux interfacial.

Sur le diagramme (\bar{W}_2, \bar{W}_1) le cas (b) correspond à une droite $E = E_c$, tandis que le cas (c) correspond au point $E = F = E_c$. À cette transition correspondent alors des valeurs de \bar{W}_2 et \bar{W}_1 calculées à partir des valeurs de E_c , et notées \bar{W}_{2c} , \bar{W}_{1c} :

$$\bar{W}_{2c} = \frac{2 + \sigma}{2(1 + \sigma)}, \quad \bar{W}_{1c} = \frac{\sigma}{2(1 + \sigma)} \quad (6.1.13)$$

avec : $\sigma = \frac{16 \times 9 \sqrt{3}}{Le |Ra_{eq}| \ell^3}$, ainsi que la fraction massique moyenne :

$$\bar{W}_{0c} = 1/2$$

$Ra_{eq} < 0$						
cas	E	F	$\partial W/\partial y$	Comportement de \vec{v}_A	Comportement de \vec{v}_B	Comportement du fluide moyen
(a)	~ 1	~ 1	$\gg 1$ vers le puits	Ne recircule pas	Ne recircule pas	Ne recircule pas
(b)	$= E_c$	$< E_c$	> 1 vers le puits	Ne recircule presque pas	recircule	Ne recircule presque pas
(c)	$> E_c$	$> E_c$	~ 1	recircule	recircule	recircule

Tableau 6.1.1. Types de comportements du fluide

6.1.5.2. Nous pourrions donner aux cas (a), (b), (c) les noms de régimes suivants :

- (a) : fortement diffusionnel (prédominance du flux interfacial),
- (b) : mixte (le flux convectif et le flux interfacial ont des effets de même ordre d'importance),
- (c) : quasi-convectif (prédominance du flux convectif sur le flux interfacial).

Le cas (a) donne une variation de la fraction massique W très prononcée dans la direction y et donc proche du modèle 1D.

Les comportements du fluide moyen et des deux espèces A et B, tels qu'ils sont prévus qualitativement dans la tableau 6.1.1, ont été observés.

En choisissant $Ra_T = 0$, $Ra_M = -6400$, $\ell = 0,25$, $Le = 1$, $Pr = 1$, nous fixons la valeur critique de E et F à : $E_c = 3,49$.

Nous constatons d'abord que pour des valeurs de E proches de 1, la fraction massique varie très fortement vers le puits. À partir des valeurs de E de l'ordre de 3,49, la variation de W est moins prononcée (Fig. 6.1.4 et 6.1.5). On peut comparer ces résultats à ceux obtenus dans le modèle 1D : $\partial W/\partial y(0,y)$ est d'autant plus proche de 1 que le nombre de Péclet Pe_M^* est petit (c'est-à-dire que E est très grand) (Fig. 6.1.3).

Pour un flux interfacial choisi tel que E soit plus grand que $E_c = 3,49$ ($E = 10$ par exemple) (Fig. 6.1.6), on constate que le fluide moyen et l'espèce B recirculent, comme prévu. Si, dans ce cas, F est proche de 1, l'écoulement de A est presque 1D, tandis qu'à partir de $F \sim 3,49$, on observe une faible recirculation de A, comme l'a supposé le tableau 6.1.1.

Pour un flux interfacial choisi tel que E soit plus petit que 3,49, ($E = 1,20$ par exemple) (Fig. 6.1.7), on voit que le fluide moyen et B ne recirculent presque pas. La vitesse de A, qui s'exprime en fonction de F, commence à présenter une petite zone de faible recirculation pour $F > 3,49$ (pour $F = 10$, en particulier).

6.1.5.3. En croissance cristalline, pour des ampoules horizontales, on peut aussi envisager les cas où Ra_{eq} est très proche de zéro tout en ayant Ra_T légèrement inférieur à $|Ra_M|/Le$ (Fig. 6.1.8 et 6.1.9). Ces cas correspondent à des écoulements où la convection thermique, qui tend à faire tourner le fluide dans le sens ascendant à la source, s'oppose à la convection solutale, qui tend à faire tourner le fluide dans le sens descendant à la source.

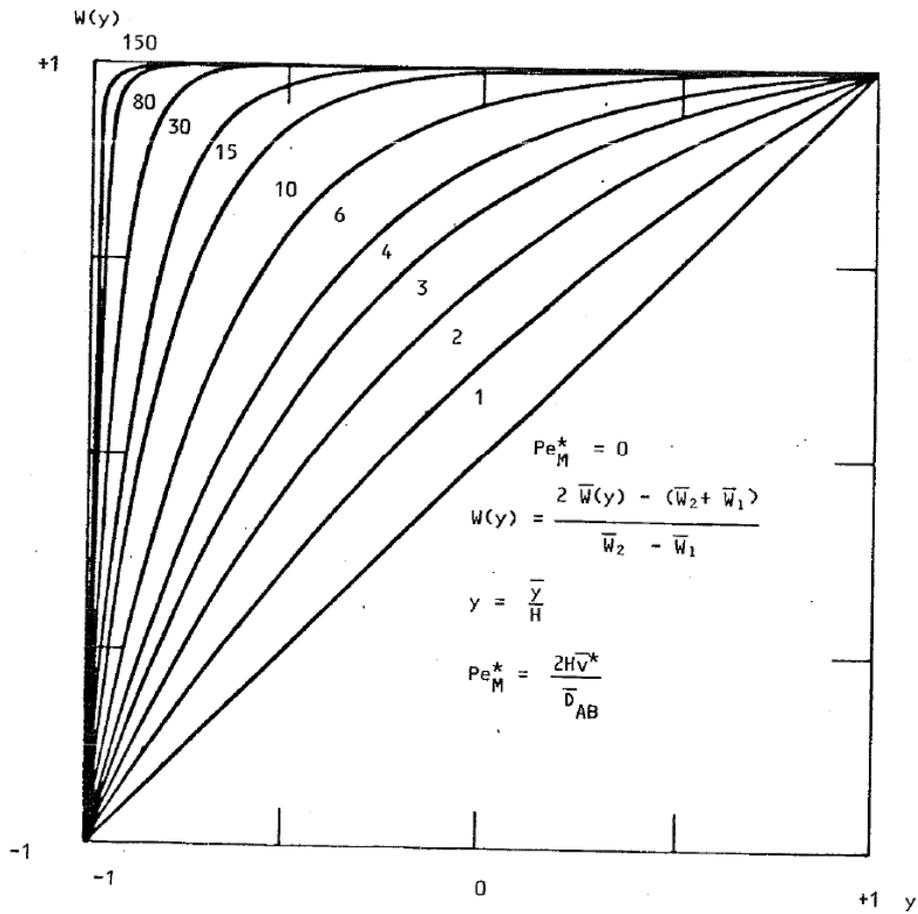


Fig. 6.1.3. Profil de la fraction massique dans le modèle 1D

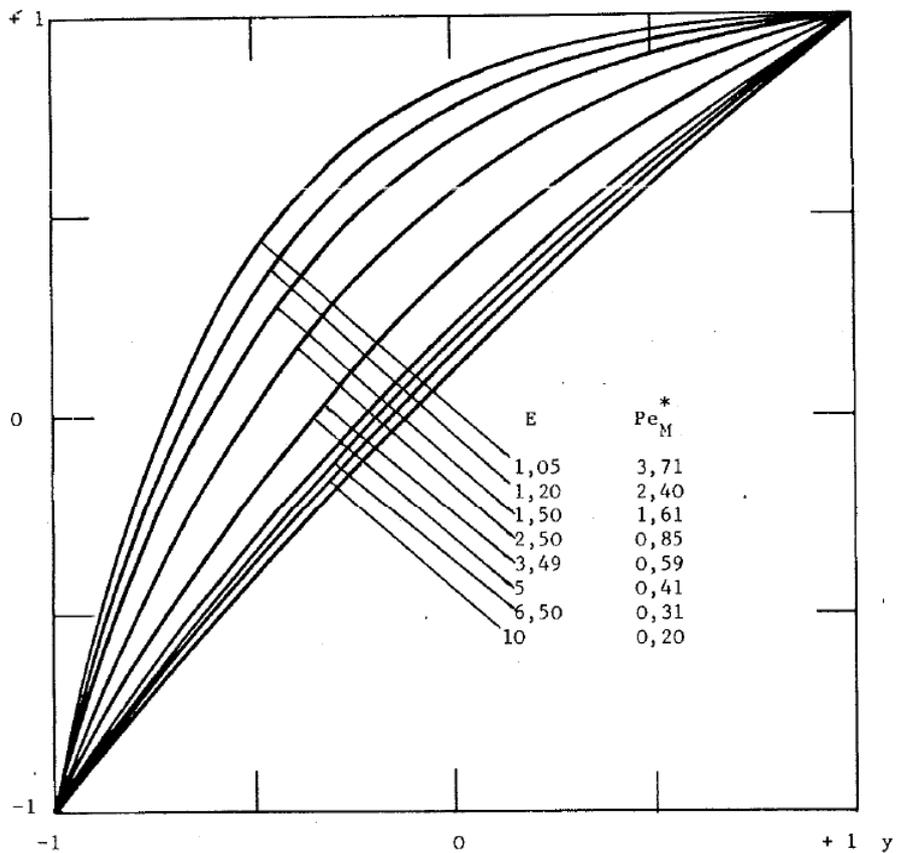


Fig. 6.1.4. Profil longitudinal de la fraction massique $W(0,y)$ dans le modèle 2D
 ($Ra_T = 0$, $Ra_M = -6400$, $\ell = 0,25$, $Le = 1$, $Pr = 1$)

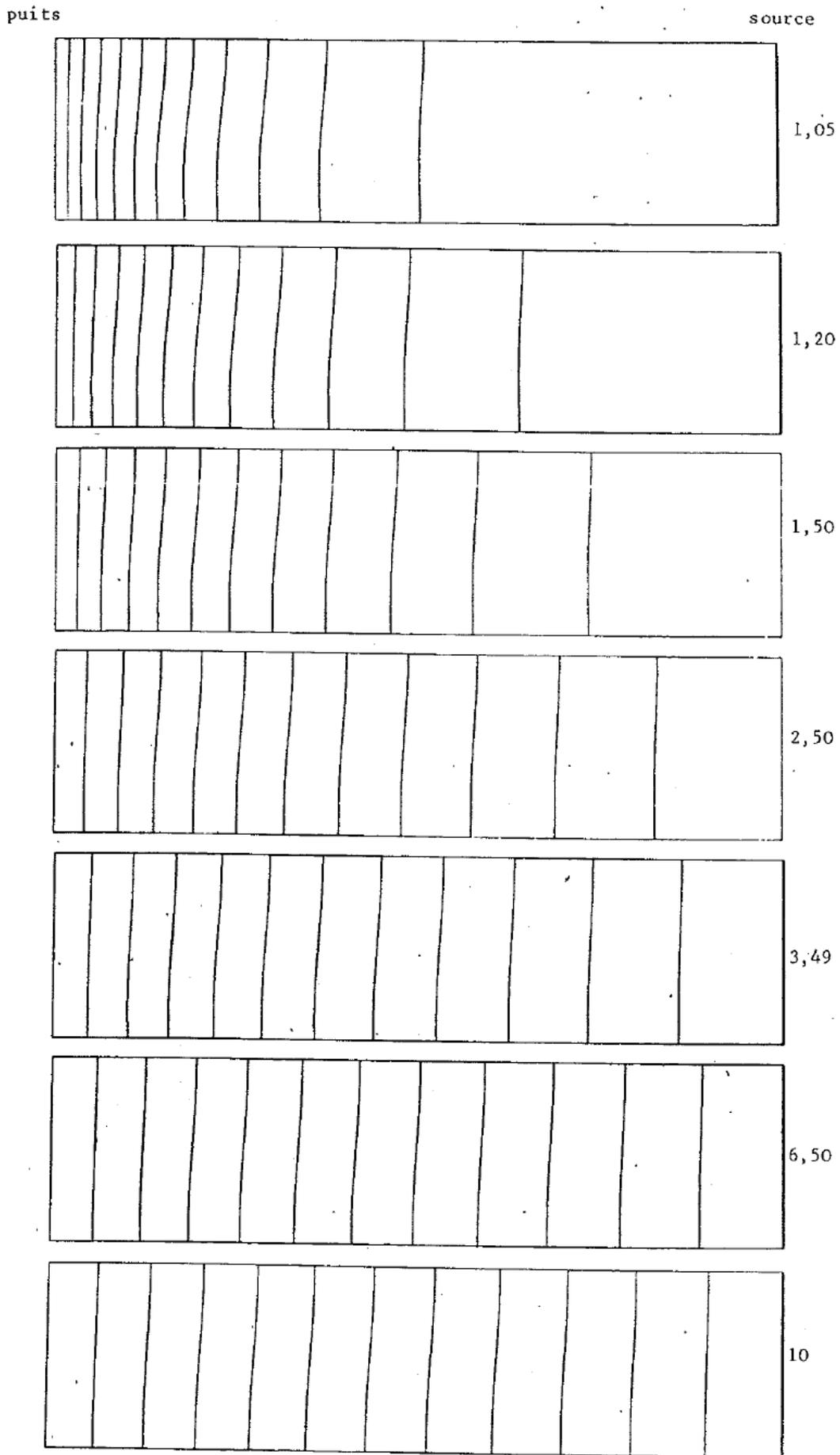


Fig. 6.1.5. Effets de E sur W ($Ra_T = 0$, $Ra_M = -6400$, $\ell = 0,25$, $Le = 1$, $Pr = 1$)

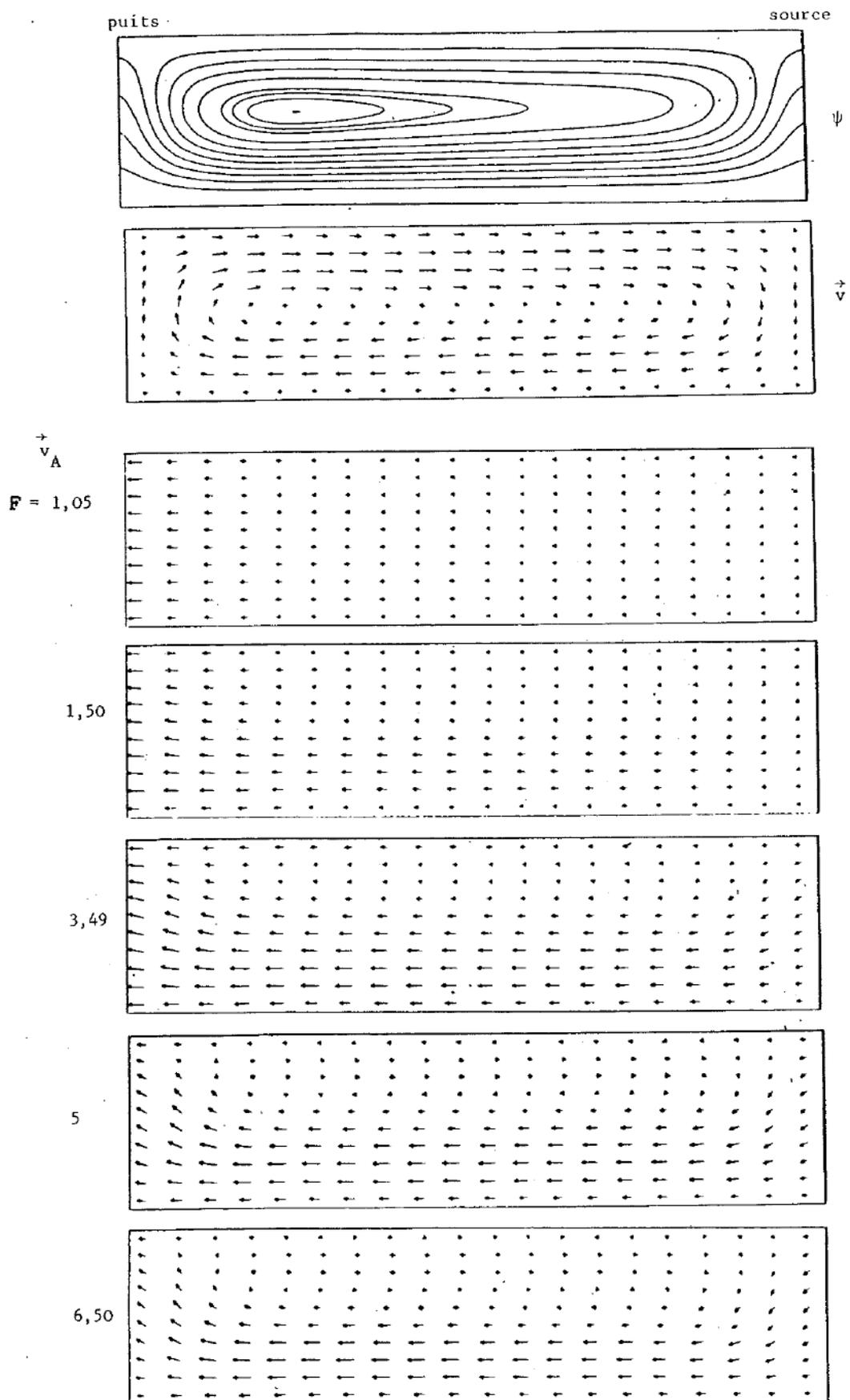


Fig. 6.1.6. Effets de F pour $E = 10$
 ($Ra_T = 0$, $Ra_M = -6400$, $Le = Pr = 1$, $\ell = 0,25$, $E = 10$)

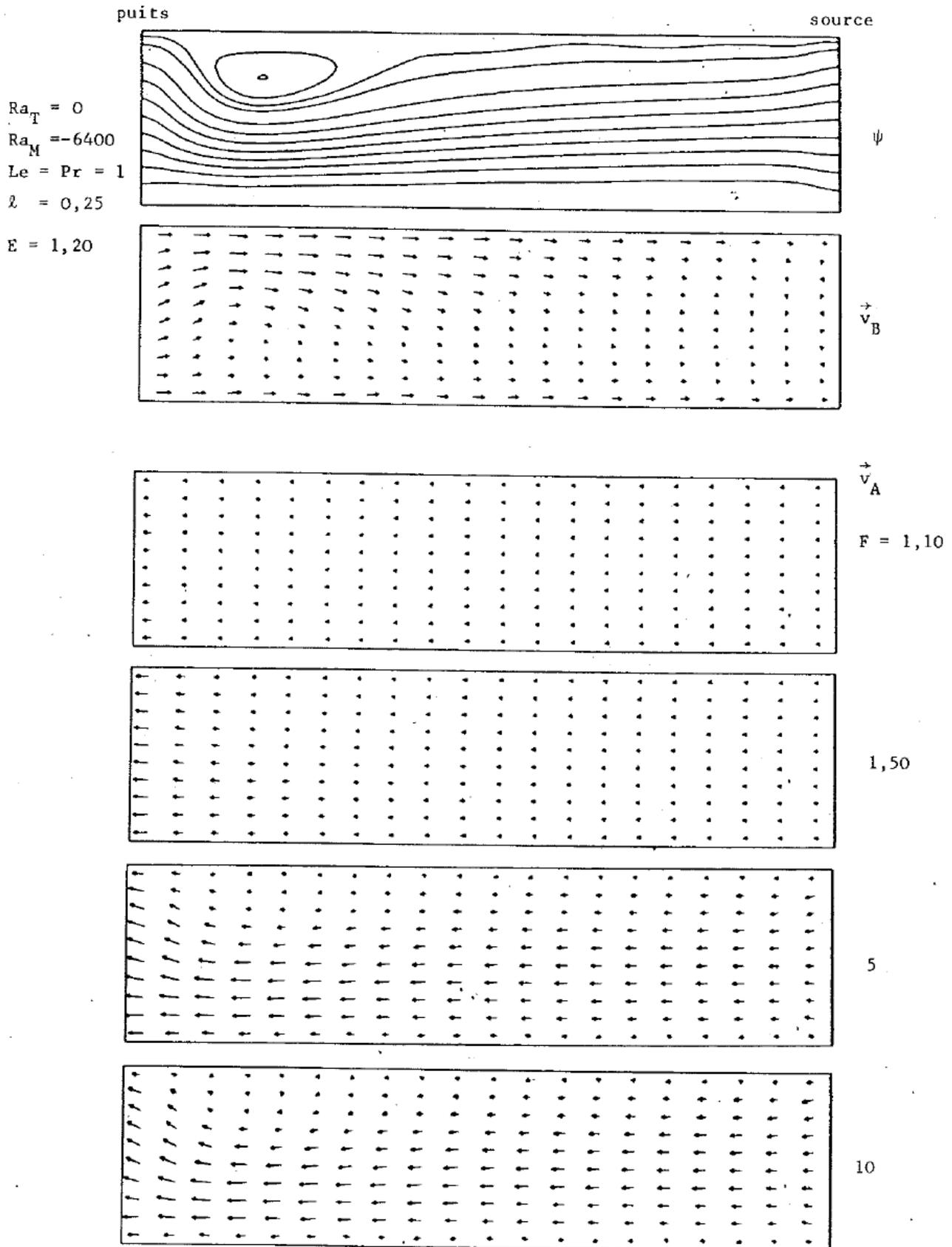


Fig. 6.1.7. Effets de F pour $E = 1,20$
 ($Ra_T = 0$, $Ra_M = -6400$, $Le = Pr = 1$, $\ell = 0,25$, $E = 1,20$)

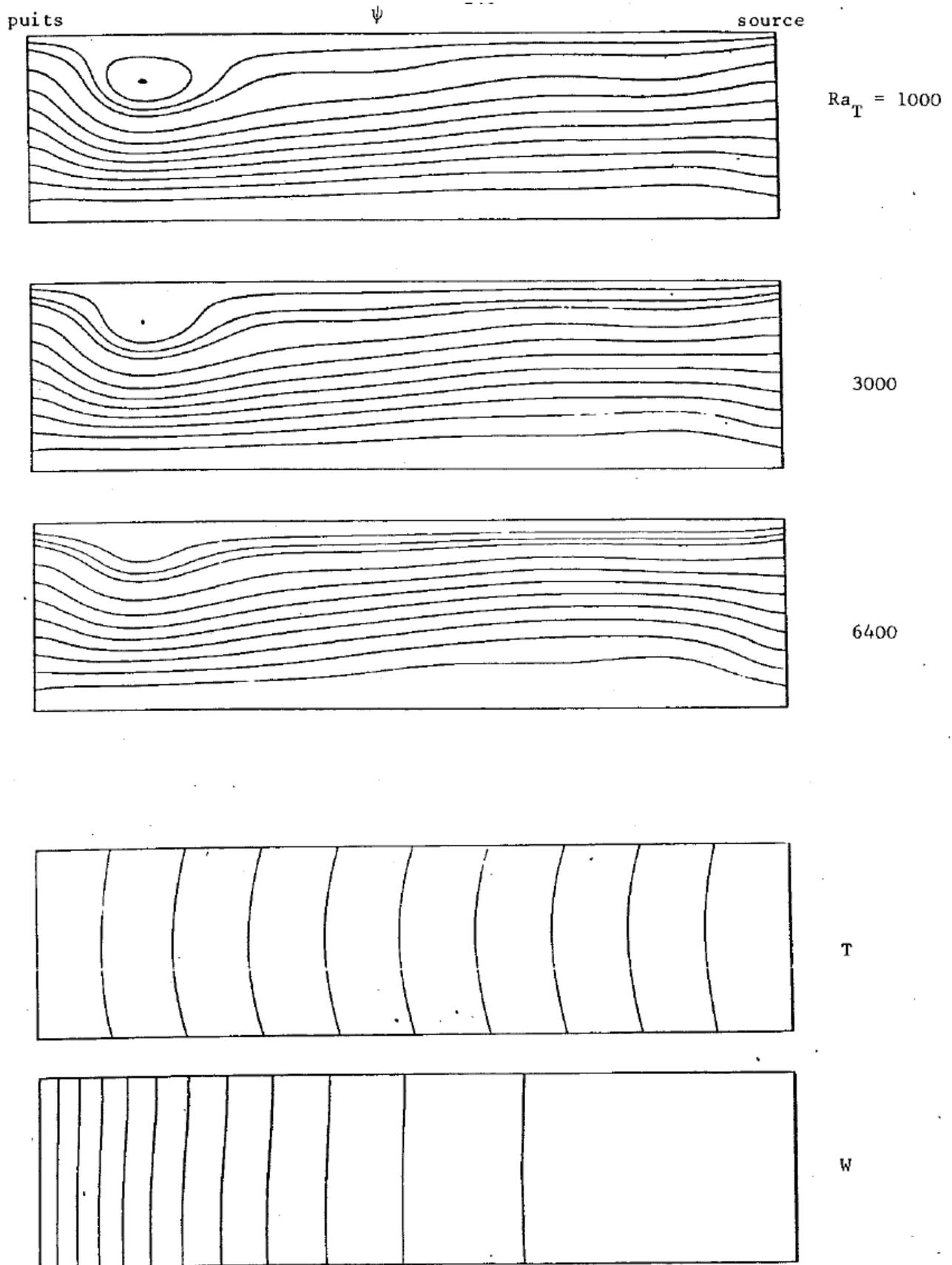


Fig.6.1.8. Effets de Ra_{eq} pour d'importants flux interfaciaux
 ($Ra_M = -6400$, $Le = Pr = 1$, $\ell = 0,25$, $E = 1,20$, $F = 10$)

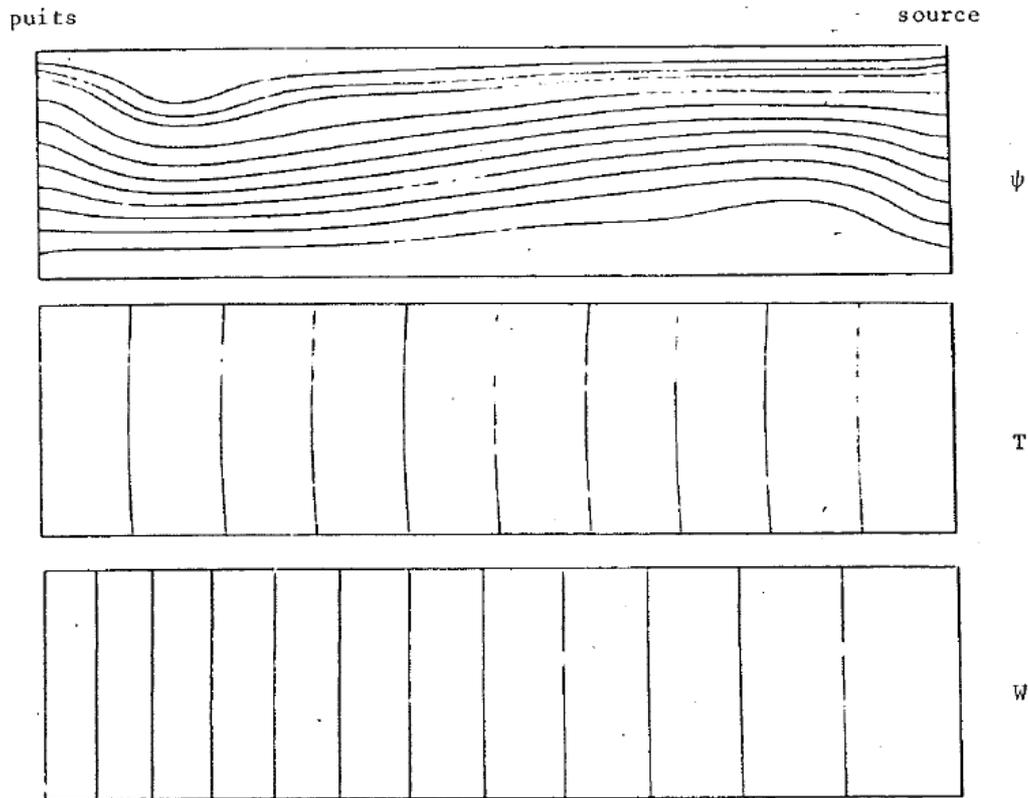


Fig. 6.1.9. Effet de $Ra_{eq} \sim 0$ pour un flux interfacial modéré
 ($Ra_T = 6400$, $Ra_M = -6400$, $Le = 1$, $Pr = 1$, $\ell = 0,25$, $E = 5$, $F = 10$)

Dans ces configurations, les effets de la poussée d'Archimède s'annulent et le fluide ne présente aucun mouvement de recirculation : le flux interfacial prédomine alors fortement.

Compte tenu de l'analyse en ordres de grandeurs que nous avons proposée, on peut expliquer le comportement du fluide dans le cas présent, en remarquant que si Ra_{eq} est très proche de zéro, les valeurs de transition E_c de E et de F sont très élevées et donc, dans le diagramme (\bar{W}_2, \bar{W}_1) , quel que soit le choix des valeurs de E et de F à l'intérieur de la « zone de Boussinesq », le fluide sera soumis à un régime du type fortement diffusionnel (a).

6.1.5.4. **Les cas où $Ra_{eq} \approx 0$** peuvent aussi correspondre à des nombres de Rayleigh thermique Ra_T et solutal Ra_M tous deux proches de zéro (fig. 6.1.10, 6.1.11). dans ces cas, comme précédemment, la transition (a) \rightarrow (b) est rarement atteinte quels que soient le flux interfacial (caractérisé par E) et la fraction massique moyenne (caractérisée par F). Le cas où Ra_T et Ra_M sont très petits correspond à une cavité presque isotherme contenant deux espèces chimiques de même masse molaire. La masse volumique du fluide moyen $\bar{\rho}$ est donc constante même dans le terme de poussée d'Archimède, et le fluide est complètement incompressible : sur le diagramme (\bar{W}_2, \bar{W}_1) il n'y a donc plus de « droite de Boussinesq ». le nombre de Rayleigh solutal Ra_M restera approximativement nul quelles que soient les valeurs différentes \bar{W}_2 et \bar{W}_1 de la fraction massique à la source et au puits, automatiquement imposées dès que l'on fixe le flux interfacial et la fraction massique moyenne (c'est-à-dire E et F). En effet :

$$Ra_M = \frac{2\bar{\rho}_0 g (2H)^3}{\alpha_0 \bar{D}_{AB}} \frac{\bar{M}_B - \bar{M}_A}{E \bar{M}_A + F \bar{M}_B} = 0$$

si seulement $\bar{M}_A = \bar{M}_B$.

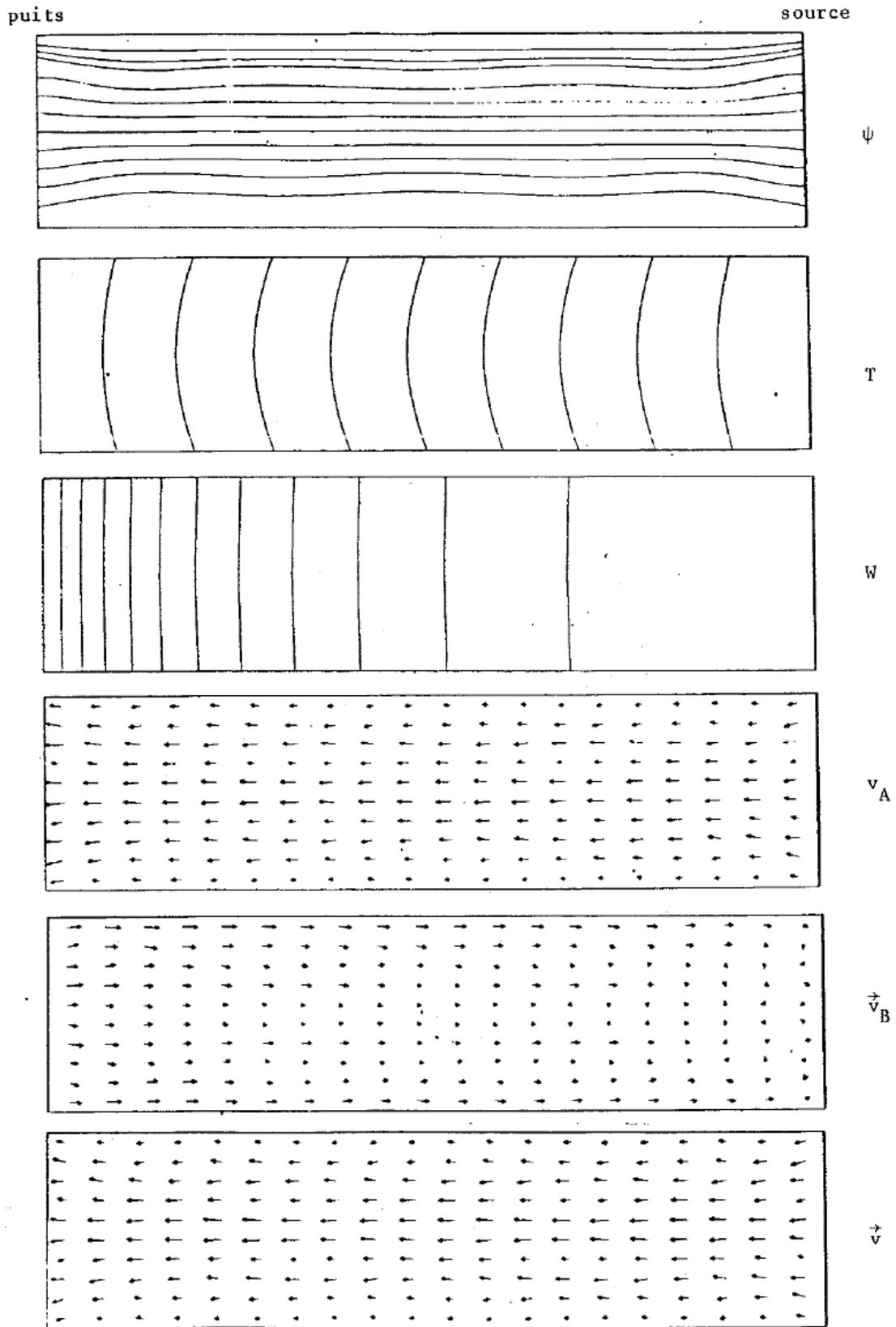


Fig. 6.1.10. Effet de Ra_T et $Ra_M \sim 0$
 ($Ra_T \sim 0$, $Ra_M \sim 0$, $Le = Pr = 1$, $\ell = 0,25$, $E = 1,20$, $F = 10$)

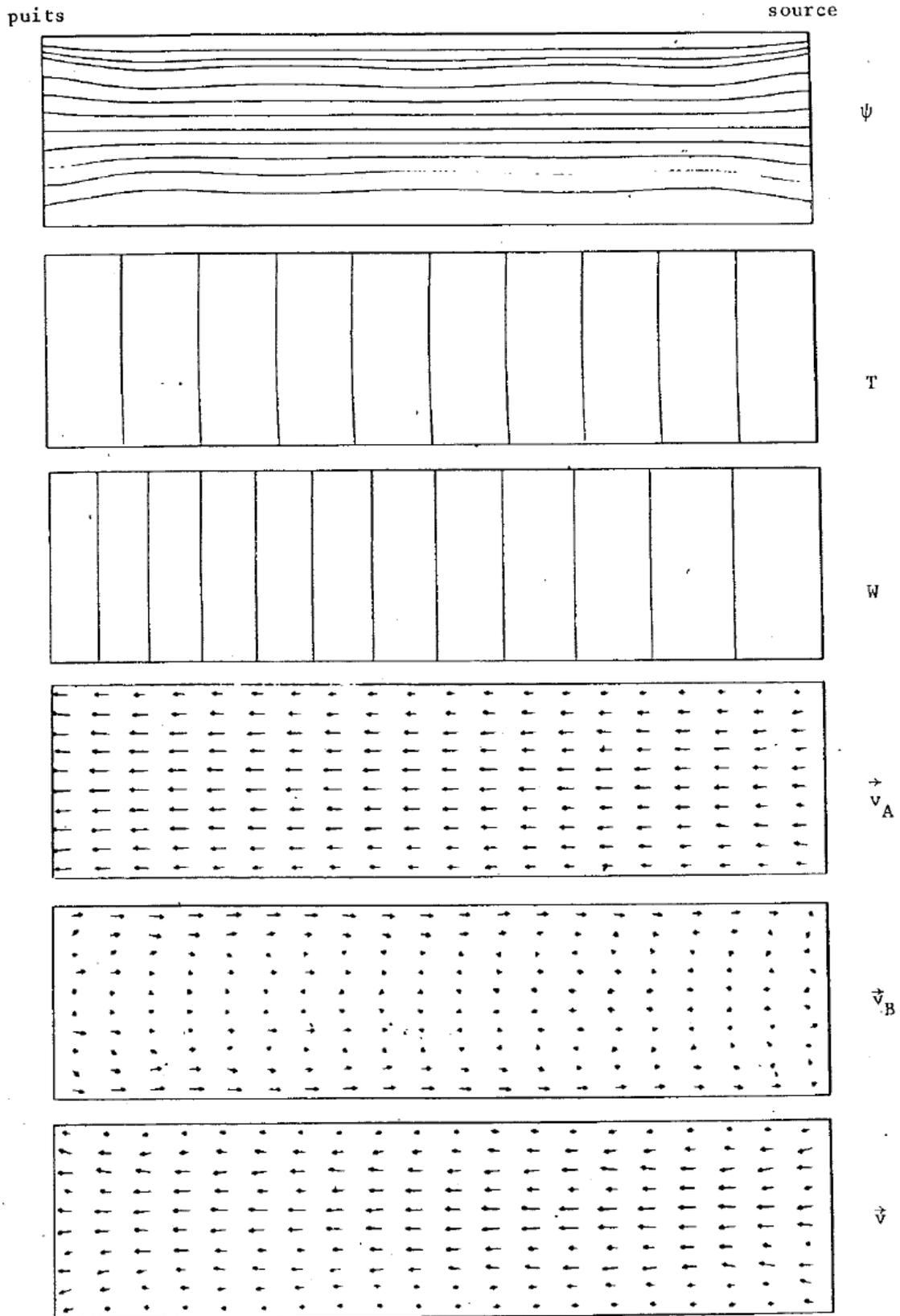


Fig. 6.1.11. Effet de Ra_T et $Ra_M \sim 0$
 ($Ra_T \sim 0$, $Ra_M \sim 0$, $Le = Pr = 1$, $\ell = 0,25$, $E = 10$, $F = 30$)

6.1.5.5. **Dans les cas où les nombres de Rayleigh Ra_T et Ra_M sont nuls**, nous pouvons mentionner une étude faite par Ouazzani et Peyret (1984) pour une ampoule de croissance de section longitudinale carrée ($\ell = 1$). Cette étude tient compte des effets de compressibilité du fluide et n'utilise donc pas le modèle de Boussinesq.

Nous avons traité les cas proposés par cette étude à l'aide du modèle physique auquel nous nous sommes restreints. Ces cas correspondent à :

- (i) $Pr = 1$, $Le = 0,103$, $E = 1,61$
- (ii) $Pr = 1$, $Le = 1$, $E = 8,04$

Nous avons effectué les calculs avec des nombres de Rayleigh non nuls, mais très petits (10^{-2}).

Pour $E = 1,61$ (fig. 6.1.12 a et b), les résultats montrent des configurations qui correspondent à ce que l'on pouvait prévoir avec notre analyse : fort gradient solutal vers le puits, isothermes très déformés dues au mouvement du fluide, prédominance du flux interfacial avec absence de zone de recirculation du fluide moyen.

Les résultats d'Ouazzani et Peyret ont à peu près les mêmes caractéristiques pour la fraction massique et les lignes de courant. Cependant, la vitesse \vec{v}_B du gaz inerte que nous avons obtenue présente une recirculation relativement faible vers la source ; ceci n'est pas le cas dans les résultats d'Ouazzani et Peyret, où la recirculation de B est généralisée dans la cavité.

On peut essayer d'expliquer cette différence en invoquant des effets de compressibilité, ou en remarquant que le profil de la composante horizontale de la vitesse à la source introduite par ces auteurs n'est pas régulier. On peut aussi remarquer que dans les calculs présents, il est nécessaire de fixer non seulement la valeur de E (qui est obtenue directement à partir des conditions fixées par Ouazzani et Peyret), mais aussi celle de F ($F = E\bar{W}_0/(1-\bar{W}_0)$), c'est-à-dire de \bar{W}_0 qui n'est pas déductible de ces conditions. Pour les calculs présentés, on a pris arbitrairement $F = 3E$, c'est-à-dire $\bar{W}_0 = 0,75$ (cf. Rosenberger et al).

Pour $E = 8,04$ (fig. 6.1.13 a et b), nous observons un resserrement des lignes de courant autour de l'axe horizontal de la cavité, une faible déformation des isothermes, et un gradient solutal moins élevé vers le puits.

Pour la vitesse \vec{v}_B , on peut faire les mêmes constatations que dans le cas $E = 1,61$.

Le resserrement des lignes de courant constaté avec une augmentation de E laisse présager que pour de très faibles flux interfaciaux (E grand) l'écoulement finirait par se décaler aux parois terminales, laissant deux zones de recirculation symétriques par rapport à l'axe horizontal.

Cela semblerait être un effet de la géométrie de la cavité : pour $\ell = 1$, le confinement du fluide s'opposerait à l'apparition de zones de recirculation axisymétriques dans le cas d'un fluide où Ra_T et Ra_M sont négligeables.

Les critères donnés en 6.1.5.4 pour les cas où Ra_T et Ra_M sont proches de zéro sont donc limités à des cavités d'allongement $\ell < 1$.

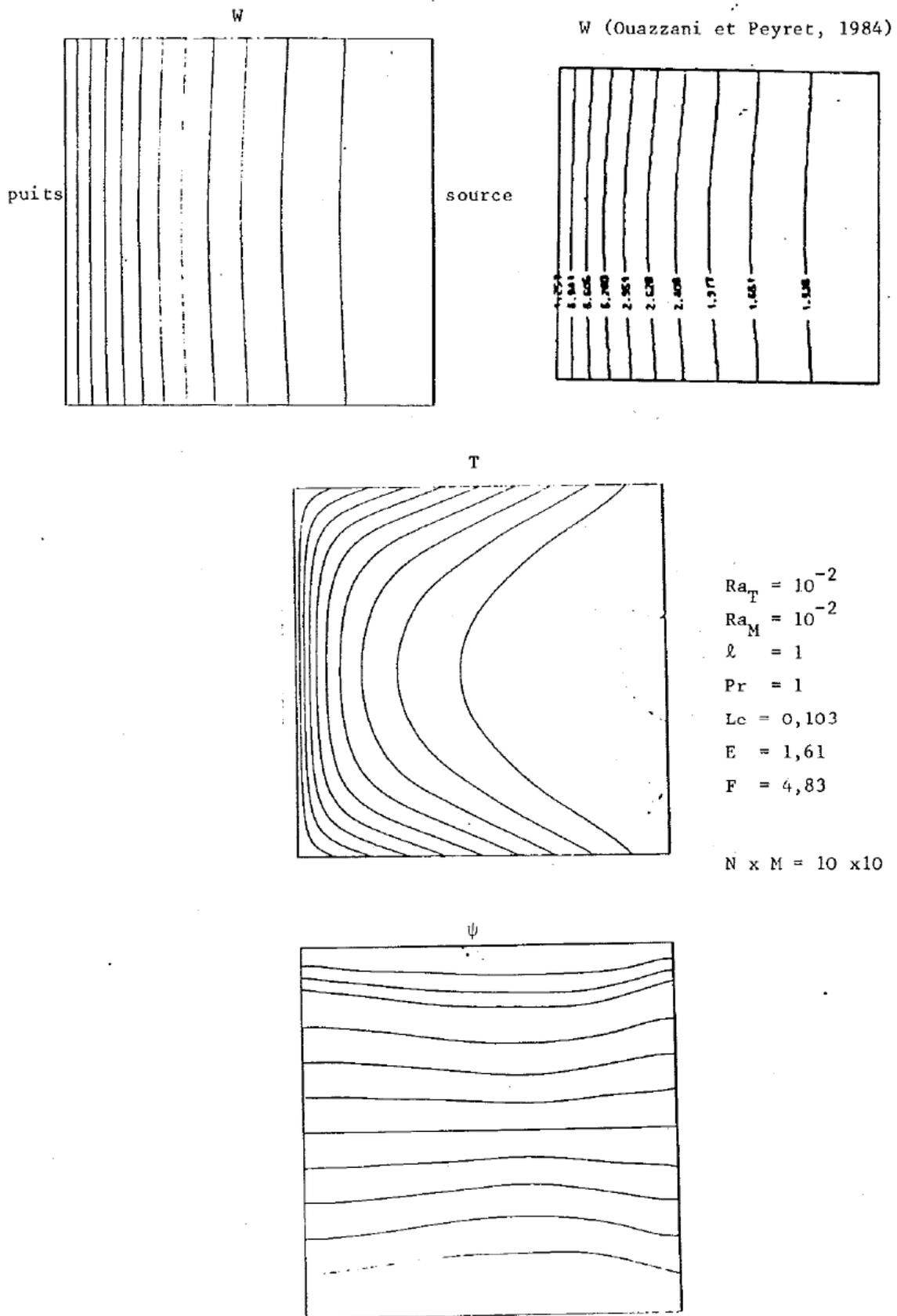


Fig. 6.1.12a. Diffusion pour une cavité carrée

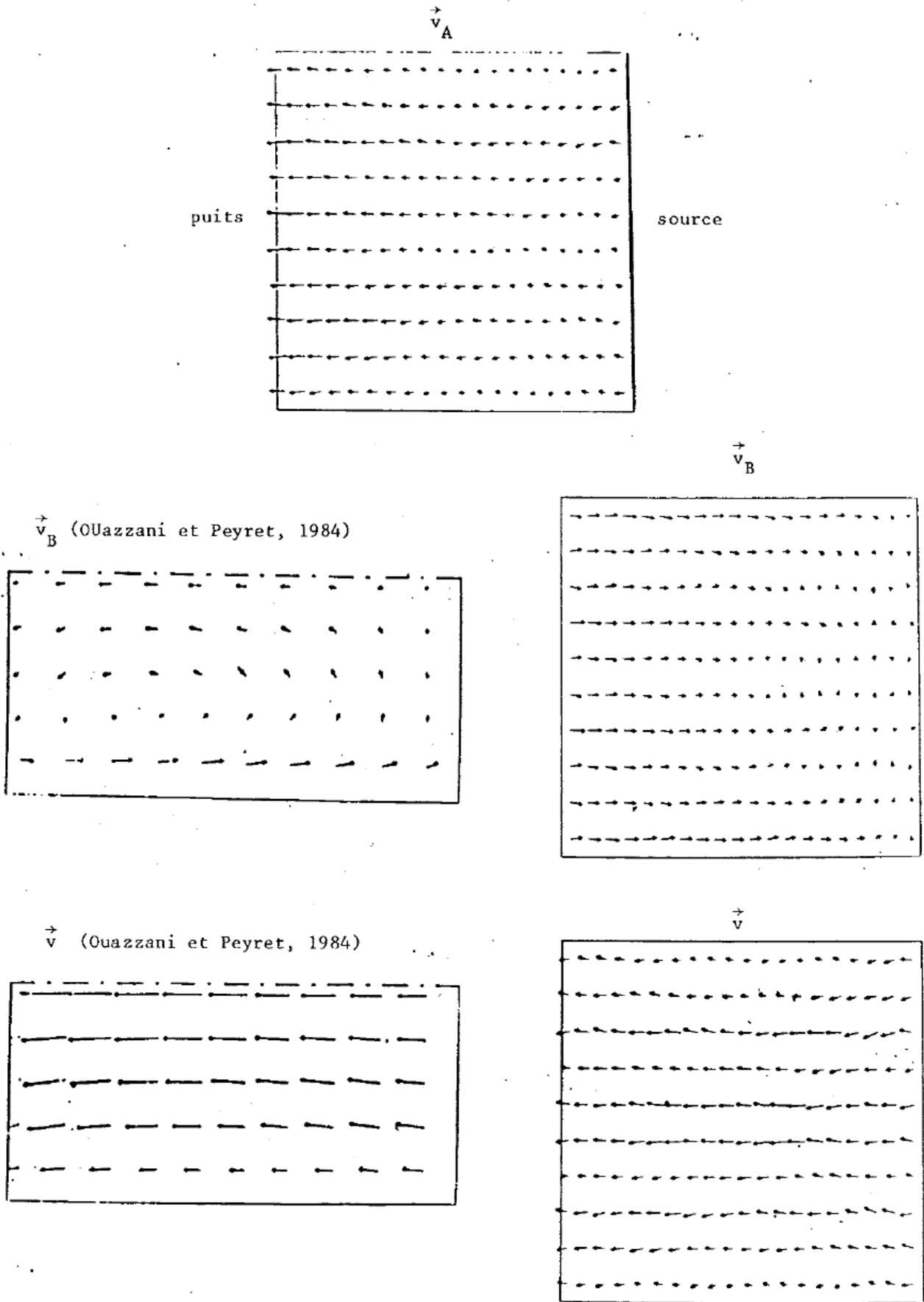


Fig. 6.1.12b. Diffusion pour une cavité carrée

$$\begin{aligned}
 Ra_T &= 10^{-2} \\
 Ra_M &= -10^{-2} \\
 Pr &= 1 \\
 Le &= 1 \\
 \ell &= 1 \\
 E &= 8,04 \\
 F &= 24,12
 \end{aligned}$$

$$N \times M = 10 \times 10$$

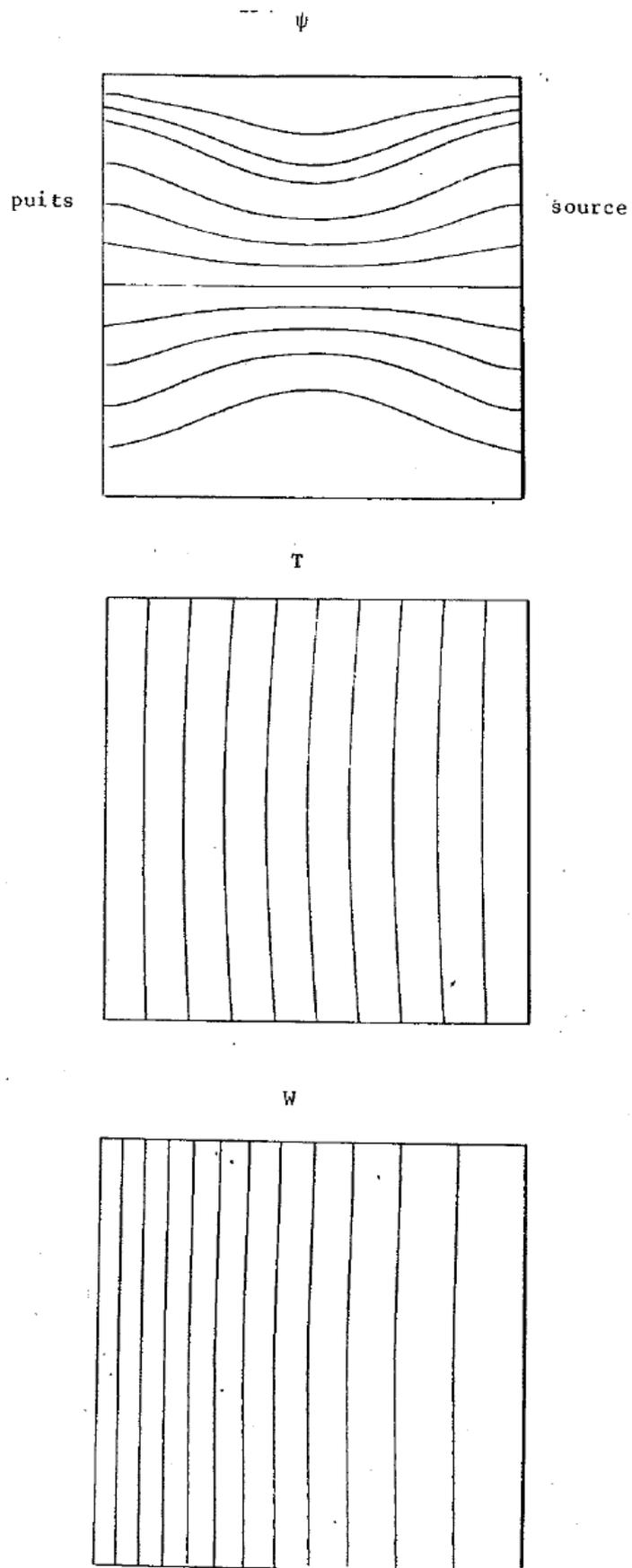


Fig. 6.1.13a. Diffusion pour une cavité carrée

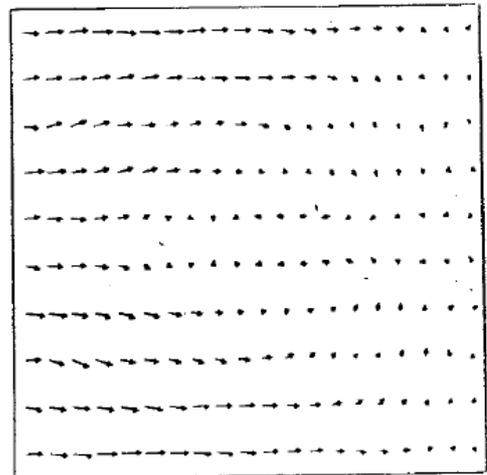
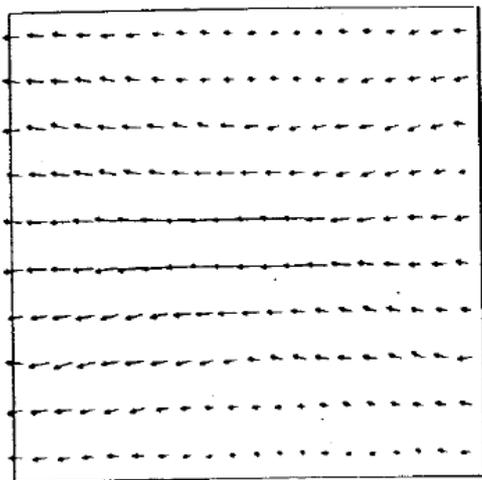
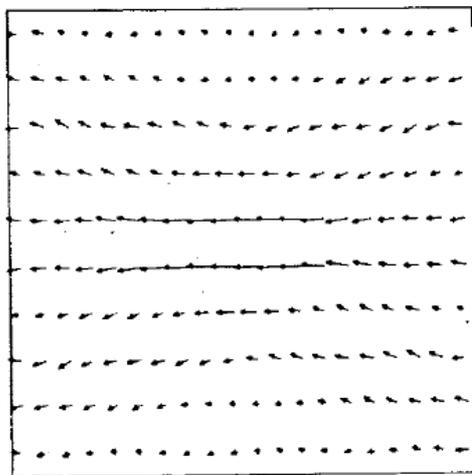
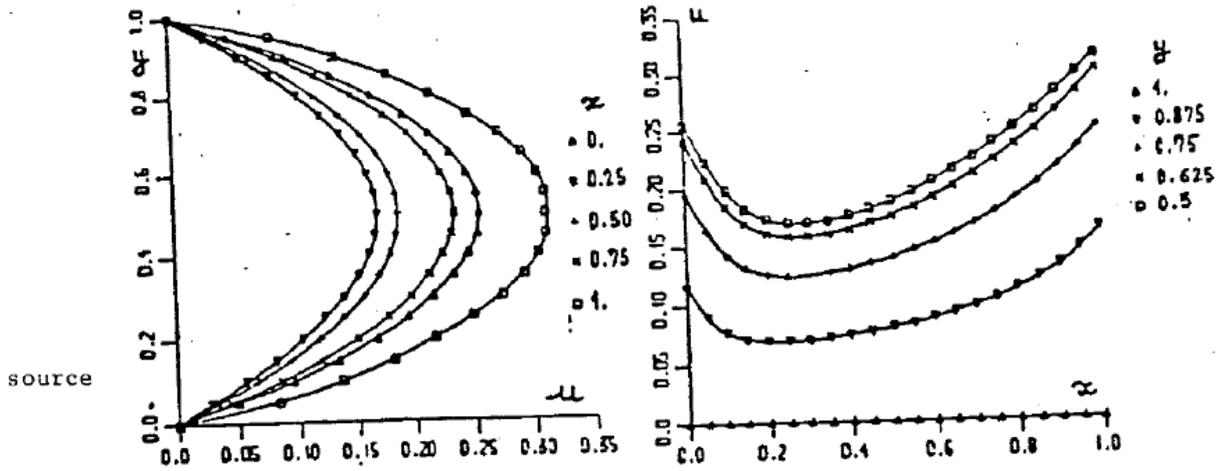


Fig. 6.1.13b. Diffusion dans une cavité carrée

6.2. Fluide ne vérifiant pas l'hypothèse de Boussinesq

On sait qu'un gaz binaire destiné à la croissance cristalline ne vérifie plus l'hypothèse de Boussinesq si : $Ra_T > |Ra_M|/Le$. Dans un tel gaz, on s'attend à ce que le composant le plus lourd A présente un

mouvement ascendant aux environs de la source. Par suite de la présence d'un flux interfacial à la source et au puits, cela laisse prévoir un rouleau convectif du fluide moyen, situé dans la moitié inférieure de la cavité. C'est ce que nous avons constaté pour les valeurs suivantes : $Ra_T = 10000$, $Ra_M = -6400$, $Le = 1$, $\ell = 0,25$, $E = 10$, $F = 5$ (Fig. 6.2.1).

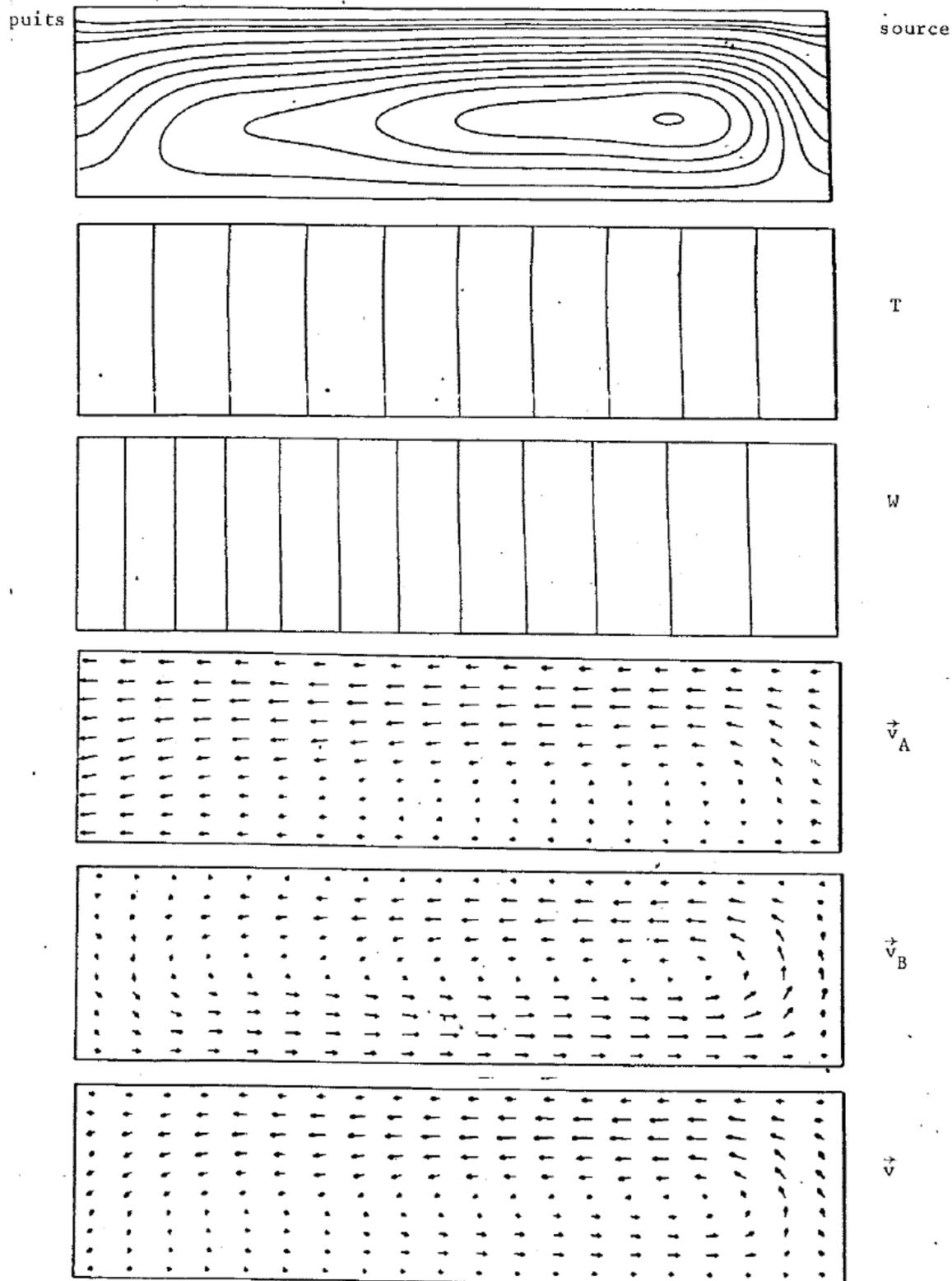


Fig. 6.2.1. Convection et diffusion solutale
 ($Ra_T = 104$, $Ra_M = -6400$, $Pr = Le = 1$, $\ell = 0,25$, $E = 10$, $F = 5$)

6.3. Diffusion et convection solutales pour un fluide de Boussinesq

6.3.1. Dans ce paragraphe, nous regardons le cas d'un fluide binaire presque isotherme ($Ra_T \sim 0$), composé de deux espèces chimiques A et B de masses molaires différentes ($Ra_M < 0$), et soumis à un flux interfacial allant de la source vers le puits. Selon les valeurs que peut prendre le paramètre E (pour F fixé), on s'attend à un changement dans l'importance relative du flux interfacial et du régime conductif de base.

6.3.2. Effets de E

Nous avons fixé les paramètres de l'écoulement : $Ra_T = 10^{-2}$, $Ra_M = -6400$, $Pr = 1$, $Le = 1$, $\ell = 0,25$ et fait varier E de 1,05 à 10 en choisissant $F = 3E$, ce qui suppose que la fraction massique moyenne \bar{W}_0 est gardée à 0,75. La valeur critique correspondante est $E_c \sim 3,49$.

Les résultats de la figure 6.3.1 montrent une diminution sensible de l'influence du flux interfacial au fur et à mesure que E augmente. À partir des valeurs de E proches de 3,49, les dimensions du rouleau convectif deviennent plus importantes que celles du domaine de la cavité concerné par un écoulement diffusionnel. Pour $E = 1,05$, le fluide moyen ne présente presque pas de zone de recirculation (régime « diffusionnel »).

Aux environs de 3,49 et au-delà, on peut considérer que le régime est « mixte ». Ces observations confirment les prévisions du tableau 6.1.5.1.

6.3.3. Les figures suivantes, 6.3.2-10, montrent les comportements du fluide moyen, des espèces A et B, ainsi que les isothermes et les iso-W, successivement pour différentes valeurs de E allant de 1,05 à 10.

Les calculs ont tous été effectués avec un nombre de composantes spectrales égal à 13x13.

La présence d'un flux interfacial, d'autant plus élevé que E est proche de 1, a pour effet de déformer les isothermes et de produire un fort gradient de la fraction massique, dans le sens longitudinal, près du puits.

La valeur critique $E_c = 3,49$ est atteinte par F dès que $E = E_c/3$. Pour des F supérieurs à 3,49, on peut alors s'attendre à ce que A présente une zone de faible recirculation, même si E reste inférieur à E_c . C'est ce qu'on constate pour $E \sim 1,50$ et $F = 4,50$.

Pour des valeurs de E supérieures à 3,49 et donc pour $F > 10$, on observe l'accroissement des dimensions des zones de recirculation de A et B. Pour ces valeurs, la cavité est divisée en deux parties bien distinctes : la partie supérieure comprend un rouleau convectif et la partie inférieure comprend un écoulement quasi 1D diffusionnel. C'est le régime « mixte ». les isothermes y sont très peu déformées et les iso-W sont presque équidistantes.

On observera également qu'avec l'augmentation de E, le nombre de lignes de courant qui joignent la source et le puits diminue.

Le cas $E = 5$, $F = 15$ (fig. 6.3.8a et b) correspond à une étude faite par Jhaveri et al (1981). Ces auteurs ont calculé l'écoulement du fluide moyen avec les mêmes hypothèses physiques (fluide de Boussinesq, flux interfacial établi à l'aide de la loi de Fick). Leurs calculs reposent sur une méthode aux différences finies et aboutissent à un résultat comparable au nôtre, avec 30x30 points de maillage.

$Ra_T = 0$
 $Ra_M = -6400$
 $Le = Pr = 1$
 $l = 0,25$

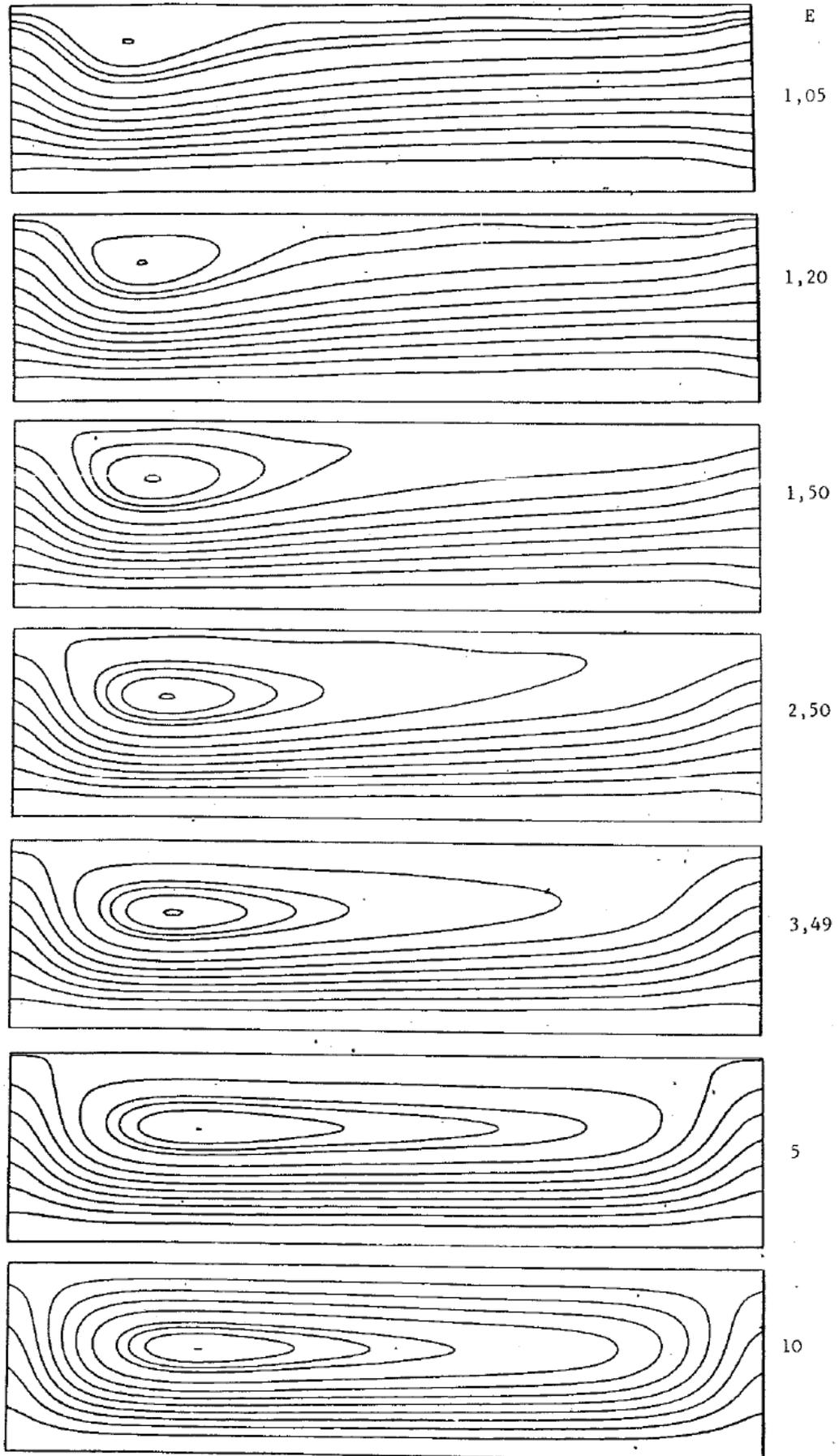


Fig. 6.3.1. Convection et diffusion solutales

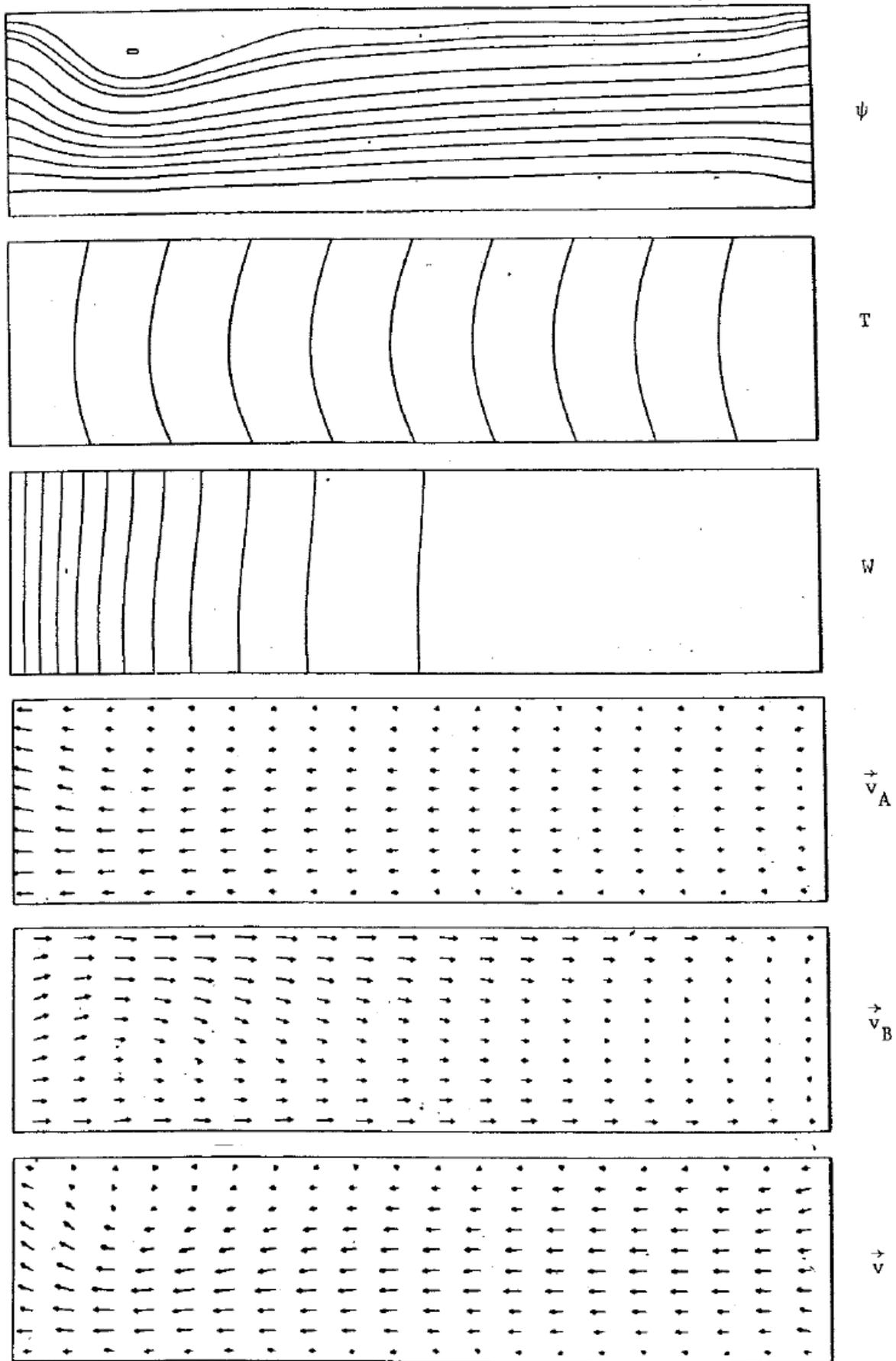
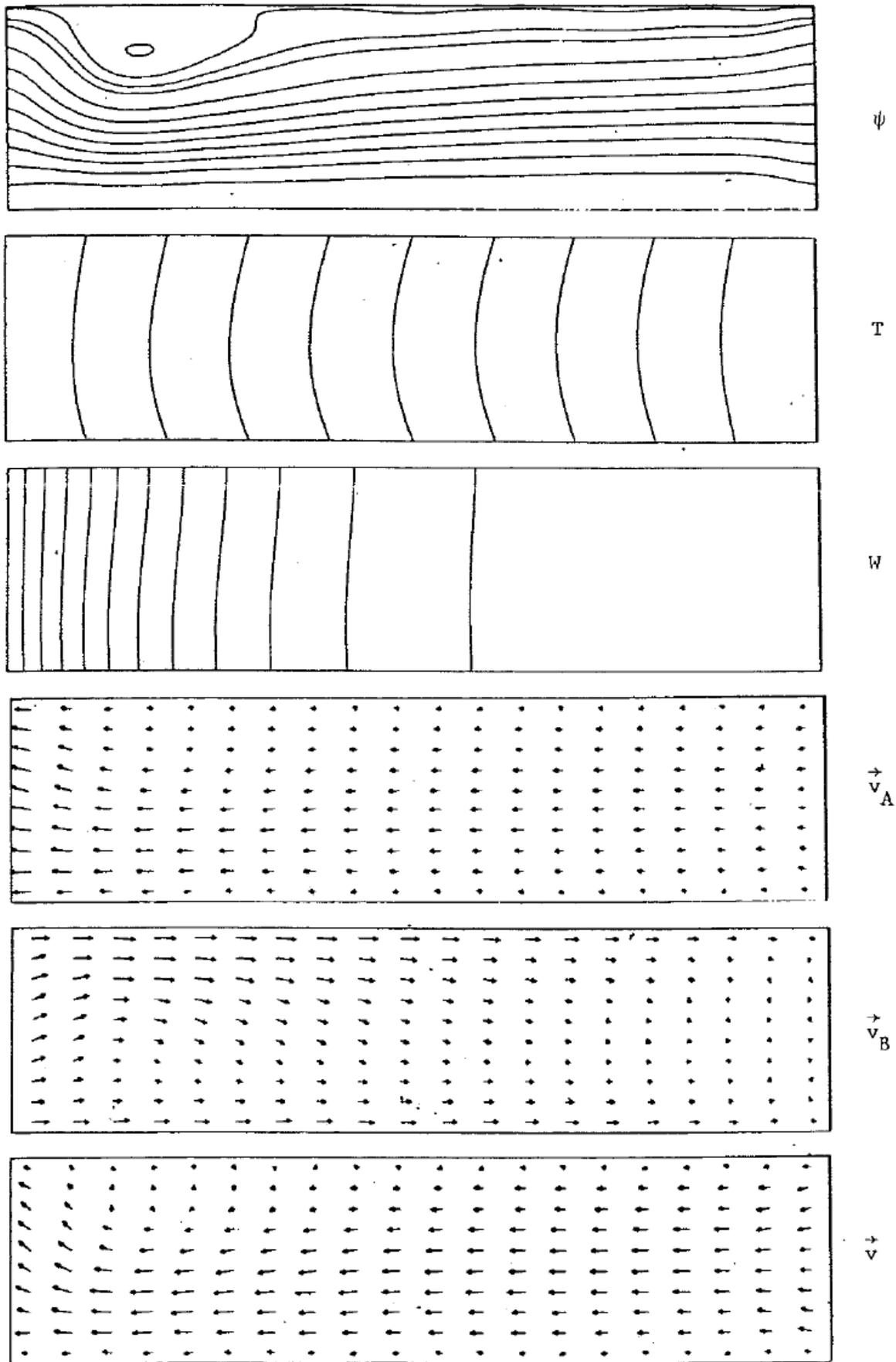
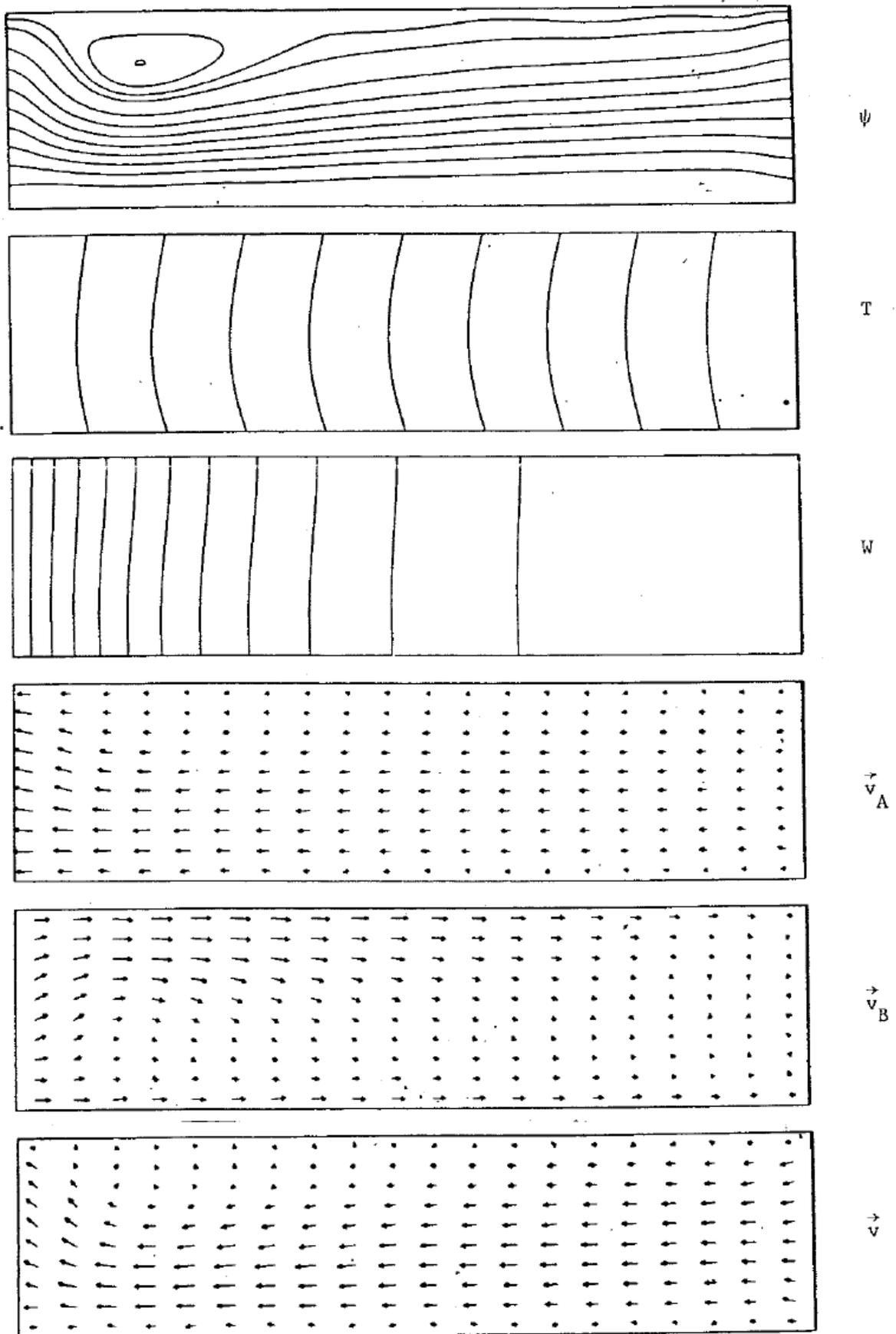


Fig. 6.3.2. Diffusion et convection solutales



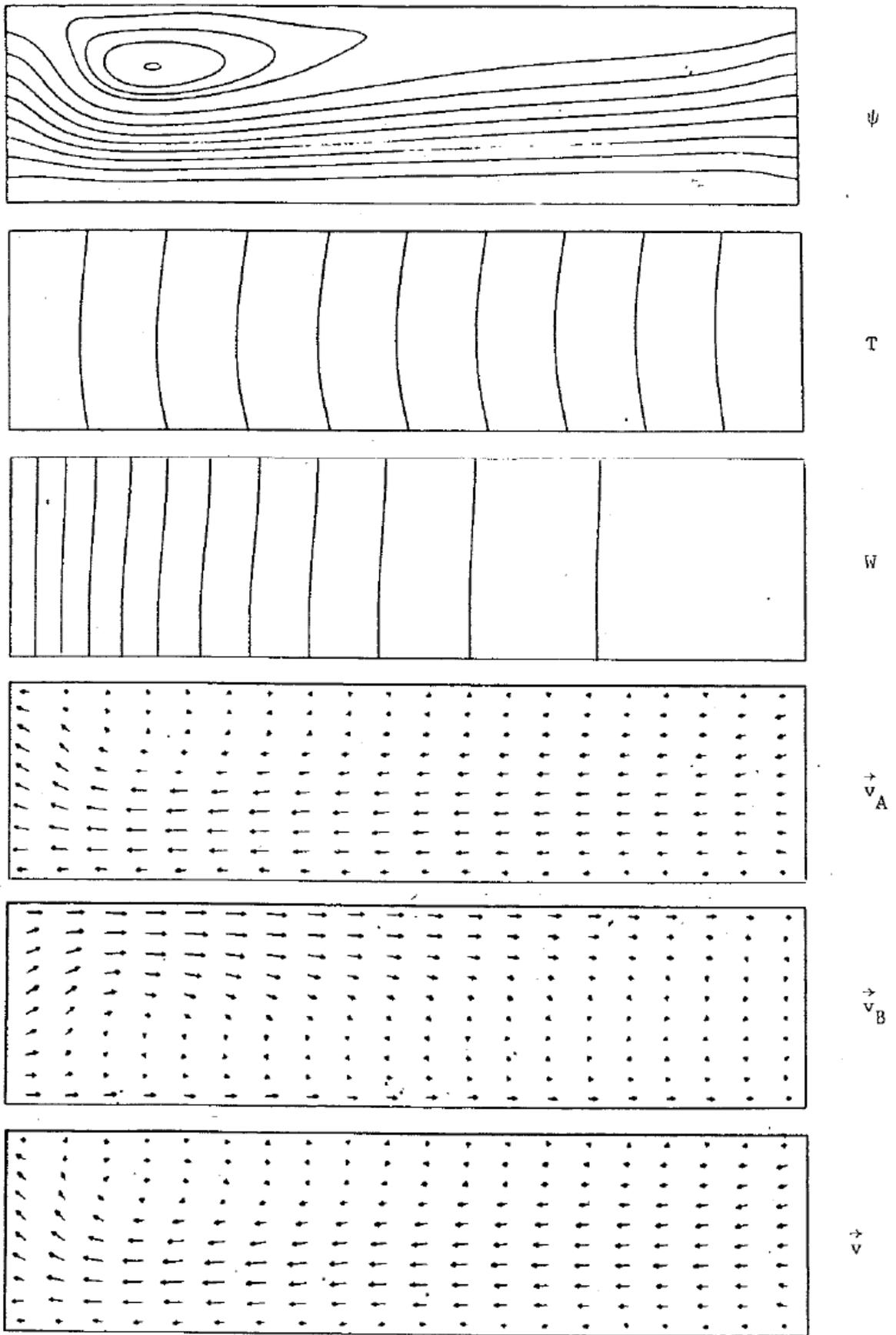
$$E = 1, 10$$

Fig. 6.3.3. Diffusion et convection solutales



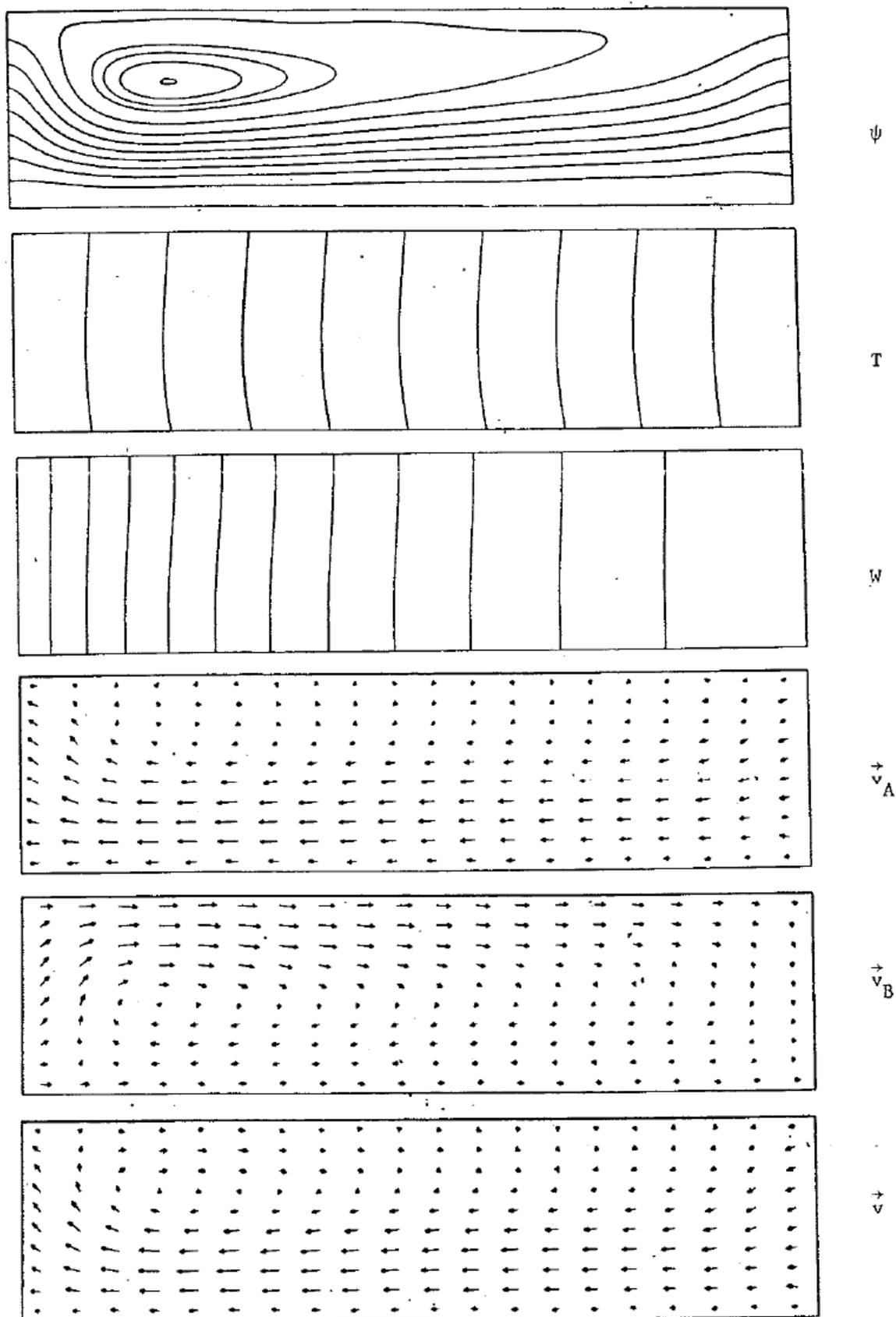
$E = 1,20$

Fig. 6.3.4. Diffusion et convection solutales



$E = 1,50$

Fig. 6.3.5. Diffusion et convection solutales



$E = 2,50$

Fig. 6.3.6. Diffusion et convection solutales

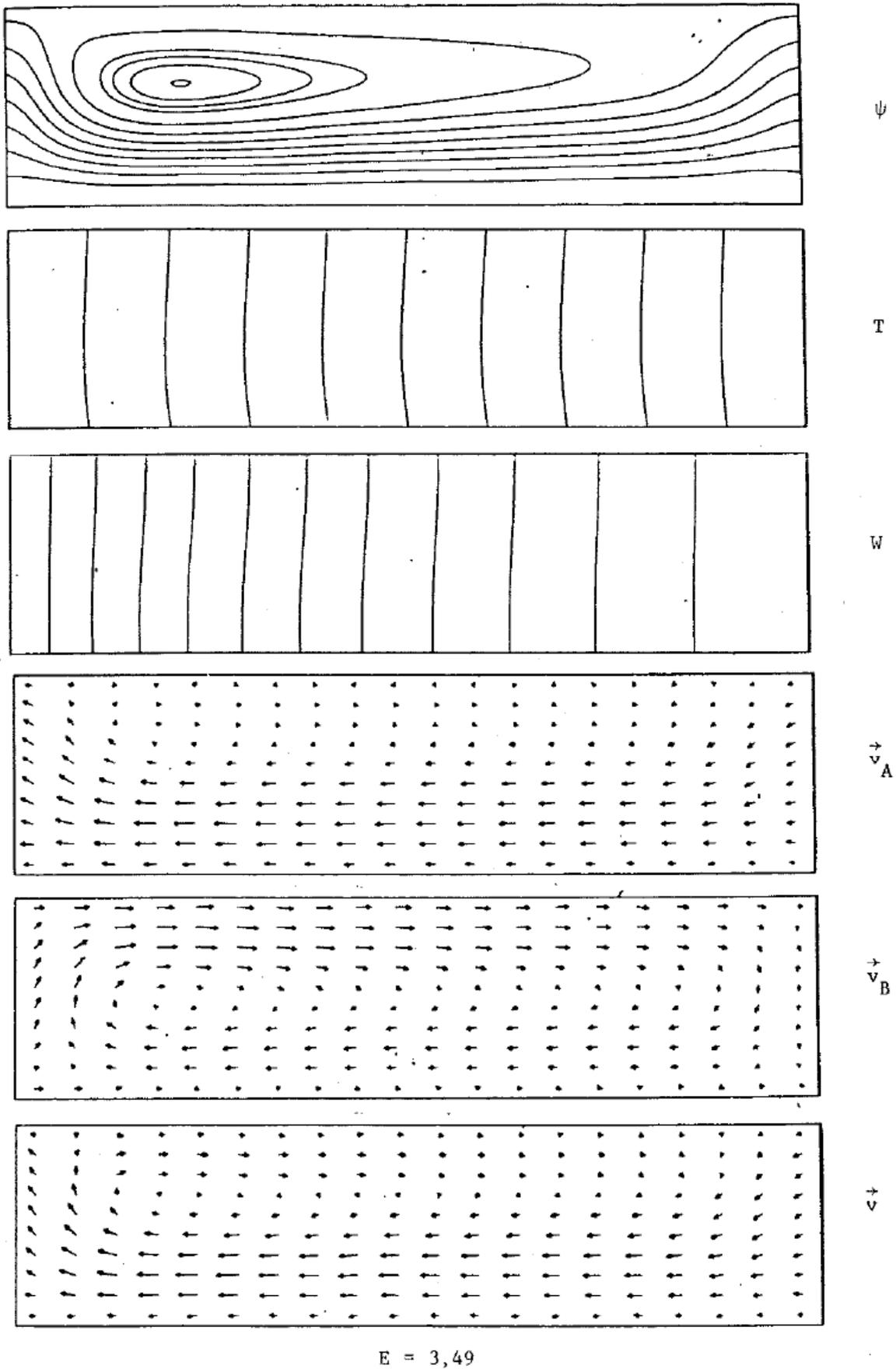


Fig. 6.3.7. Diffusion et convection solutales

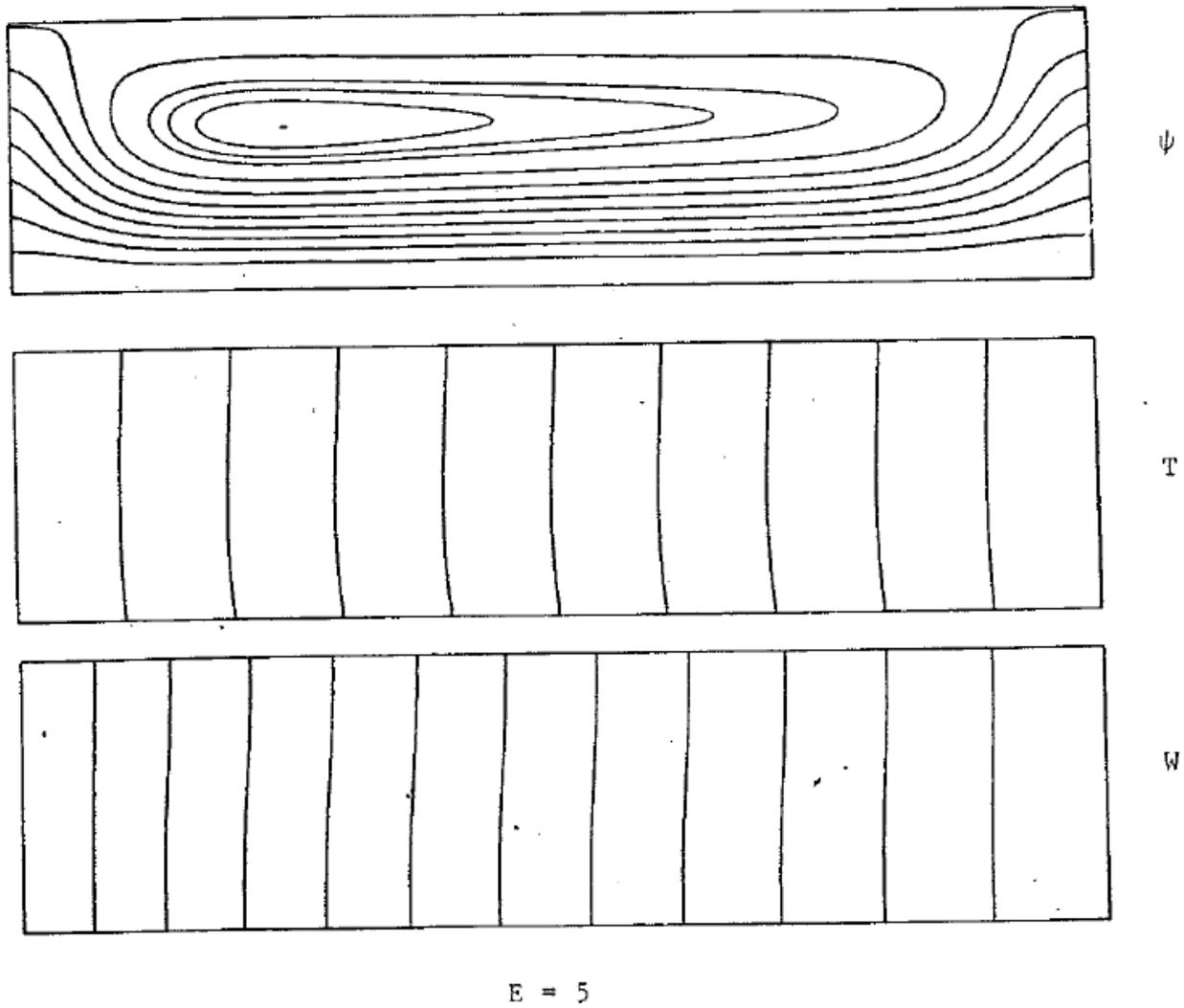
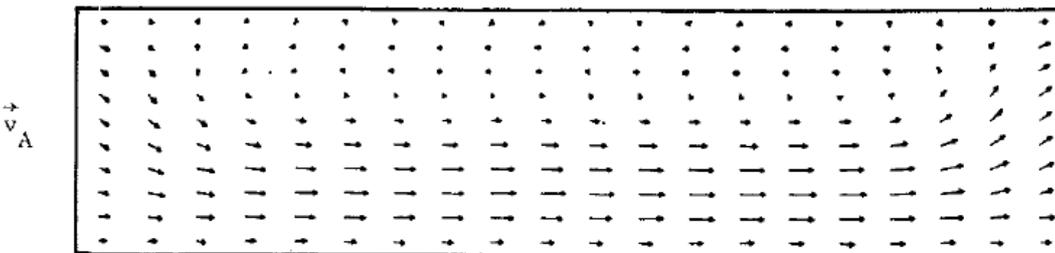
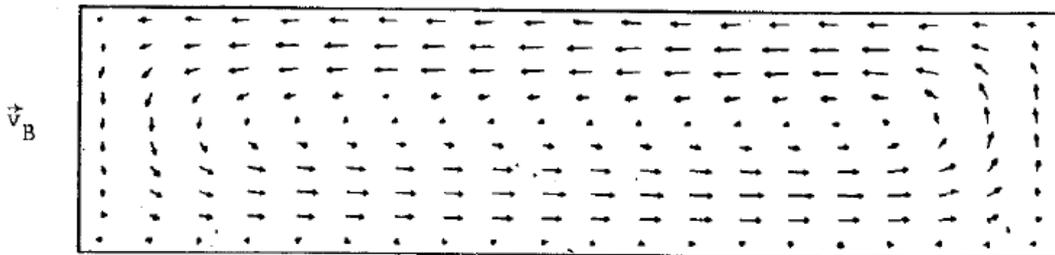
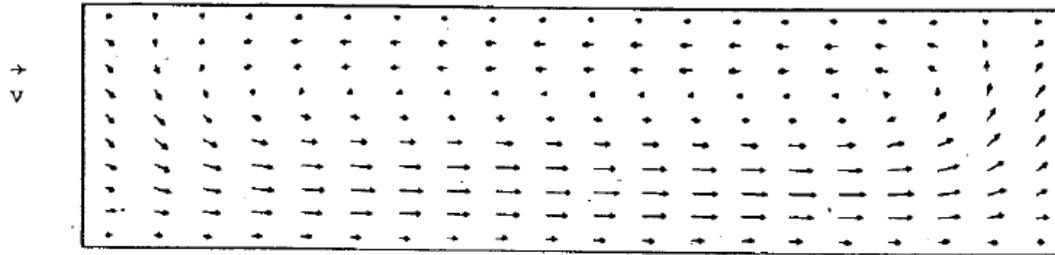
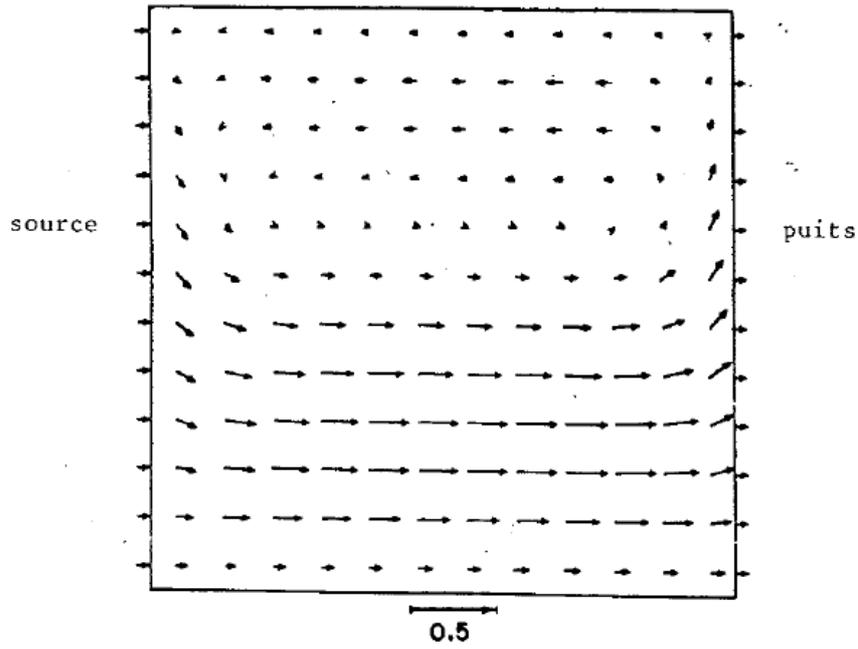


Fig. 6.3.8a. Diffusion et convection solutales

v (Jhaveri et al, 1981)



E = 5

Fig. 6.3.8b. Diffusion et convection solutales

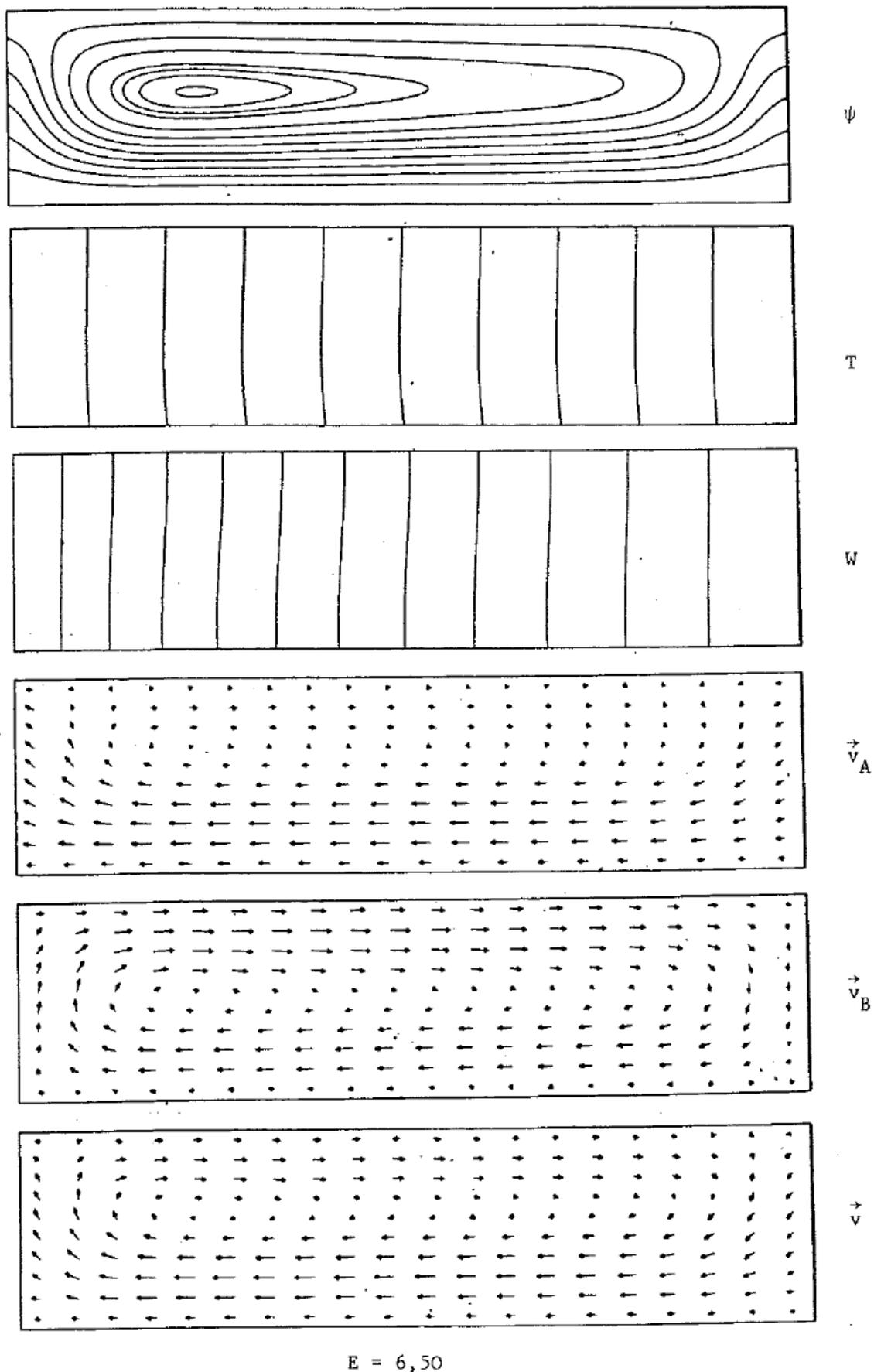
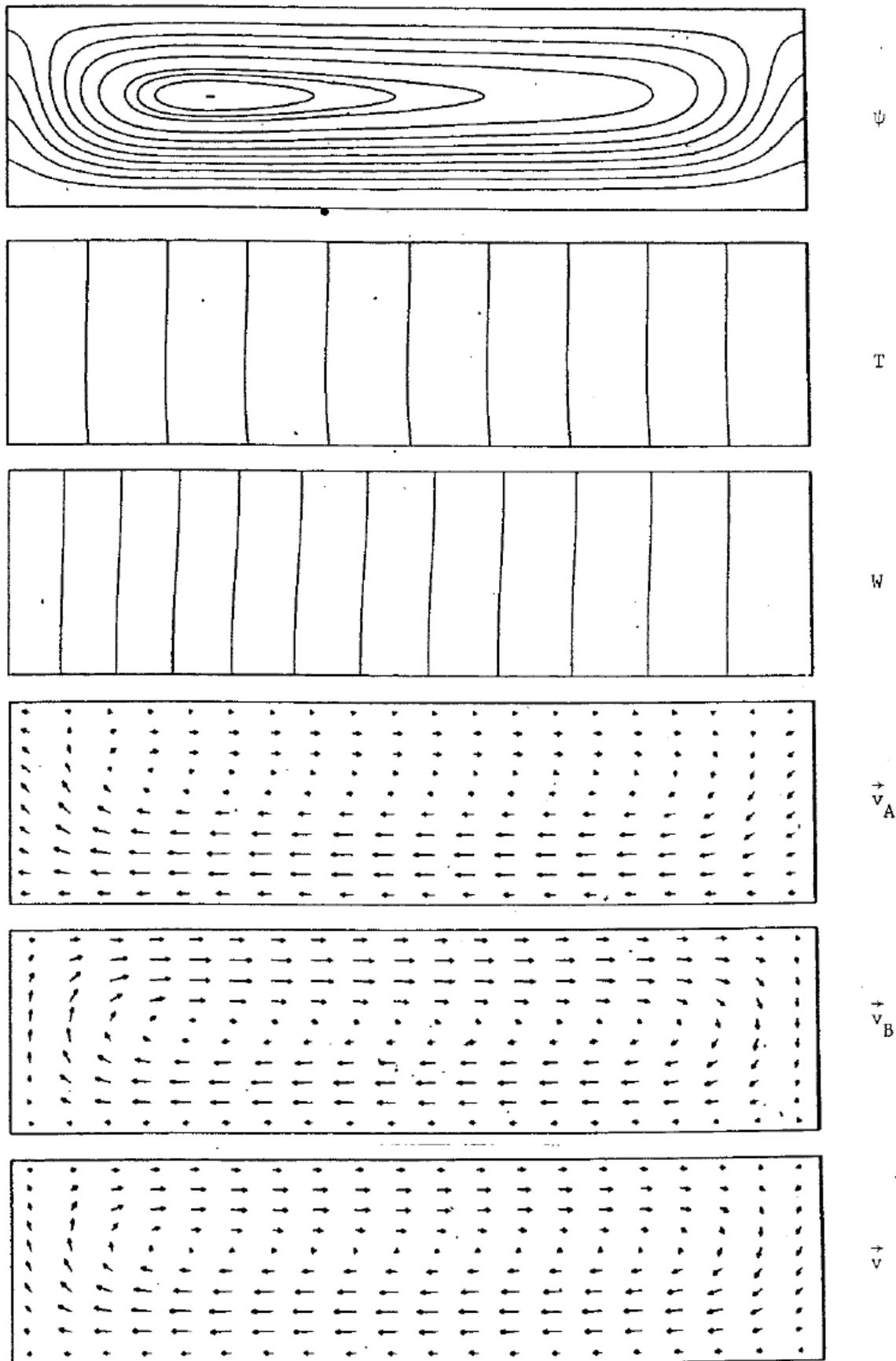


Fig. 6.3.9. Diffusion et convection solutales



$E = 10$

Fig. 6.3.10. Diffusion et convection solutales

Avec les profils des vitesses horizontales au milieu de la cavité (fig. 6.3.11), nous observons une diminution de la valeur maximale v_M de la vitesse horizontale au milieu de la cavité, avec l'accroissement de E (fig. 6.3.12).

Nous pouvons comparer cette variation avec celle de la vitesse caractéristique :

$$v_c = 1/Le \times 1/(E - 1)$$

correspondant à une évaluation de la vitesse à la source et qui coïncide avec la vitesse caractéristique donnée dans le modèle 1D lorsque Pe_M^* est petit (cf. § 3.7.4), c'est-à-dire lorsque E est grand.

L'écart constaté entre les valeurs calculées et celles de la vitesse caractéristique v_c peut être expliqué par le fait que le gradient solutal à la source $\partial W/\partial y(x,+1)$ est différent de 1, alors que l'écriture de v_c suppose qu'il ne l'est pas.

En fait, le gradient solutal à la source est inférieur à 1. On sait que si E s'approche de 1, $\partial W/\partial y$ tend vers zéro à la source et est très grand au puits (cf. § 6.1).

Lorsque le flux interfacial reste prédominant sur le flux convectif dans toute la cavité, c'est-à-dire pour des E inférieurs à E_c ($\sim 3,49$ dans le cas présent), la vitesse maximale calculée v_M au milieu de la cavité est différente de la vitesse calculée à la source v_W mais lui reste comparable en ordre de grandeur.

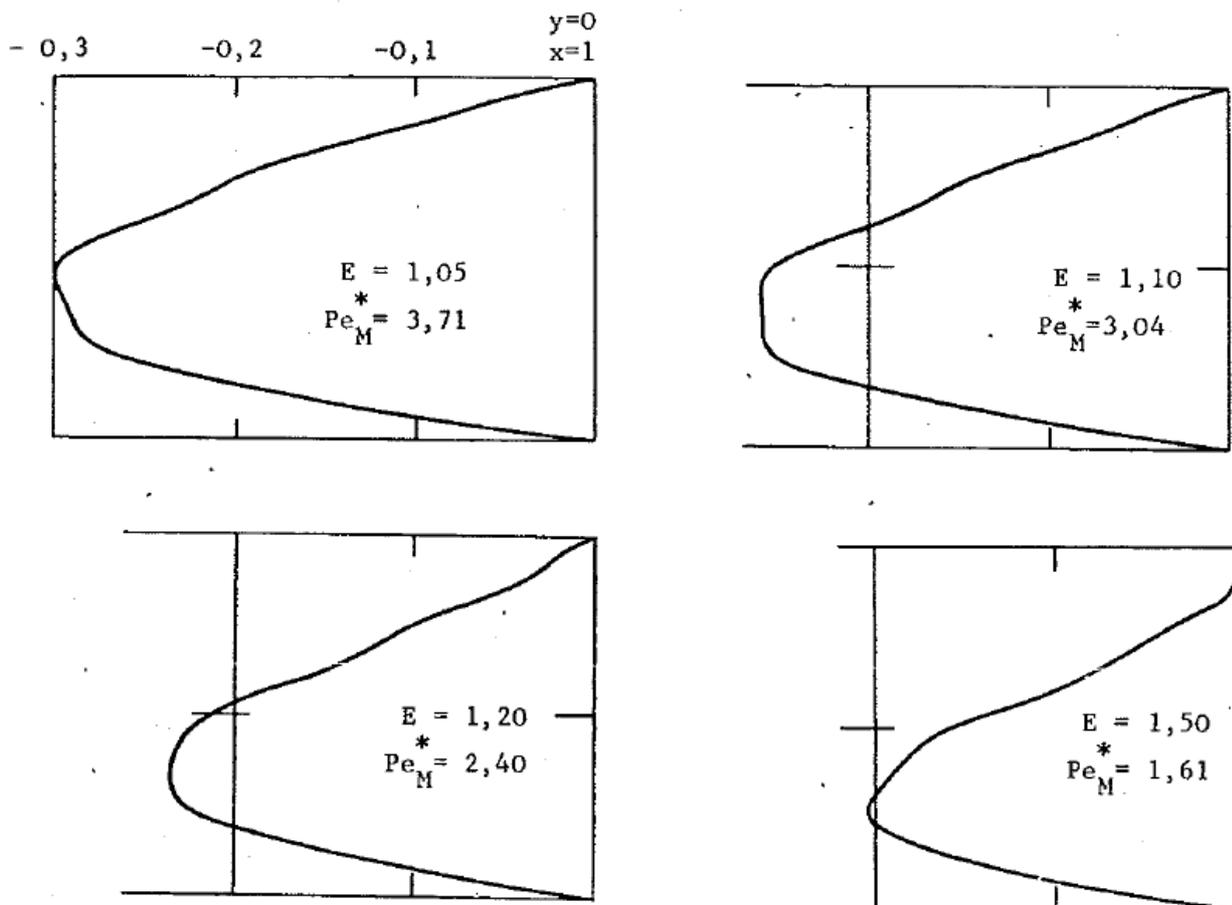


Fig. 6.3.11. Vitesse horizontale au milieu de la cavité
Effet de E

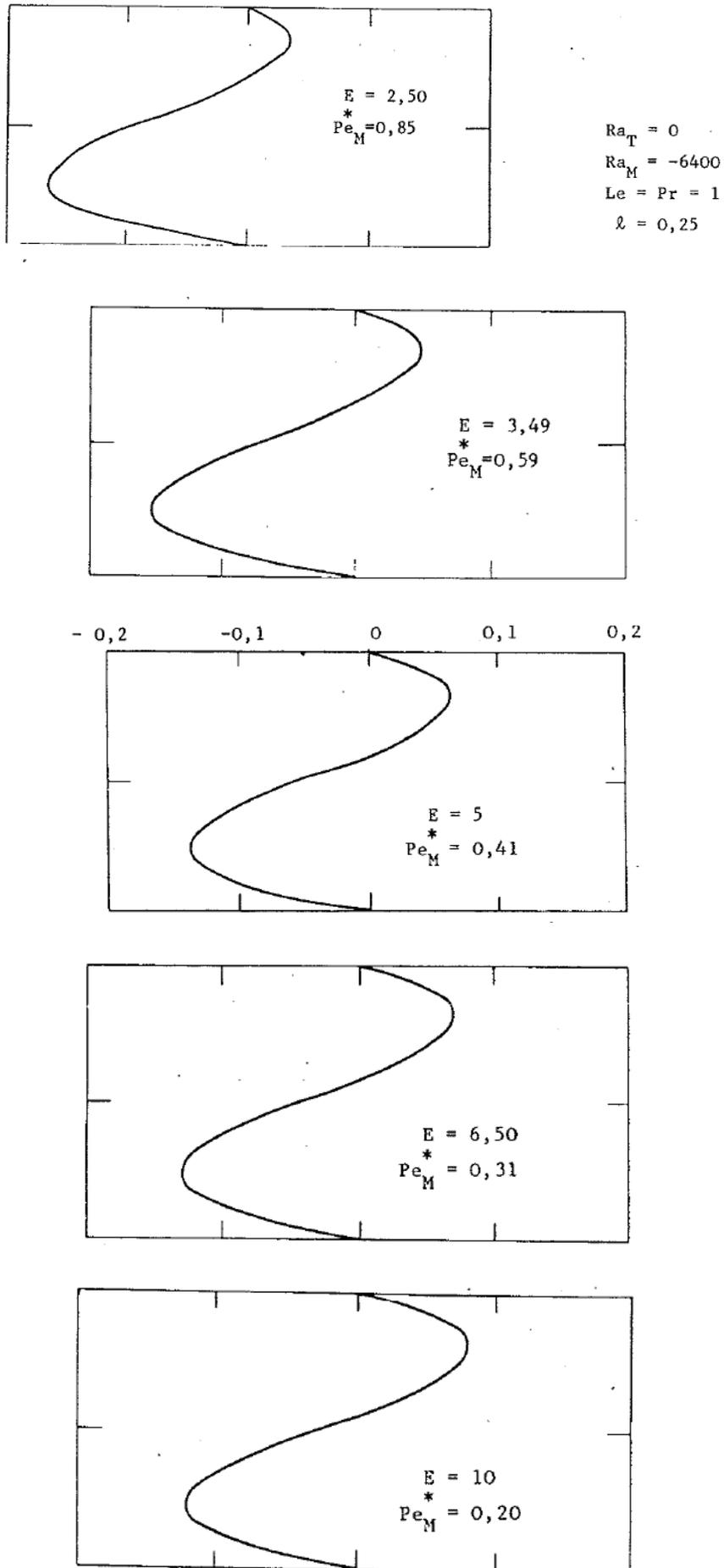


Fig. 6.3.11 (suite)

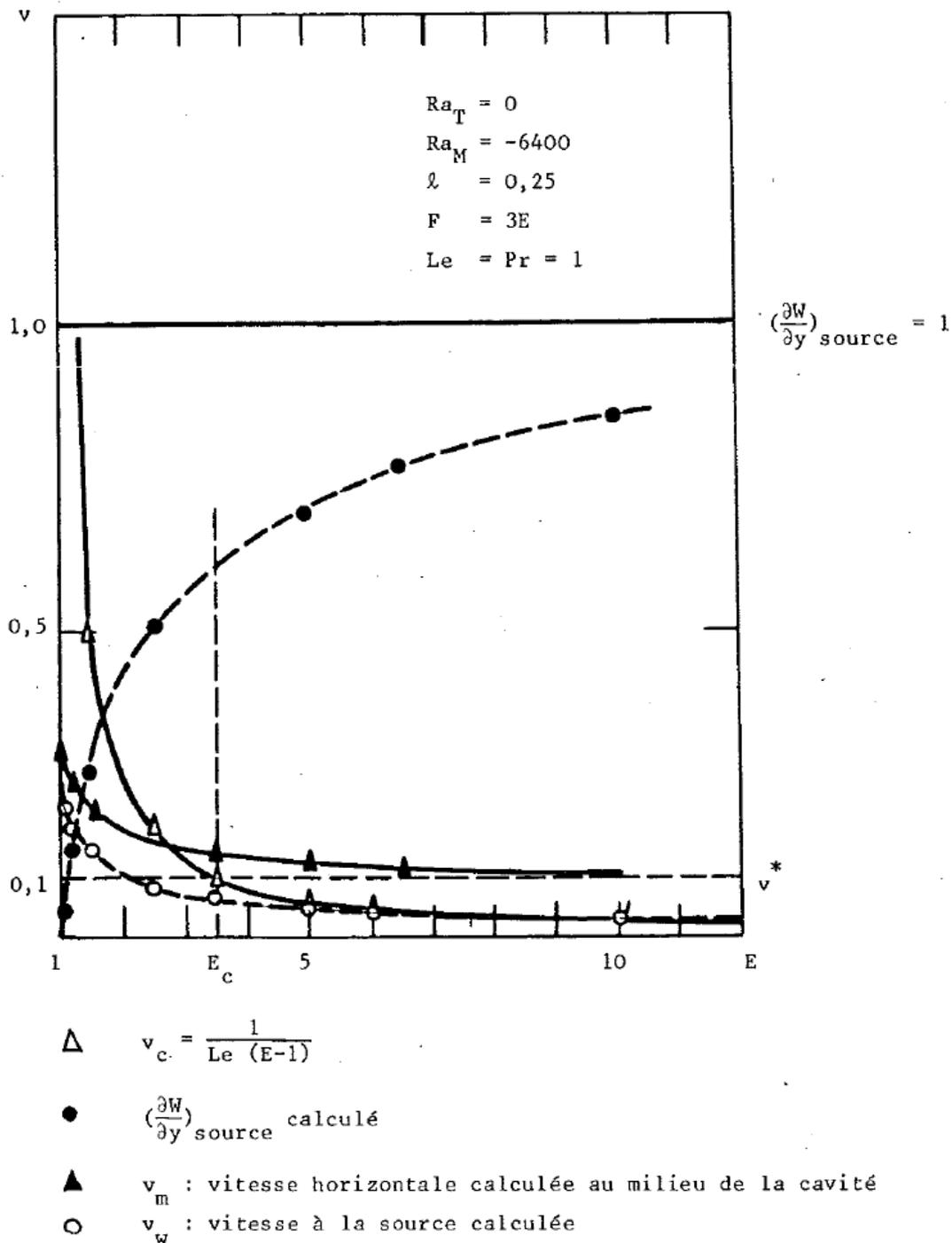


Fig. 6.3.12. Évolution des vitesses pariétale et centrale en fonction du taux de sublimation

Or la courbe $v_M(E)$ montre un écart bien trop grand pour être expliqué seulement par les effets convectifs. C'est donc que $\partial W/\partial y$ est inférieur à 1 et a pour effet de diminuer l'amplitude de la vitesse calculée à la source v_w . Au-delà de $E_c = 3,49$, la vitesse maximale calculée v_M diffère de v_c , non plus à cause de $\partial W/\partial y (x,+1)$ (qui s'approche de l'unité), mais à cause du fait que le flux convectif de base domine le flux interfacial.

Même si le flux interfacial devient négligeable ($E \gg 1$), la vitesse maximale v_M restera finie et tendra vers la vitesse caractéristique de l'écoulement convectif de base :

$$v^* = |Ra_{eq}| \ell^3 / (144 \sqrt{3})$$

Ceci explique pourquoi les valeurs calculées v_M tendent vers une limite finie lorsque E augmente, bien que v_c tende vers zéro. Cette valeur limite représente v^* . Avec les données que nous avons fixées, elle vaut 0,1.

La figure 6.3.12 montre avec une excellente précision que les valeurs calculées v_M tendent à s'aligner sur l'asymptote horizontale v^* lorsque E augmente.

On remarquera également que la vitesse pariétale calculée v_W est approximativement translatée de la vitesse calculée v_M , d'une valeur égale à v^* .

Ces remarques peuvent suggérer une méthode d'évaluation du gradient solutal à la source lorsque l'on connaît la valeur de la vitesse maximale v_M^* au milieu de la cavité, mesurée expérimentalement. Pour cela, on utilise les hypothèses suivantes :

(i) La fraction massique moyenne \bar{W}_0 , Ra_T , Le , Pr sont connues.

(ii) A chaque valeur expérimentale v_M^* correspond le même E que la valeur calculée v_M égale à v_M^* .

Si $\bar{M}_A = \bar{M}_B$ alors $Ra_M = 0$ et par suite v^* est connue d'après (i).

On évalue alors v_W , pour chaque v_M , en calculant $v_W \sim v_M - v_M^*$. Comme E est supposé directement connu à partir de v_M^* (principe (ii)), on peut tracer la courbe $v_c = 1/Le \times 1/(E-1)$. Le rapport v_W/v_c donne alors une évaluation de $\partial W/\partial y(x,+1)$.

Si $\bar{M}_A > \bar{M}_B$ alors $Ra_M < 0$ est inconnu puisqu'il dépend de E et de F , et donc v^* est inconnue puisqu'elle dépend de Ra_T et Ra_M .

On peut cependant estimer Ra_M et $\partial W/\partial y(x,+1)$ de la façon suivante : Si l'on peut contrôler le flux interfacial en jouant sur les températures des parois actives (Zappoli, 1984), alors on obtiendra plusieurs valeurs de v_M^x qui, en principe, devraient se répartir autour d'une valeur asymptotique lorsque le débit interfacial diminue. En évaluant graphiquement cette valeur asymptotique, on obtient expérimentalement v^* d'où l'on peut déduire Ra_M . Connaissant \bar{W}_0 on calcule E et F . la valeur de v^* ainsi acquise permet d'évaluer la courbe $v_W \sim v_M^x - v^*$ qui donnera une valeur estimée du gradient solutal à la source pour différents v_M^x .

6.4. Diffusion solutale et convection thermique pour un fluide de Boussinesq (« expansive convection »)

6.4.1. Nous considérons le gaz binaire soumis à un flux interfacial aux parois actives, ainsi qu'à un gradient thermique. Nous supposons que les composants A et B ont la même masse molaire, ce qui revient à poser $Ra_M = 0$. On dira alors que le fluide est soumis à la diffusion solutale et à la convection thermique.

Dans ce paragraphe nous allons étudier, d'une part, l'influence de la valeur de E , c'est-à-dire du flux interfacial, sur l'écoulement, et d'autre part, l'effet de l'accroissement de Ra_T lorsque l'on fixe le flux interfacial (E fixé). Dans tout ce paragraphe, nous fixerons les paramètres aux valeurs suivantes :

$Ra_M = 10^{-2}$, $Le = Pr = 1$, $\ell = 0,25$.

Tous les calculs ont été effectués avec 13x13 polynômes de Chebyshev.

Les paramètres que l'on fait varier sont Ra_T , E et $F = 3E$ ($\bar{W}_0 = 0,75$).

6.4.2. Effet du flux interfacial (fig. 6.4.1)

Pour un même Ra_T , le régime auquel est soumis le gaz binaire n'est pas le même selon que E soit inférieur ou supérieur à E_c . Les critères de transition de régime développés en (6.1) restent admis ici en ayant $Ra_{eq} = Ra_T$.

Puisque Ra_M est supposé nul, la condition qui permet de traduire que le fluide obéit à l'hypothèse de Boussinesq n'est plus nécessaire. Par suite, il n'y a pas de « droite de Boussinesq » dans le diagramme (\bar{W}_2, \bar{W}_1) . Le fait d'avoir $Ra_M \approx 0$ laisse prévoir que le fluide n'aura plus tendance à « tomber » à la paroi chaude sous l'entraînement de l'espèce la plus lourde A. Il sera soumis à la convection thermique dès que l'on s'éloigne de la source, et aura donc tendance à « monter ». Ceci

explique que le rouleau de convection, lorsqu'il existe, est situé dans la partie inférieure de la cavité.

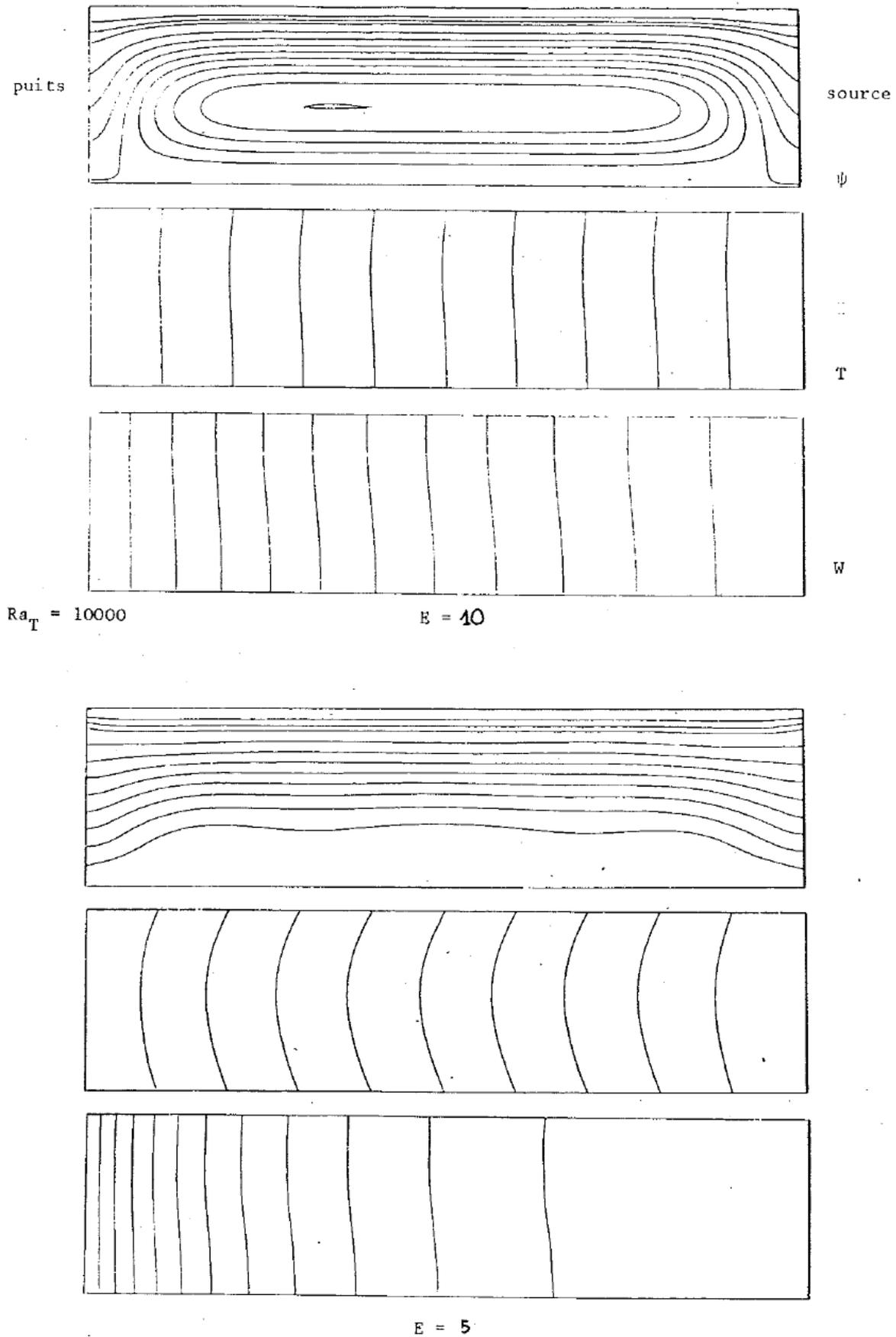


Fig. 6.4.1. Effet de E en « expansive convection »

Pour un flux interfacial tel que $E = 10$, le fluide est soumis à un régime mixte où l'influence du flux interfacial est prédominante dans la moitié supérieure de la cavité, et où un rouleau convectif s'établit à la moitié inférieure de la cavité. Les isothermes et les iso- W sont peu déformées.

6.4.3. Effets de Ra_T (fig. 6.4.2)

Nous avons fait varier Ra_T de 10000 à 10^6 , en gardant E constant et égal à 5.

L'augmentation de Ra_T (et par suite celle de Ra_{eq}) a pour effet d'accroître l'importance relative du mouvement convectif.

Simultanément, le nombre de lignes de courant joignant les parois actives diminue.

Ceci traduit une influence de plus en plus négligeable du flux interfacial sur le mouvement dans la cavité.

Le rouleau convectif, situé vers le bas pour des Ra_T assez petits ($\sim 10^4$), se déplace au centre de la cavité lorsque Ra_T s'agrandit.

On peut alors résumer ces faits en disant que le fluide est soumis à un régime « mixte » pour de faibles Ra_T , et à un régime quasi-convectif pour des Ra_T élevés ($> 10^5$).

Dans les écoulements quasi-convectifs les isothermes sont déformées comme dans les écoulements convectifs (les parois terminales étant conductrices), ce qui montre que ce sont les gradients thermiques qui conduisent l'écoulement et non l'inverse, lequel arrive dans les régimes diffusionnels.

D'après l'analyse proposée en (6.1), l'augmentation de Ra_T (et donc de Ra_{eq}) tend à diminuer la valeur de transition E_c . Pour $Ra_T > 10000$, on sait que $E_c \sim 2,60$. Puisque E est fixé à 5, nous nous trouverons toujours dans les cas où le flux interfacial n'est pas prédominant.

Le choix $F = 3E$ conduit à $F > E_c$ dans tous les cas. On doit donc s'attendre à une recirculation des composants A et B. C'est ce que l'on constate dans les figures suivantes fig. 6.4.3-8.

La déformation des lignes isothermes et iso- W , ainsi que leur intensification près des parois actives, observées à partir de Ra_T de l'ordre de 10^6 (fig. 6.4.7-8), laissent supposer que le mécanisme moteur est la couche limite aux parois actives et donc que le fluide est dans une configuration BLDR (cf. § 3.5 et chapitre 5) prédominante sur les effets du flux interfacial.

Les ondulations des lignes isothermes et iso- W observées pour les grandes valeurs de Ra_T sont dues au fait que 13×13 polynômes de Chebyshev sont insuffisants.

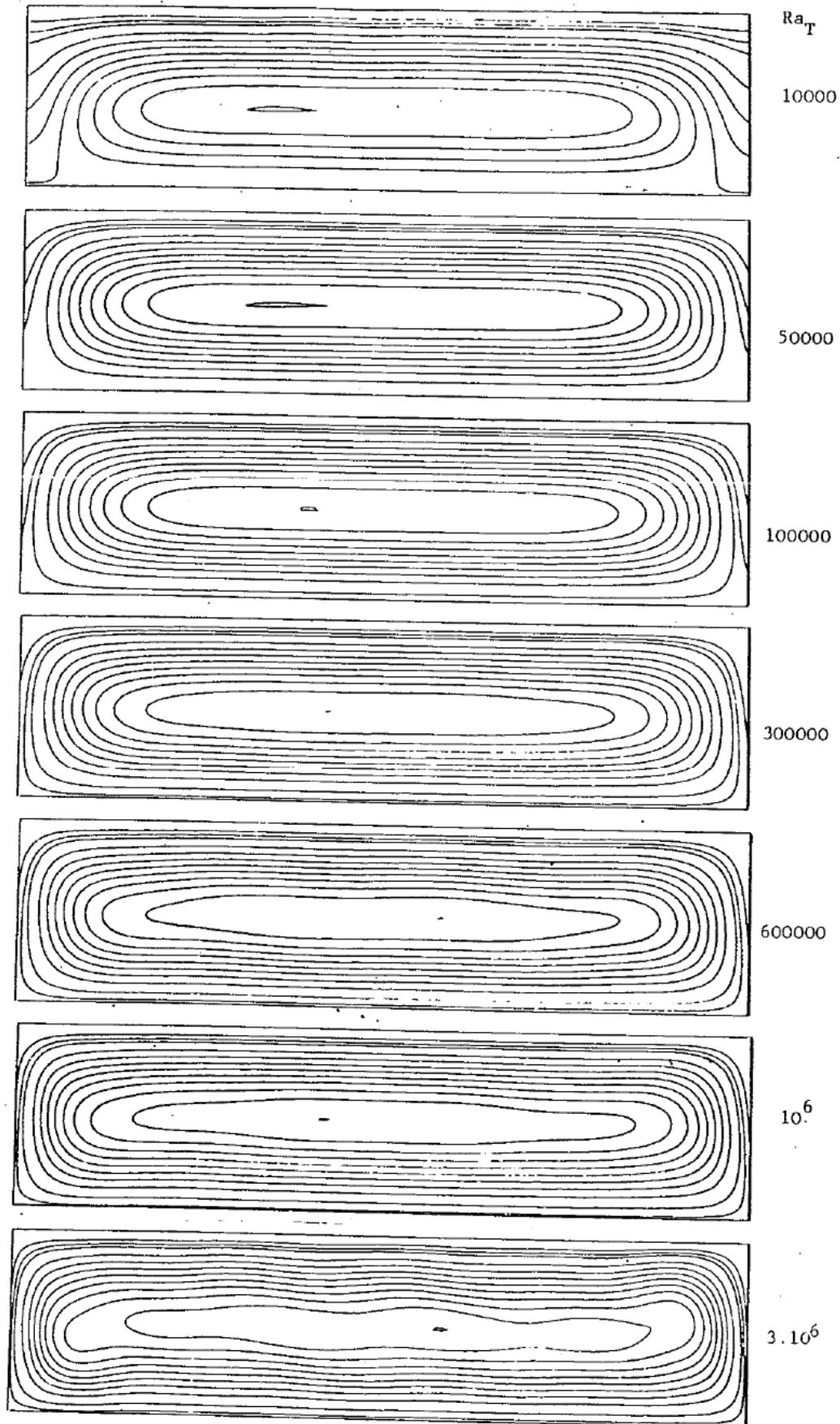


Fig. 6.4.2. Effet de Ra_T en « expansive convection »

$$Ra_T = 50000 \quad E = 5$$

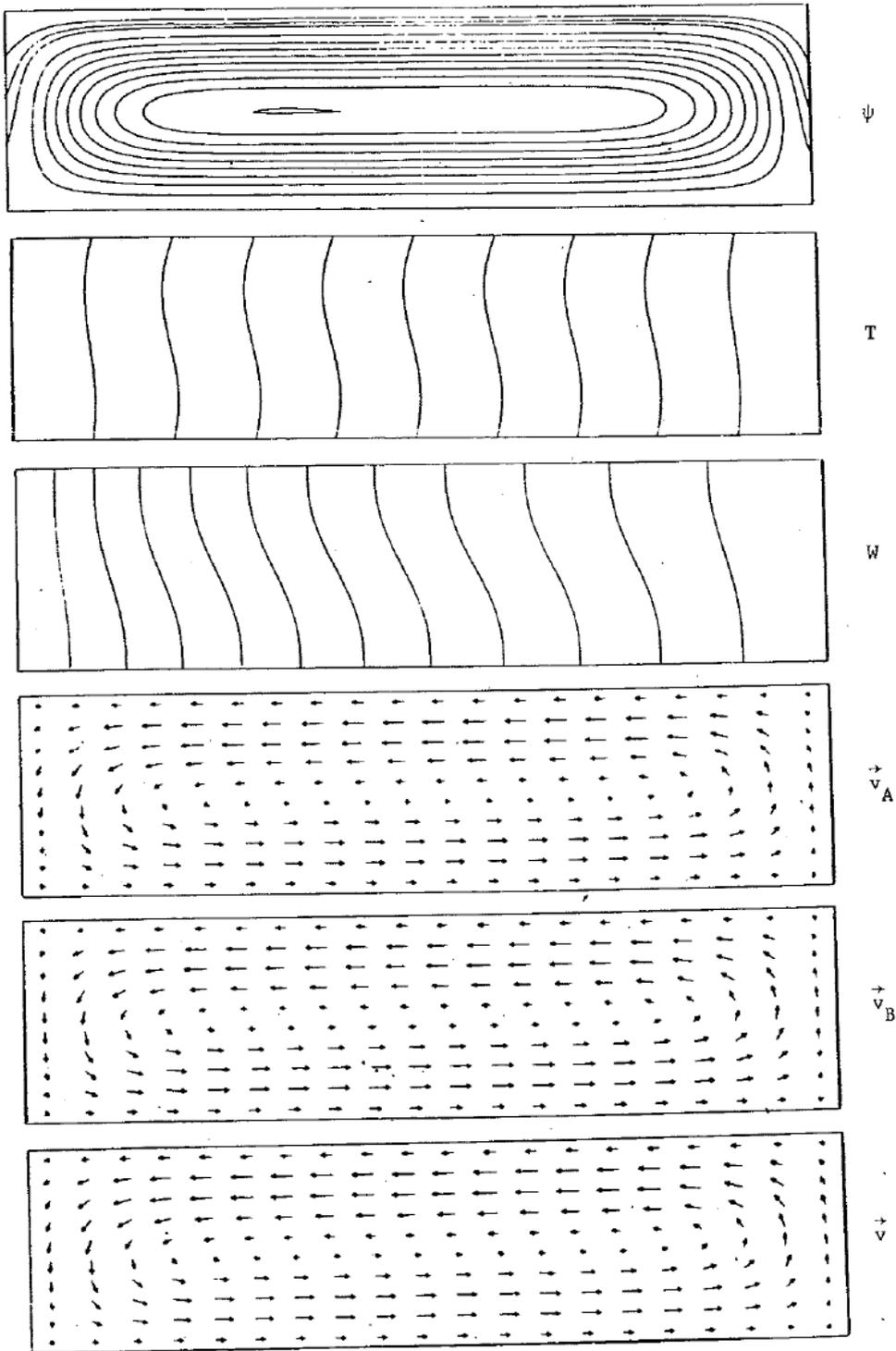


Fig. 6.4.3. Configurations du fluide pour différents Ra_T en « expansive convection »

$$Ra_T = 100000 \quad E = 5$$

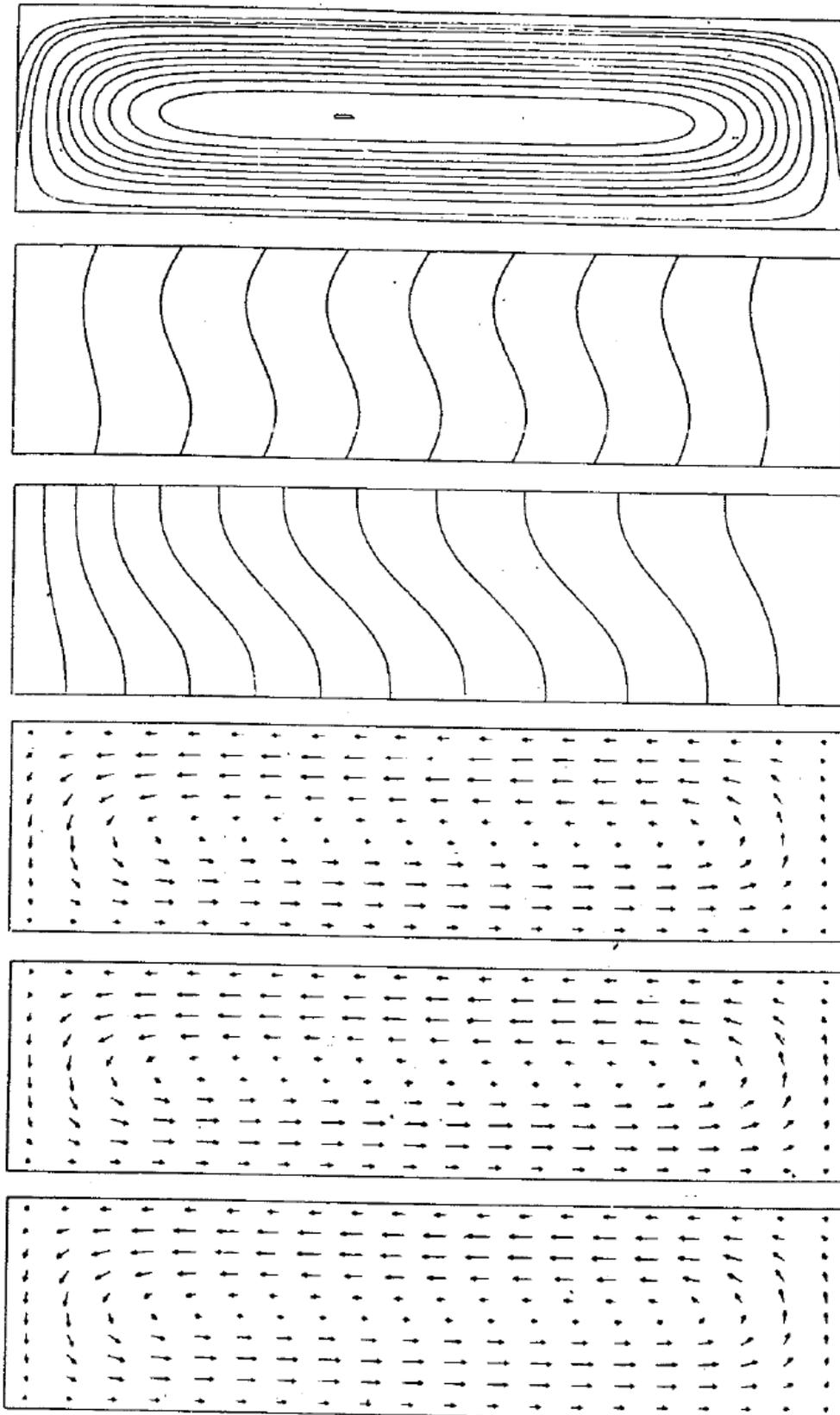


Fig. 6.4.4. Configurations du fluide pour différents Ra_T en « expansive convection »

$Ra_T = 300000$ $E = 5$

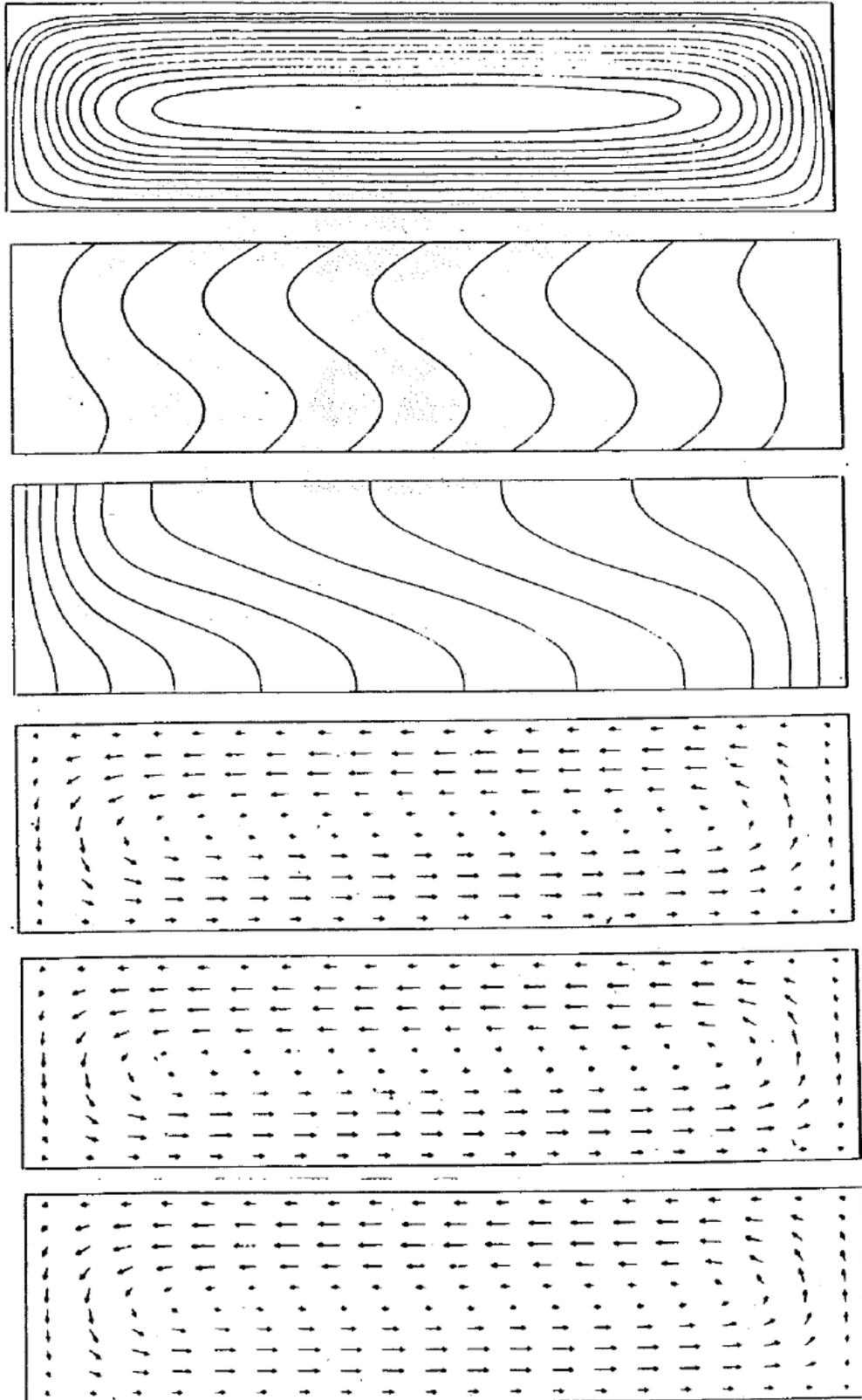


Fig. 6.4.5. Configurations du fluide pour différents Ra_T
en « expansive convection »

$Ra_T = 600000$ $E = 5$

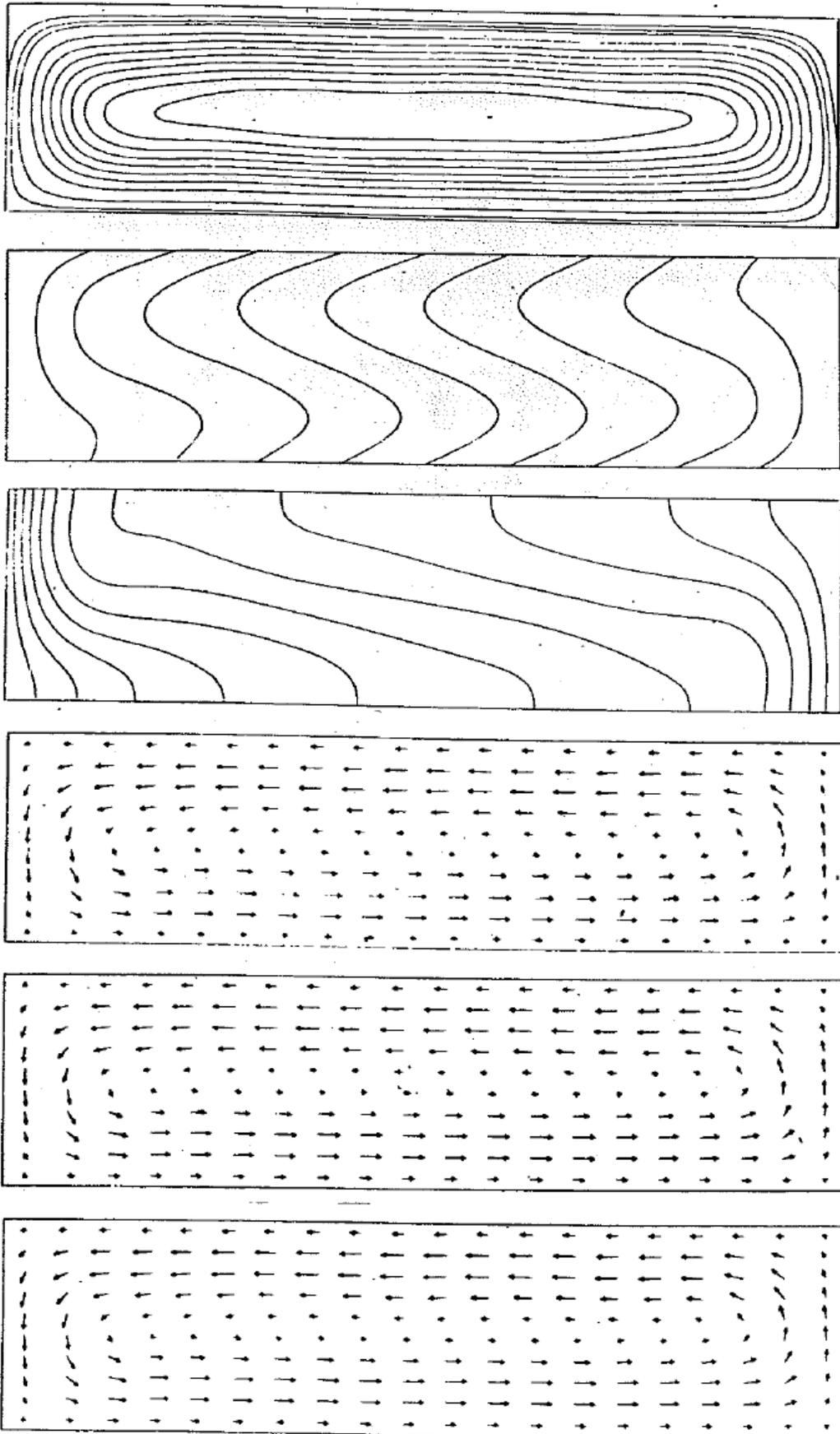


Fig. 6.4.6. Configurations du fluide pour différents Ra_T en « expansive convection »

$$Ra_T = 10^6 \quad E = 5$$

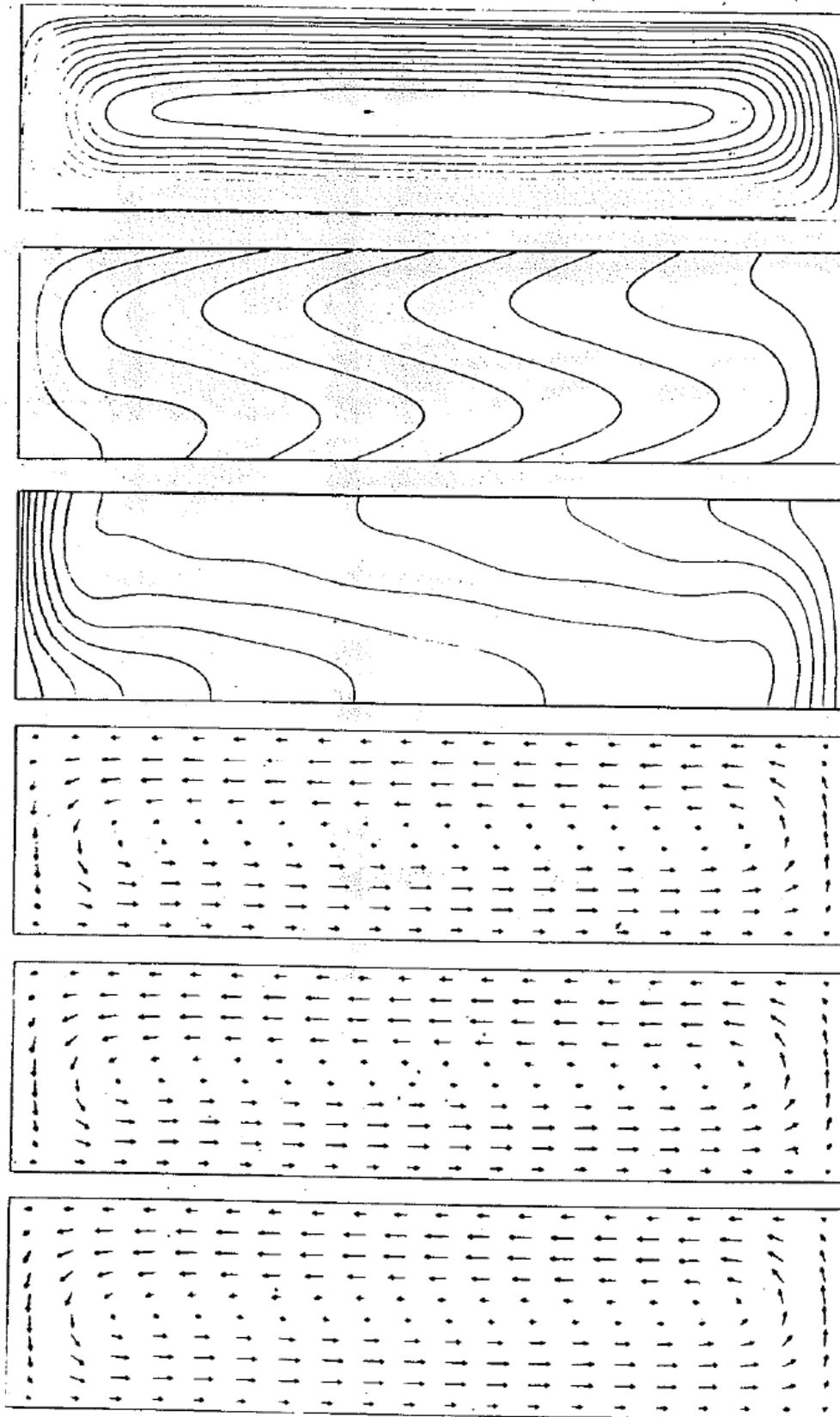


Fig. 6.4.7. Configurations du fluide pour différents Ra_T en « expansive convection »

$$Ra_T = 3.10^6 \quad E = 5$$

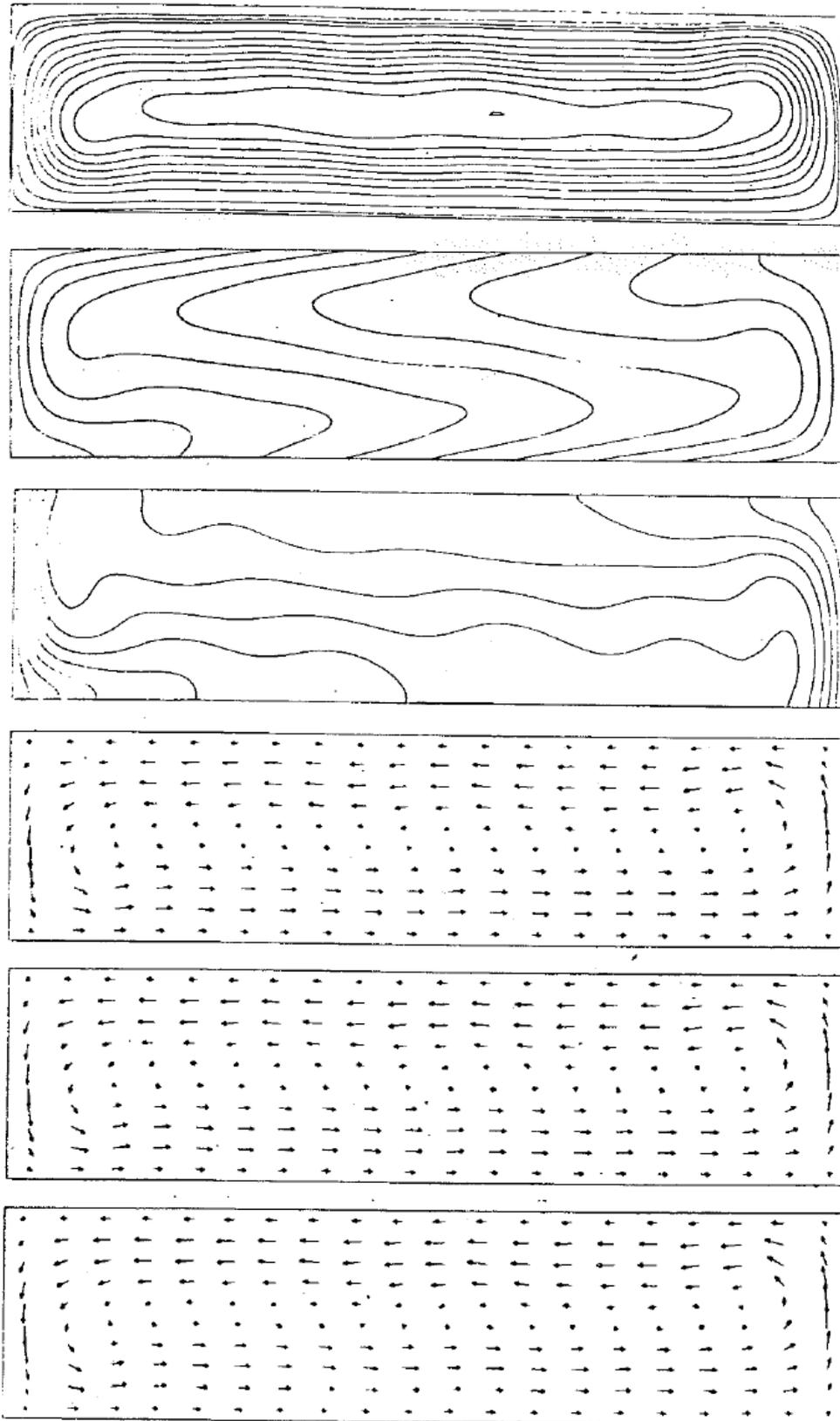


Fig. 6.4.8. Configurations du fluide pour différents Ra_T en « expansive convection »

6.5. Autres configurations

6.5.1. Des configurations verticales ont été étudiées par Markham et al (1981) avec l'hypothèse d'un fluide binaire compressible. Ces études ont traité les cas d'une cavité rectangulaire chauffée par le haut ($\Omega = 180^\circ$) et chauffée par le bas ($\Omega = 0^\circ$), avec des nombres de Rayleigh thermique et solutal tels que $Ra_T \ll |Ra_M|/Le$, et pour divers allongements ℓ .

Les paramètres suivants ont été fixés : $Le = 0,18$, $Pr = 1$, $E = 2,28$, $F = 225,72$.

6.5.2. Pour les cavités chauffées par le haut, nous nous sommes intéressés aux cas $\ell = 1,33$, $Ra_T = 1700$ et $Ra_M = -5640$ (fig. 6.5.1), ainsi qu'aux cas traités par Markham et al (1981) :

- $\ell = 1$, $Ra_T = 4000$, $Ra_M = -13270$ (fig. 6.5.2) d'une part,
- $\ell = 0,26$, $Ra_T = 277000$, $Ra_M = -755000$ (fig. 6.5.3) d'autre part.

Ces configurations admettraient toutes pour valeurs critiques de E , E_c , 1,02. Si l'on suppose que l'analyse proposée au § 6.1 reste encore valable pour de telles configurations, alors, avec $E = 2,28$ et $F = 225,72$, on devrait s'attendre à une recirculation de A et de B.

C'est ce que l'on observe pour le cas de la figure 6.5.3. Mais les cas des figures 6.5.1 et 6.5.2 montrent que l'espèce la plus lourde A ne recircule pas. Ces deux cas correspondent à des cavités d'allongement $\ell > 1$. On peut proposer l'explication suivante :

L'espèce la plus lourde A subit l'effet de la pesanteur, puisque la configuration est stable thermiquement et solutalement : A « tombe » donc vers le puits situé à la paroi inférieure, sans avoir le temps, sur une distance relativement courte, de subir partout les effets de frottement des parois inertes verticales. N'étant pas freinée sur son parcours au centre de la cavité, l'espèce A aura peu tendance à recirculer.

Comme le montrent les figures 6.5.2 et 6.5.3, les résultats obtenus par Markham et al donnent une configuration du mouvement semblable à celle que nous obtenons.

6.5.3. Pour une cavité chauffée par le bas, nous avons effectué le calcul avec les données suivantes de Markham et al : $\ell = 1$, $Ra_T = 30400$, $Ra_M \approx 0$ (diffusion solutale et convection thermique) (fig. 6.5.4). la valeur de E_c est 1,05. Nous serions donc, d'après les critères du § 6.1, dans une configuration de recirculation pour les espèces A et B.

C'est ce que l'on observe, en bon accord avec les résultats obtenus par Markham et al. Chaque composant recircule avec deux rouleaux axisymétriques. Les lignes de courant qui joignent les parois actives sont en très petit nombre, ce qui semble indiquer que ce sont les effets de convection thermique qui prédominent : la configuration du fluide est proche de celle de Bénard. Cependant les effets du flux interfacial sont portés sur la répartition relative des espèces (fort gradient solutal au voisinage du puits, $Ra_M \approx 10^{-2}$) et sur le champ de température (lignes isothermes très resserrées vers le puits).

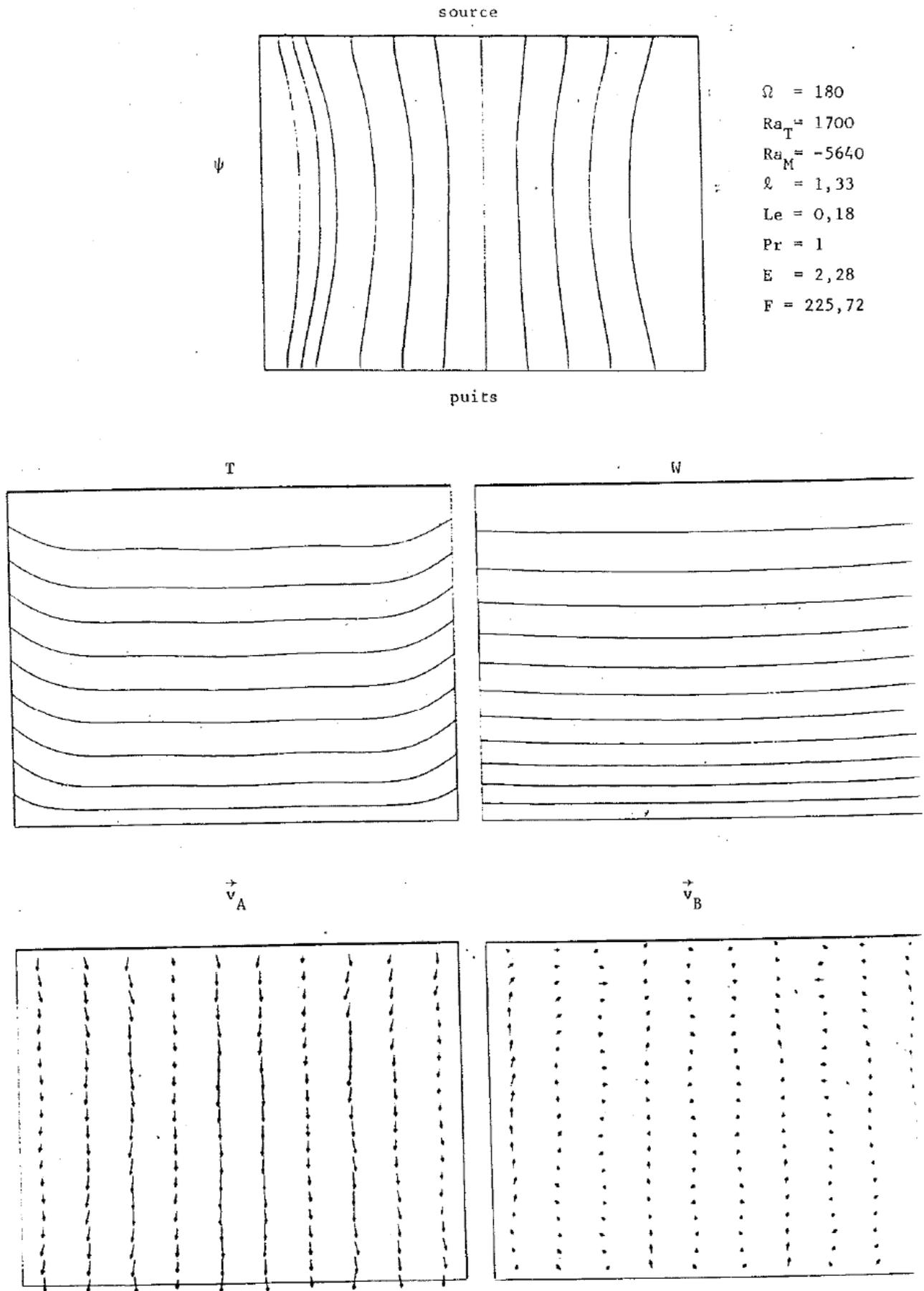
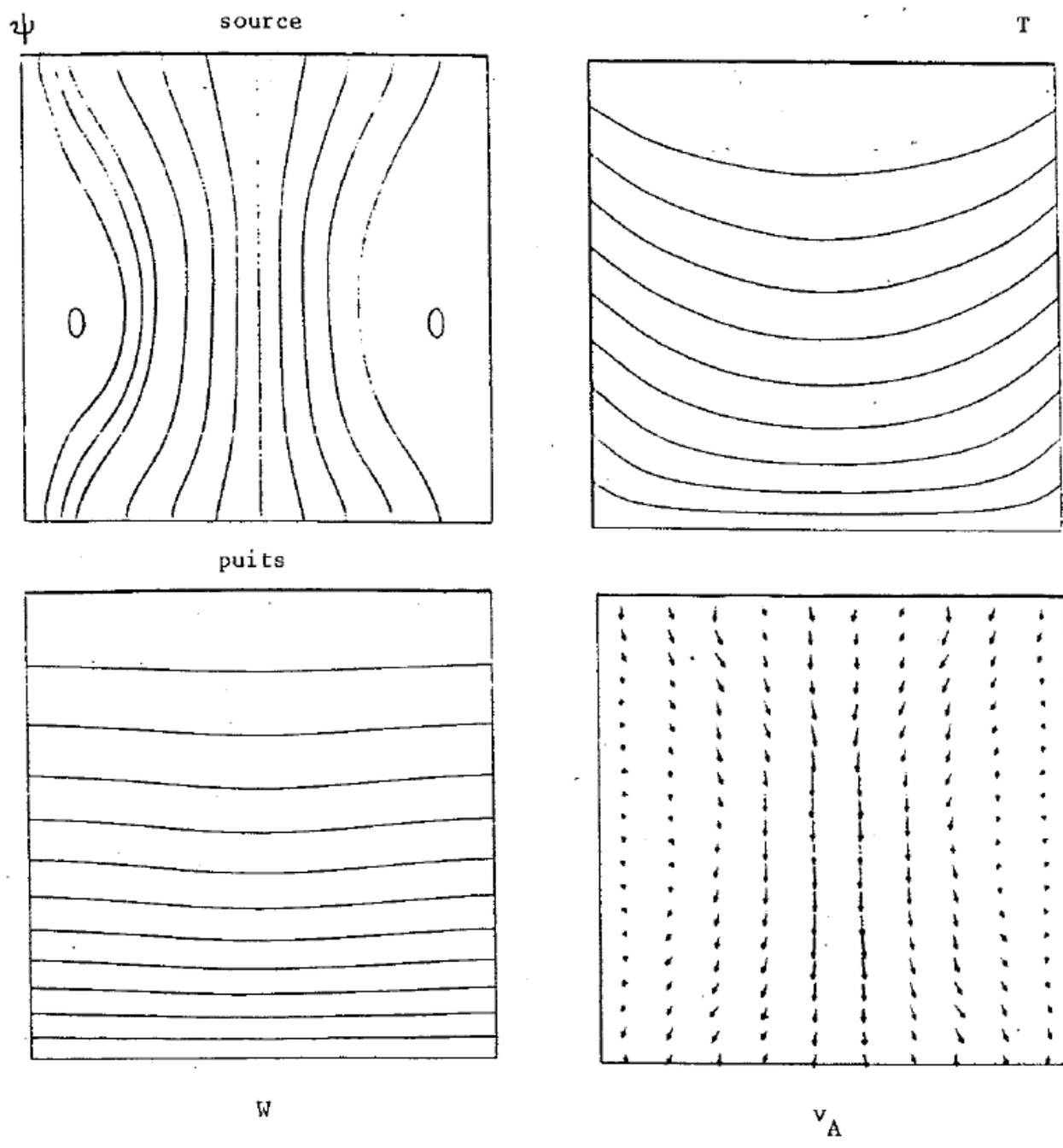


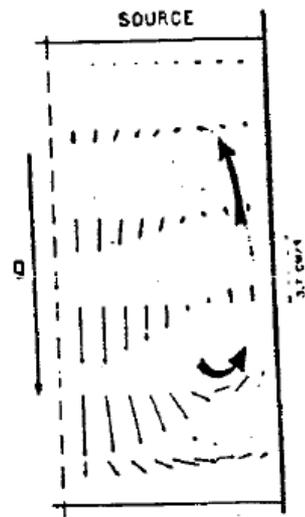
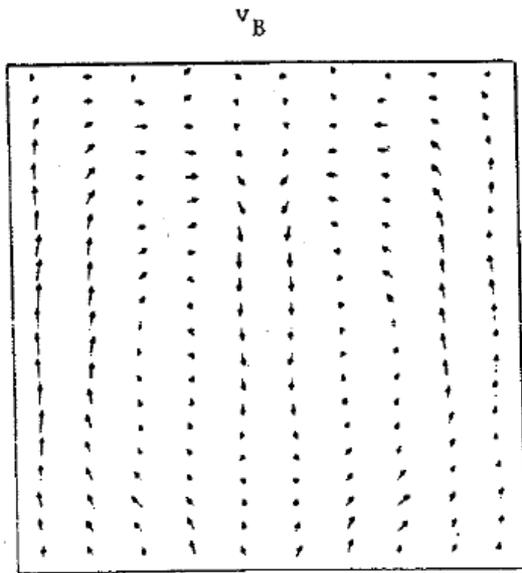
Fig. 6.5.1. Double diffusion dans une cavité rectangulaire chauffée par le haut



$$\begin{aligned}
 \Omega &= 180, & Ra_T &= .4000, & Va_M &= - 13270 \\
 \lambda &= 1, & Le &= 0,18, & Pr &= 1, & E &= 2,28 \\
 & & & & F &= 225,72
 \end{aligned}$$

Fig. 6.5.2. Double diffusion dans une cavité carrée chauffée par le haut

v_B (Markham et al, 1981)



v (Markham et al, 1981)

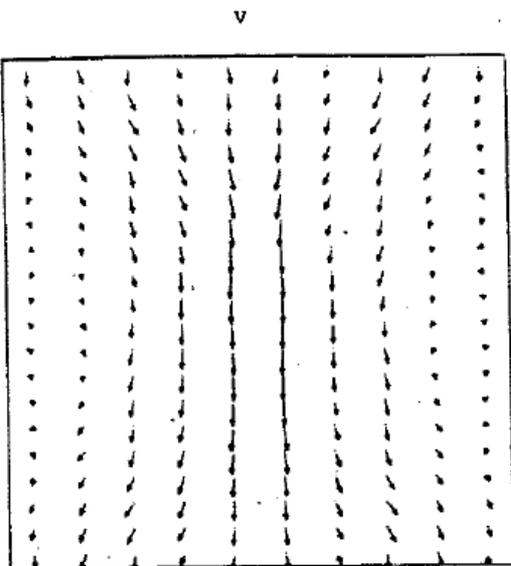


Fig. 6.5.2 (suite)

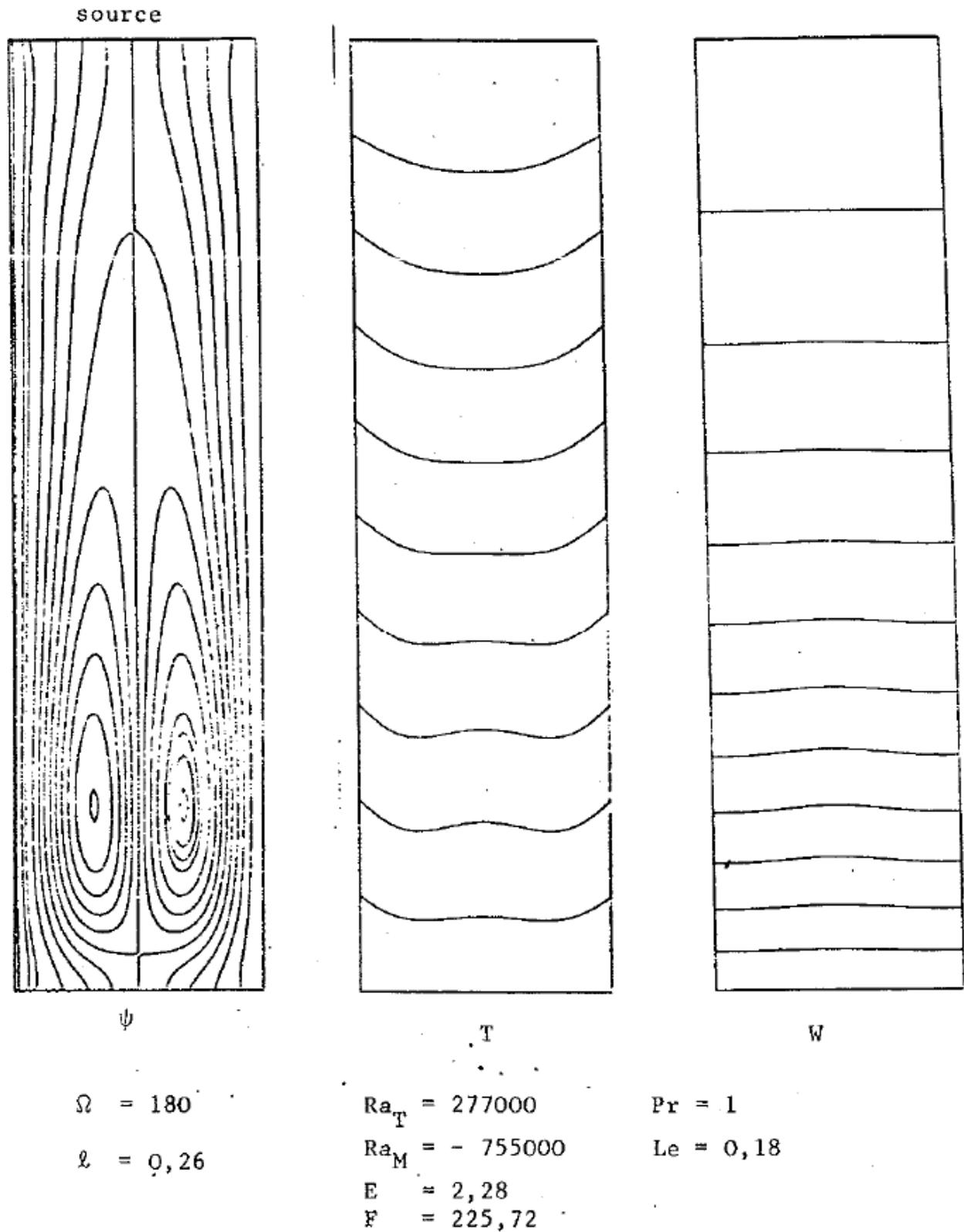
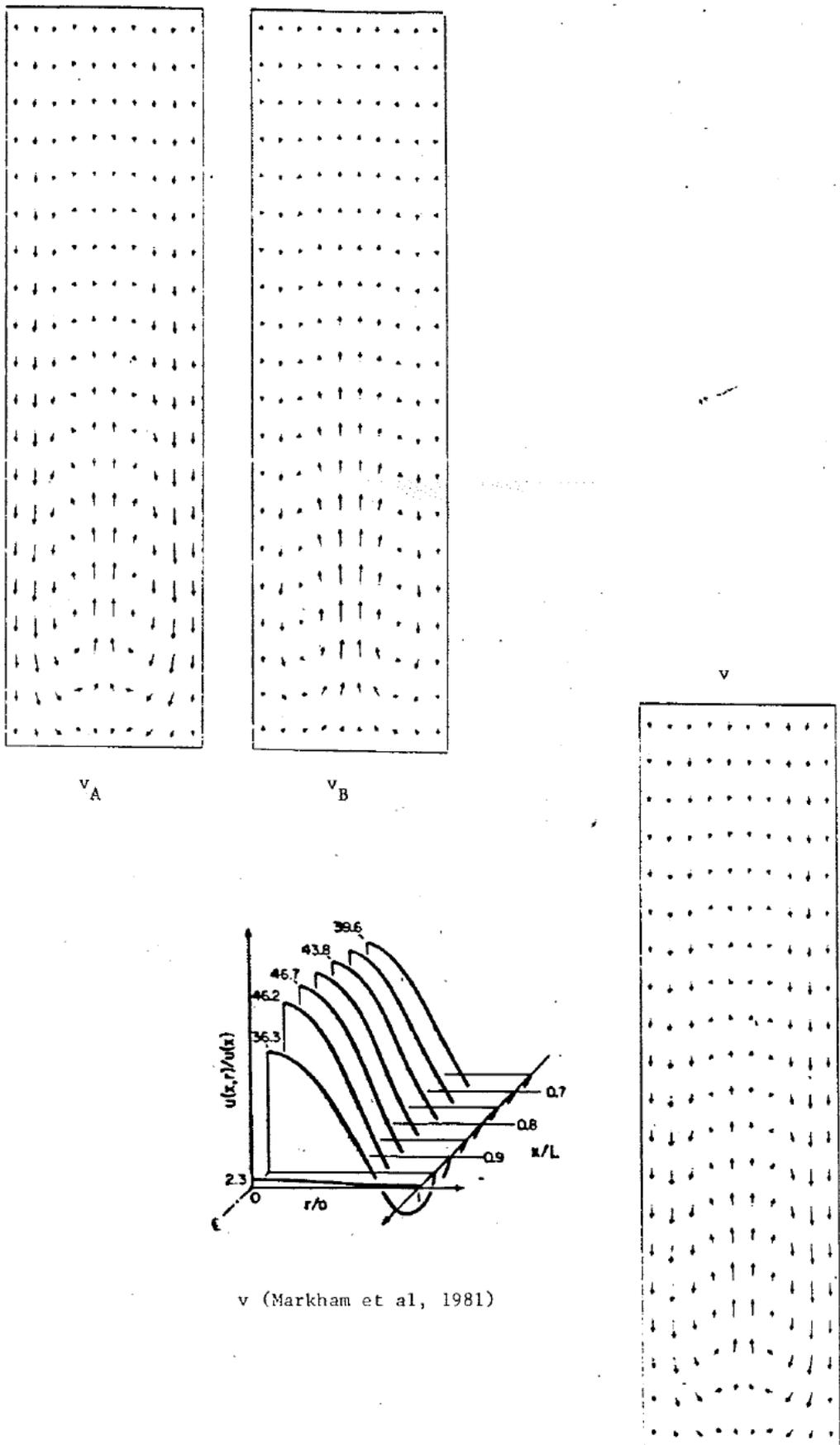


Fig. 6.5.3. Double diffusion dans une cavité rectangulaire allongée chauffée par le haut



v (Markham et al, 1981)

Fig. 6.5.3 (suite)

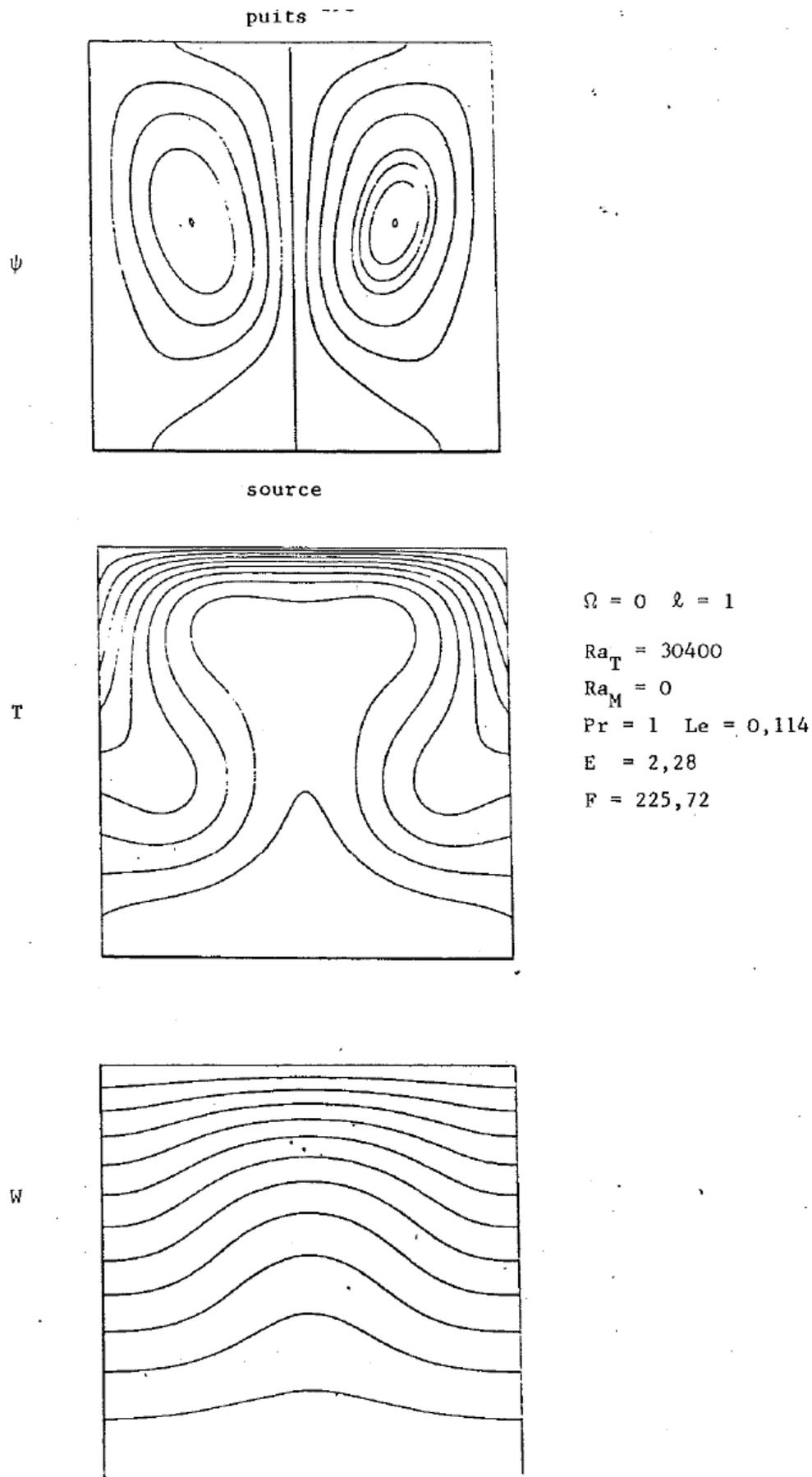


Fig. 6.5.4. Diffusion solutale et convection thermique dans une cavité carrée chauffée par le bas

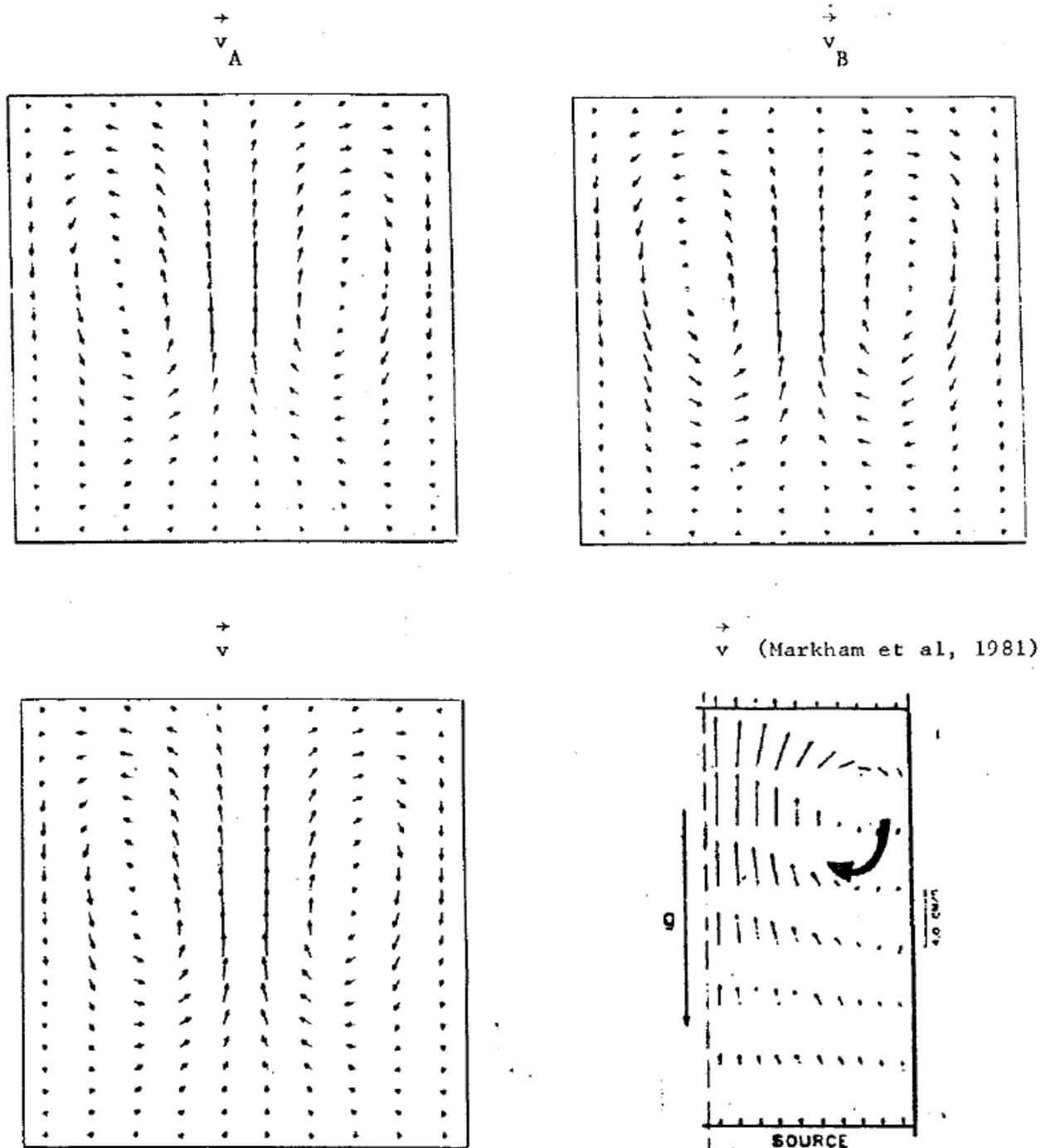


Fig. 6.5.4 (suite)

Conclusion

Nous avons modélisé le phénomène de double diffusion qui apparaît dans un tube de croissance cristalline par transport physique dans une phase vapeur confinée. Le modèle est restreint à une configuration bidimensionnelle, représentant l'écoulement dans un plan de symétrie d'une ampoule cylindrique. Cette hypothèse s'appuie en fait sur la comparaison avec les résultats 3D obtenus par voie expérimentale (Schiroky et Rosenberger) et numérique (Smutek et al) dans le cas de la convection naturelle pure.

Le modèle 2D de la double diffusion repose sur des hypothèses de linéarité pour les transports (lois de Fourier et de Fick) et de quasi-incompressibilité (fluide de Boussinesq). Les équations ont été résolues à l'aide de la méthode spectrale Tau-Chebyshev. Les changements de régimes de transport du composant actif ont été étudiés par simulation numérique qui a mis en évidence l'influence relative des flux diffusif interfacial et de convection. Pour décrire les transitions une analyse théorique a permis de construire des corrélations entre les paramètres de l'écoulement en tenant compte d'une variation locale de la densité avec la concentration. Un critère a été obtenu pour la transition entre un écoulement dominé par la convection et un écoulement dominé par la diffusion. La relation en ordre de grandeur s'exprime entre le taux de sublimation E , le rapport de forme ℓ , le nombre de Lewis Le , et le nombre de Rayleigh équivalent Ra_{eq} :

$$E \sim 1 + \frac{16 \times 9 \sqrt{3}}{Le |Ra_{eq}| \ell^3}$$

Cette prédiction s'est avérée satisfaisante dans les cas que nous avons traités numériquement : la cavité ayant un allongement $\ell \sim 0,2$ et les nombres de Prandtl et de Lewis étant de l'ordre de l'unité, nous avons pris comme gamme des valeurs des paramètres à étudier :

- $1 < E \leq 10$
- $Ra_T \sim 0, |Ra_M| < 10^6$ (convection solutale)
- $Ra_T < 10^6, Ra_M \sim 0$ (convection thermique)
- $Ra_{eq} \sim 0$ avec soit $Ra_T \sim |Ra_M|$, soit Ra_T et $Ra_M \sim 0$

Dans tous ces cas il a été supposé que l'agent de transport était l'espèce la plus lourde ($M_A > M_B$) et que la densité du fluide moyen était plus grande à la source qu'au puits.

De plus, dans le modèle proposé on a supposé une indépendance entre l'écoulement et les phénomènes à l'interface. Cette simplification est utile pour une première analyse de la double diffusion dans un tube de croissance cristalline par transport physique. Une étude complémentaire doit prendre en compte des interactions qui existent entre les propriétés thermo-chimiques du cristal et les propriétés hydrodynamiques du fluide. Des modèles d'interactions au niveau des conditions aux limites ont été proposés avec une approximation 1D (Omalý, Robert et Cadoret, 1981, Zappoli et Élie, 1984).

Annexe 1

Parois terminales thermiquement conductrices

La condition : $\frac{\partial T}{\partial y}(\pm 1, y) = 1$, $-1 < y < 1$ conduit à l'approximation :

$$\sum_{m=0}^{M-1} \left(\sum_{n=0}^{N-1} b_{nm}^{(01)} (\pm 1)^n \right) T_m(y) = 1 = T_0(y)$$

d'où :

$$\left[\sum_{n=0}^{N-1} b_{n0}^{(01)} (\pm 1)^n - 1 \right] T_0(y) + \sum_{m=1}^{M-1} \left(\sum_{n=0}^{N-1} b_{nm}^{(01)} (\pm 1)^n \right) T_m(y) = 0$$

ce qui implique l'annulation des coefficients de chaque polynôme de Chebyshev :

$$(i) \quad \sum_{n=0}^{N-1} b_{n0}^{(01)} (\pm 1)^n - 1 = 0$$

$$(ii) \quad \sum_{n=0}^{N-1} b_{nm}^{(01)} (\pm 1)^n = 0 \quad , \quad 0 < m < M-1$$

L'égalité (i) nous permet de déterminer les inconnues $b_{N-1,0}$ et b_{N0} . En effet, on exprime les $b_{n0}^{(01)}$ en fonction des b_{p0} (Gottlieb et Orszag, 1971) :

$$b_{n0}^{(01)} = \frac{2}{c_n} \sum_{p=n+1; p+n \text{ impair}}^N p b_{p0}$$

puis on sépare les termes pairs et les termes impairs dans l'égalité (i) :

$$R_1 \pm R_2 + (N-1) b_{N-1,0} \left[\frac{1+(-1)^N}{2} \sum_{n=0, n \text{ pair}}^N \frac{2}{c_n} \pm \frac{1-(-1)^N}{2} \sum_{n=1, p \text{ impair}}^N 2 \right]$$

$$+ N b_{N0} \left[\frac{1-(-1)^N}{2} \sum_{n=0, n \text{ pair}}^N \frac{2}{c_n} \pm \frac{1+(-1)^N}{2} \sum_{n=1, n \text{ impair}}^N 2 \right]$$

$$+ \frac{2}{c_{N-1}} \left[\frac{1-(-1)^N}{2} \pm \frac{2}{c_{N-1}} \frac{1+(-1)^N}{2} \right] = 1$$

où l'on a posé :

$$R_1 = \sum_{n=0, n \text{ pair}}^{N-1} \frac{2}{c_n} \sum_{p=n+1, p \text{ impair}}^N p b_{p0}$$

$$R_2 = \sum_{n=1, n \text{ impair}}^{N-1} 2 \sum_{p=n+1, p \text{ pair}}^N p b_{p0}$$

Dans le cas où N est pair, nous avons le système :

$$(N-1)^2 b_{N-1,0} + N^2 b_{N0} = 1 - (R_1 + R_2)$$

$$(N-1)^2 b_{N-1,0} - N^2 b_{N0} = 1 - (R_1 - R_2)$$

qui a pour solutions :

$$b_{N-1,0} = \frac{1-R_1}{(N-1)^2} \quad \text{et} \quad b_{N0} = -\frac{R_2}{N^2}$$

et dans le cas où N est impair, nous avons le système :

$$(N-1)^2 b_{N-1,0} + N^2 b_{N0} = 1 - (R_1 + R_2)$$

$$-(N-1)^2 b_{N-1,0} + N^2 b_{N0} = 1 - (R_1 - R_2)$$

qui a pour solutions :

$$b_{N-1,0} = -\frac{R_2}{(N-1)^2} \quad \text{et} \quad b_{N0} = \frac{1-R_1}{N^2}$$

Annexe 2

Parois terminales imperméables aux espèces chimiques

La condition d'imperméabilité aux espèces A et B des parois terminales $x = \pm 1$: $\frac{\partial W}{\partial x}(\pm 1, y) = 0$ admet l'approximation spectrale Tau-Chebyshev :

$$\sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^M d_{nm}^{(10)} (\pm 1)^n T_m(y) = 0, \quad -1 < y < 1$$

L'inversion de ce système conduit à :

$$\sum_{n=0}^{N-1} d_{nm}^{(10)} (\pm 1)^n = 0 \quad 0 < m < M$$

avec :

$$d_{Nm}^{(10)} = 0 \quad \text{pour tout } m$$

$$d_{nm}^{(10)} = \frac{2}{c_n} \sum_{p=n+1, p+n \text{ impair}}^N p d_{pm} \quad , \quad 0 < n < N-1$$

La condition s'écrit donc :

$$\sum_{n=0}^{N-1} (\pm 1)^n \frac{2}{c_n} \sum_{p=n+1, p+n \text{ impair}}^N p d_{pm} = 0 \quad , \quad 0 < m < M$$

La décomposition de cette expression en parties paire et impaire conduit à :

$$\sum_{n=0, n \text{ pair}}^{N-1} \frac{2}{c_n} \sum_{p=n+1, p \text{ impair}}^N p d_{pm}^{\pm} \pm \sum_{n=1, n \text{ impair}}^{N-1} \frac{2}{c_n} \sum_{p=n+1, p \text{ pair}}^N p d_{pm} = 0$$

Dans cette expression, nous pouvons isoler les inconnues $d_{N-1,m}$ et d_{Nm} :

$$A_{N-2,m}^{\pm} + \left[\frac{1 - (-1)^N}{2} \sum_{n=0, n \text{ pair}}^{N-1} \frac{2}{c_n} \pm \frac{1 + (-1)^N}{2} \sum_{n=1, n \text{ impair}}^{N-1} \frac{2}{c_n} \right] N d_{Nm} \\ + \left[\frac{1 + (-1)^N}{2} \sum_{n=0, n \text{ pair}}^{N-2} \frac{2}{c_n} \pm \frac{1 - (-1)^N}{2} \sum_{n=1, n \text{ impair}}^{N-2} \frac{2}{c_n} \right] (N-1) d_{N-1,m} = 0$$

où l'on a posé :

$$A_{N-2,m}^{\pm} = \sum_{n=0, n \text{ pair}}^{N-2} \frac{2}{c_n} \sum_{p=n+1, p \text{ impair}}^{N-2} p d_{pm}^{\pm} \pm \sum_{n=1, n \text{ impair}}^{N-2} \frac{2}{c_n} \sum_{p=n+1, p \text{ pair}}^{N-2} p d_{pm}$$

Sachant que :

$$c_0 = c_N = 2, \quad c_n = 1 \quad 0 < n < N,$$

on a :

$$\sum_{n=0, n \text{ pair}}^{N-1} \frac{2}{c_n} = N - \frac{1}{2} \pm \frac{(-1)^N}{2}$$

$$\sum_{n=1, n \text{ impair}}^{N-1} \frac{2}{c_n} = N - \frac{1}{2} + \frac{(-1)^N}{2}$$

$$\sum_{n=0, n \text{ pair}}^{N-2} \frac{2}{c_n} = N - \frac{3}{2} + \frac{(-1)^N}{2}$$

$$\sum_{n=1, n \text{ impair}}^{N-2} \frac{2}{c_n} = N - \frac{3}{2} - \frac{(-1)^N}{2}$$

ce qui permet d'écrire les équations en d_{Nm} et $d_{N-1,m}$:

$$A_{N-2,m}^{\pm} + \left[\frac{1 - (-1)^N}{2} \left(N - \frac{1}{2} - \frac{(-1)^N}{2} \right) \pm \frac{1 + (-1)^N}{2} \left(N - \frac{1}{2} + \frac{(-1)^N}{2} \right) \right] N d_{Nm} \\ + \left[\frac{1 + (-1)^N}{2} \left(N - \frac{3}{2} + \frac{(-1)^N}{2} \right) \pm \frac{1 - (-1)^N}{2} \left(N - \frac{3}{2} - \frac{(-1)^N}{2} \right) \right] (N-1) d_{N-1,m} = 0$$

Si l'on pose :

$$S_1 = \sum_{n=0, n \text{ pair}}^{N-2} \frac{2}{c_n} \sum_{p=n+1, p \text{ impair}}^{N-2} p d_{pm}$$

$$S_2 = \sum_{n=1, n \text{ impair}}^{N-2} 2 \sum_{p=n+1, p \text{ pair}}^{N-2} p d_{pm}$$

alors :

$$A_{N-2,m}^+ = S_1 + S_2 \quad , \quad A_{N-2,m}^- = S_1 - S_2$$

et l'on a les systèmes :

$$\left. \begin{array}{l} N^2 d_{Nm} + (N-1)^2 d_{N-1,m} = -(S_1 + S_2) \\ -N^2 d_{Nm} + (N-1)^2 d_{N-1,m} = -(S_1 - S_2) \end{array} \right| \quad N \text{ pair}$$

$$\left. \begin{array}{l} N^2 d_{Nm} + (N-1)^2 d_{N-1,m} = -(S_1 + S_2) \\ N^2 d_{Nm} - (N-1)^2 d_{N-1,m} = -(S_1 - S_2) \end{array} \right| \quad N \text{ impair}$$

qui admettent pour solutions :

$$d_{Nm} = -\frac{S_2}{N^2} \quad ; \quad d_{N-1,m} = -\frac{S_1}{(N-1)^2} \quad \text{si } N \text{ est pair}$$

$$d_{Nm} = -\frac{S_1}{N^2} \quad ; \quad d_{N-1,m} = -\frac{S_2}{(N-1)^2} \quad \text{si } N \text{ est impair}$$

Annexe 3

Calcul des nombres de Prandtl et de Lewis pour des mélanges gazeux binaires

Problème : calculer les nombres de Prandtl $Pr = \frac{\bar{\mu} \hat{C}_p}{\bar{\lambda}}$ et de Lewis $Le = \frac{\bar{\lambda}}{\bar{\rho}_0 \hat{C}_p} \cdot \frac{1}{\bar{D}_{AB}}$ pour un mélange gazeux binaire ; $\bar{\mu}$, $\bar{\lambda}$, \bar{D}_{AB} et \hat{C}_p sont respectivement la viscosité dynamique du mélange, la diffusivité thermique du mélange, la diffusivité massique du mélange, et la chaleur massique à pression constante par unité de mole :

$$\hat{C}_p = \frac{5}{2} \frac{\mathcal{R}}{\bar{M}} = \frac{5}{2} R \text{ pour un gaz parfait}$$

où \mathcal{R} est la constante des gaz parfaits : $\mathcal{R} = 8,31447 \cdot 10^3 \text{ J.kmol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et \bar{M} la masse molaire moyenne du gaz total.

Cas d'un gaz homogène monoatomique :

La diffusivité thermique $\bar{\lambda}$ est donnée par la formule de Chapman-Enskog :

$$\bar{\lambda} = 1,9891 \cdot 10^{-4} \sqrt{T/\bar{M}} / \sigma^2 \cdot \Omega_\lambda$$

Dans cette expression, si σ est en (Å) et T en (K), alors $\bar{\lambda}$ est en (cal.cm⁻¹.s⁻¹.K⁻¹). Le nombre Ω_λ est fonction du paramètre ε/k du potentiel de Lennard-Jones, qui est l'énergie potentielle des interactions moléculaires : $\Omega_\lambda = f(kT/\varepsilon)$ qui est donnée par les tables. σ intervient aussi dans le potentiel de Lennard-Jones :

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Si l'on considère le gaz parfait, $\bar{\lambda}$ prend la forme : $\bar{\lambda} = \frac{5}{2} \hat{C}_v \bar{\mu}$ où \hat{C}_v est la chaleur massique isochore par unité de mole :

$$\hat{C}_v = \frac{3}{2} \frac{\mathcal{R}}{\bar{M}} = \frac{3}{2} R$$

Dans ce cas, le nombre de Prandtl devient :

$$Pr = \frac{\bar{\mu} \hat{C}_p}{\bar{\lambda}} = \frac{\bar{\mu} (5/2) \mathcal{R} / \bar{M}}{(5/2) (3/2) (\mathcal{R} / \bar{M}) \bar{\mu}} = \frac{2}{3} = 0,66 \dots$$

Cas d'un gaz homogène polyatomique :

La diffusivité thermique $\bar{\lambda}$ est alors donnée par la formule d'Eucken :

$$\bar{\lambda} = \left(\hat{C}_p + \frac{5}{4} \frac{\mathcal{R}}{\bar{M}} \right) \bar{\mu}$$

d'où le nombre de Prandtl :

$$Pr = \frac{\bar{\mu} \hat{C}_p}{\bar{\lambda}} = \frac{(5/2) \mathcal{R} / \bar{M}}{(5/2) \mathcal{R} / \bar{M} + (5/4) \mathcal{R} / \bar{M}} = \frac{2}{3} = 0,66 \dots$$

Calcul de la viscosité $\bar{\mu}$:

La viscosité dynamique $\bar{\mu}$ peut être calculée à partir de la formule :

$$\bar{\mu} = 2,6693 \cdot 10^{-5} \sqrt{\bar{M}T} / \sigma^2 \cdot \Omega_{\mu}$$

où elle est exprimée en $\text{g}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ si σ est en Å et T en degrés K. Ω_{μ} est une fonction de kT/ε également donnée par les tables.

Des formules empiriques ont permis d'exprimer les potentiels de Lennard-Jones à l'aide des coordonnées du point critique du gaz ($\bar{T}_c, \bar{P}_c, \bar{V}_c$) :

$$\varepsilon/k \approx 0,77 \bar{T}_c \quad (\text{en K})$$

$$\sigma \approx 0,841 \bar{V}_c^{1/3} = 2,44 (\bar{T}_c / \bar{P}_c)^{1/3} \quad \text{en Å si } \bar{T}_c \text{ (en K et } \bar{P}_c \text{ en atmosphères)}$$

Ces formules sont à utiliser si le gaz ne peut être considéré comme parfait.

Cas d'un gaz non homogène :

Si le gaz est un mélange de n constituants chimiques notés "i", sa viscosité et sa diffusivité thermique s'expriment à l'aide des viscosités et des diffusivités thermiques de chacun des constituants, par les formules de Wilke:

$$\bar{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \bar{\mu}_i}{\sum_{j=1}^n x_j \phi_{ij}}$$

$$\bar{\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \bar{\lambda}_i}{\sum_{j=1}^n x_j \phi_{ij}}$$

où:

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{\bar{M}_i}{\bar{M}_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\bar{\mu}_i}{\bar{\mu}_j} \right)^{1/2} \left(\frac{\bar{M}_j}{\bar{M}_i} \right)^{1/4} \right]^2$$

et où les x_i sont les fractions molaires de chacune des espèces:

$$x_i = \frac{\bar{C}_i}{\bar{C}} = \frac{\bar{C}_i}{\sum_{j=1}^n \bar{C}_j} = \frac{\bar{\rho}_i / \bar{M}_i}{\sum_{j=1}^n \bar{\rho}_j / \bar{M}_j}$$

Si le gaz est un mélange binaire de constituants A et B, alors la diffusivité massique s'exprime à l'aide de la formule de Chapman-Enskog:

$$\bar{C} \bar{D}_{AB} = 2,2646 \cdot 10^{-5} (\bar{T} (1/\bar{M}_A + 1/\bar{M}_B))^{1/2} \sigma_{AB}^2 \Omega_{AB}$$

\bar{D}_{AB} étant exprimé en cm^3/s si \bar{C} est en $\text{g}\cdot\text{mol}/\text{cm}^3$, T en degrés K, et σ_{AB} en Å.

Dans cette formule Ω_{AB} est une fonction des paramètres du potentiel de Lennard-Jones:

$$\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_A \varepsilon_B} \quad \text{et} \quad \sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}$$

qui interviennent dans le calcul de l'énergie potentielle d'interaction moléculaire dans un gaz binaire:

$$\varphi_{AB}(r) = 4\varepsilon_{AB} \left[\left(\frac{\sigma_{AB}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{AB}}{r} \right)^6 \right]$$

Si le gaz binaire est considéré parfait, alors:

$$\bar{C} = \bar{P} / (\mathcal{R} \bar{T})$$

et donc:

$$\bar{D}_{AB} = 0,0018583 (\bar{T}^3 (1/\bar{M}_A + 1/\bar{M}_B))^{1/2} / \bar{P} \cdot \sigma_{AB}^2 \Omega_{AB}$$

qui permet de calculer le nombre de Lewis pour un mélange binaire.

Annexe 4

Critère de compatibilité entre l'approximation de Boussinesq et la loi des gaz parfaits, appliquées à un fluide binaire contenu dans une enceinte différentiellement chauffée

A4.1. Position du problème; définition du critère de compatibilité

La poussée d'Archimède a pour effet de provoquer un mouvement descendant par rapport à la gravité des particules de fluide les plus denses, et, inversement, un mouvement ascendant des particules les plus légères.

Pour modéliser le mouvement du fluide, on est amené à utiliser successivement la loi des gaz parfaits et l'approximation de Boussinesq.

La loi des gaz parfaits et l'approximation de Boussinesq sont des modèles de variation de la densité en fonction de la température et de la fraction massique, avec l'hypothèse que la pression moyenne statique est constante.

Toute différence de densité $\Delta\rho$ entre deux points induit une poussée d'Archimède d'intensité proportionnelle à $\Delta\rho$. Cette différence doit être maximale entre la source et le puits. On prendra cette différence maximale $\Delta\rho = \rho_2 - \rho_1$ comme quantité qu'on va évaluer comparativement avec l'hypothèse de Boussinesq et la loi des gaz parfaits.

Il est évident que les deux modèles ne coïncident pas en tous points. De plus, il est a priori difficile de construire un critère qui reposerait, de façon quantitative, sur l'écart entre les deux évaluations de $\Delta\rho$. On adoptera un critère faible de compatibilité entre les deux approximations: ce critère repose sur l'égalité des signes des évaluations de $\Delta\rho$, respectivement obtenues par la loi des gaz parfaits ($\Delta\rho^{GP}$), et par l'approximation de Boussinesq ($\Delta\rho^B$).

A4.2. Etude du signe de l'écart de densité entre la source et le puits exprimé à l'aide des deux modèles

A4.2.1. Modèle physique

Il est schématisé sur la fig. A4.1.



Fig. A4.1. Géométrie et conditions aux limites

avec les conditions:

$$T_2 > T_1, 1 > W_2 > W_1 \text{ et l'hypothèse que la pression moyenne statique } p = \text{cste} \quad (\text{A4.1})$$

A4.2.2. Expressions des écarts de densité

L'équation des gaz parfaits à pression constante et l'hypothèse de Boussinesq conduisent respectivement aux expressions suivantes:

$$\Delta\rho^{GP}=\rho_2-\rho_1=\left(\frac{pM_A M_B}{RT_1 T_2}\right)\frac{T_1 W_1}{M_A M_B}(M_A-M_B)\left[\frac{M_A}{M_A-M_B}\frac{1}{W_1}\left(1-\frac{T_2}{T_1}\right)-\left(1-\frac{T_2 W_2}{T_1 W_1}\right)\right] \quad (A4.2)$$

$$\Delta\rho^B=\rho_2-\rho_1=\rho_0(-\alpha_A(W_2-W_1)-\beta(T_2-T_1))$$

Le critère adopté est l'égalité des signes de $\Delta\rho^{GP}$ et $\Delta\rho^B$:

$$\text{signe}(\Delta\rho^B)=\text{signe}(\Delta\rho^{GP})$$

Comme on le verra, il est vérifié pour certaines valeurs relatives des masses molaires M_A et M_B des espèces.

A4.2.3. Etude du signe de $\Delta\rho^{GP}$ et $\Delta\rho^B$

A4.2.3.1. Lorsque $M_A < M_B$:

On a alors:

$$\alpha_A=|\alpha_A| \quad (A4.3)$$

Il en résulte que $\Delta\rho^B$ est négatif quels que soient $W_2 > W_1$ et $T_2 > T_1$:

$$\Delta\rho^B=\rho_0[-|\alpha_A|(W_2-W_1)-\beta(T_2-T_1)] < 0 \quad (A4.4)$$

Par contre, le signe de $\Delta\rho^{GP}$ peut être positif ou négatif suivant les valeurs de W_2/W_1 :

$$\Delta\rho^{GP} > 0 \text{ si : } \frac{W_2}{W_1} < \left(1+\frac{M_A}{|M_A-M_B|}\frac{1}{W_1}\right)\frac{T_1}{T_2} - \frac{M_A}{|M_A-M_B|}\frac{1}{W_1} \quad (A4.5)$$

$$\Delta\rho^{GP} < 0 \text{ si : } \frac{W_2}{W_1} > \left(1+\frac{M_A}{|M_A-M_B|}\frac{1}{W_1}\right)\frac{T_1}{T_2} - \frac{M_A}{|M_A-M_B|}\frac{1}{W_1} \quad (A4.6)$$

On peut représenter la frontière entre ces deux domaines par une courbe dans le plan

$$(x,y) = (T_2/T_1, W_2/W_1)$$

Il s'agit d'une hyperbole:

$$y = \frac{k}{x} + \varepsilon \quad (A4.7)$$

avec:

$$k = 1 + \frac{M_A}{|M_A-M_B|}\frac{1}{W_1} > 1 \quad (A4.8)$$

$$\text{et d'asymptote: } \varepsilon = -\frac{M_A}{|M_A-M_B|}\frac{1}{W_1} < 0$$

Dans le domaine $T_2/T_1 > 1$ et $W_2/W_1 > 1$ correspondant au modèle physique (relation A4.1), on observe que $\Delta\rho^{GP}$ est toujours négatif; par suite il y a coïncidence des signes entre les deux approximations.

Donc, lorsque $M_A < M_B$, il n'y a jamais opposition au sens de notre critère, entre le modèle des gaz parfaits et celui de Boussinesq.

A4.2.3.2. Lorsque $M_A = M_B$:

Alors:

$$\alpha_A = 0 \quad (\text{A4.9})$$

et les expressions de $\Delta\rho^{\text{GP}}$ et $\Delta\rho^{\text{B}}$ sont les suivantes :

$$\left. \begin{aligned} \Delta\rho^{\text{GP}} &= \frac{p M_A}{R T_2} \left(1 - \frac{T_2}{T_1} \right) < 0 \\ \Delta\rho^{\text{B}} &= -\rho_0 \beta (T_2 - T_1) < 0 \end{aligned} \right| \quad (\text{A4.10})$$

On remarquera que la condition $T_2/T_1 > 1$ entraîne automatiquement l'égalité des signes et donc la compatibilité au sens de notre critère, des deux modèles.

A4.2.3.3. Lorsque $M_A > M_B$:

Alors:

$$\alpha_A = -|\alpha_A| \quad (\text{A4.11})$$

Les signes de $\Delta\rho^{\text{GP}}$ et $\Delta\rho^{\text{B}}$ peuvent être négatifs ou positifs suivant les valeurs de W_2/W_1 :

► Pour $\Delta\rho^{\text{GP}}$:

$$\Delta\rho^{\text{GP}} > 0 \text{ si : } \frac{W_2}{W_1} > \left(1 - \frac{M_A}{M_A - M_B} \frac{1}{W_1} \right) \frac{T_1}{T_2} + \frac{M_A}{M_A - M_B} \frac{1}{W_1} \quad (\text{A4.12})$$

$$\Delta\rho^{\text{GP}} < 0 \text{ si : } \frac{W_2}{W_1} < \left(1 - \frac{M_A}{M_A - M_B} \frac{1}{W_1} \right) \frac{T_1}{T_2} + \frac{M_A}{M_A - M_B} \frac{1}{W_1} \quad (\text{A4.13})$$

► Pour $\Delta\rho^{\text{B}}$:

$$\Delta\rho^{\text{B}} > 0 \text{ si : } \frac{W_2}{W_1} > \frac{T_1 M_0 (M_A - M_B)}{T_0 M_A M_B W_1} \cdot \frac{T_2}{T_1} + \left(1 - \frac{T_1 M_0 (M_A - M_B)}{T_0 M_A M_B W_1} \right) \quad (\text{A4.14})$$

$$\Delta\rho^{\text{B}} < 0 \text{ si : } \frac{W_2}{W_1} < \frac{T_1 M_0 (M_A - M_B)}{T_0 M_A M_B W_1} \cdot \frac{T_2}{T_1} + \left(1 - \frac{T_1 M_0 (M_A - M_B)}{T_0 M_A M_B W_1} \right) \quad (\text{A4.15})$$

Les frontières entre les domaines définis par les relations (A4.12-15) peuvent être représentées par deux courbes dans le plan $(x,y) = (T_2/T_1, W_2/W_1)$, d'équations :

$$y = \frac{k}{x} + \varepsilon = f(x) \quad (\text{A4.16})$$

$$y = a x + 1 - a = g(x) \quad (\text{A4.17})$$

avec :

$$\left. \begin{aligned} k &= 1 - \frac{M_A}{M_A - M_B} \frac{1}{W_1} < 0 \\ \varepsilon &= \frac{M_A}{M_A - M_B} \frac{1}{W_1} > 1 \\ a &= \frac{T_1 M_0 (M_A - M_B)}{T_0 M_A M_B W_1} \end{aligned} \right| \quad (\text{A4.18})$$

- (a) Au point $T_2 = T_1$ on a : $f(1) = g(1) = 1 = W_2/W_1$. Il existe une intersection évidente en $T_2 = T_1$.
 (b) Dans le cas où $f'(1) < g'(1)$, il n'y a pas de seconde intersection dans le domaine correspondant au modèle physique; la courbe des gaz parfaits se trouve toujours au-dessous de la courbe de Boussinesq à l'intérieur de ce domaine (fig. A4.2). Dans ce cas :

$$W_1 < 1 \text{ et } W_1 > \frac{M_A}{M_A - M_B} - 1$$

Ces deux conditions déterminent le domaine de variation relative de M_A et M_B :

$$M_A > 2M_B \text{ et } W_1 > \frac{M_A}{M_A - M_B}$$

ce qui implique un mélange binaire de composantes dont les masses sont très différentes et la fraction massique au puits n'est pas aussi petite que l'on veut.

- (c) La deuxième intersection, au point de fonctionnement $\left(\left(\frac{T_2}{T_1} \right)_c, \left(\frac{W_2}{W_1} \right)_c \right)$ dans le domaine correspondant au modèle physique, doit être telle que:

$$f'(1) > g'(1) \quad (\text{A4.19})$$

c'est-à-dire : $-k > a$,
 d'où la condition:

$$\frac{M_A - (M_A - M_B)W_1}{M_A - M_B} > \frac{M_A - M_B}{M_A - (M_A - M_B)W_1} \quad (\text{A4.20})$$

Compte tenu de (A4.1), on se trouve avec les deux conditions sur W_1 : $W_1 < 1$ et

$$W_1 < \frac{M_A}{M_A - M_B} - 1 \quad (\text{A4.21})$$

dérivée de (A4.20), pour vérifier (A4.19).

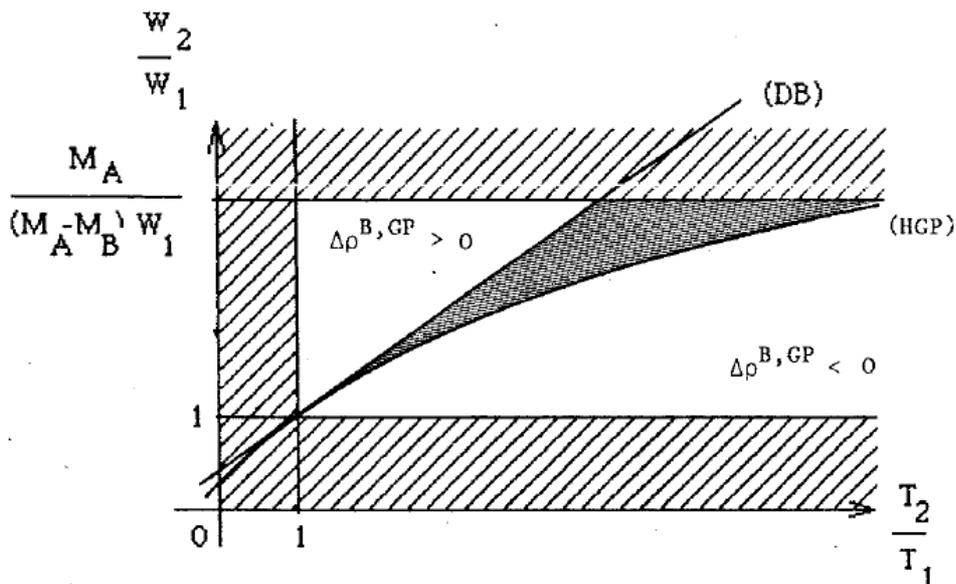


Fig. A4.2. Domaines de compatibilité:
 $M_A > 2M_B$ et $W_1 > M_B/(M_A - M_B)$

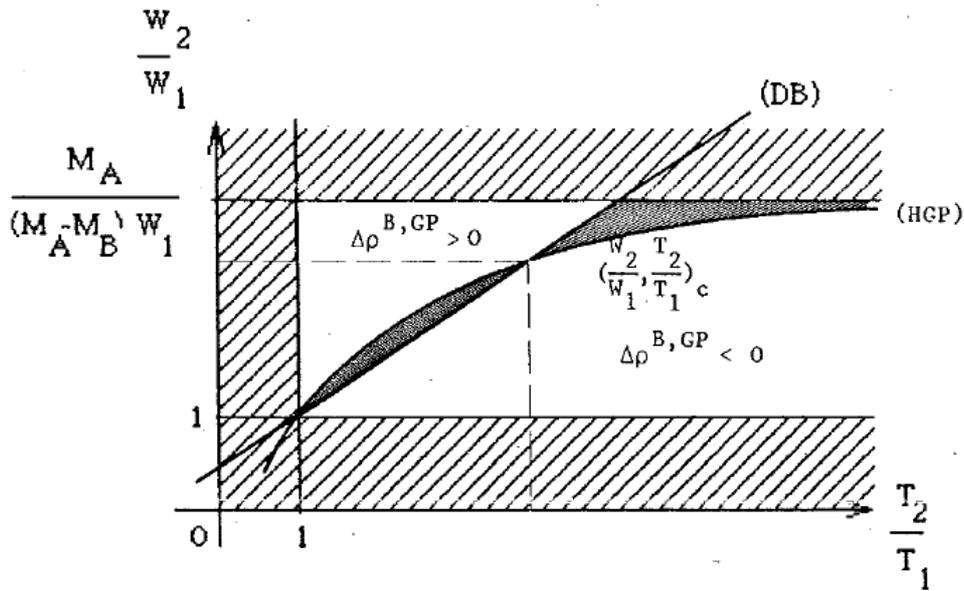


Fig. A4.3. Domaines de compatibilité:
 $M_B < M_A < 2M_B$ quel que soit W_1

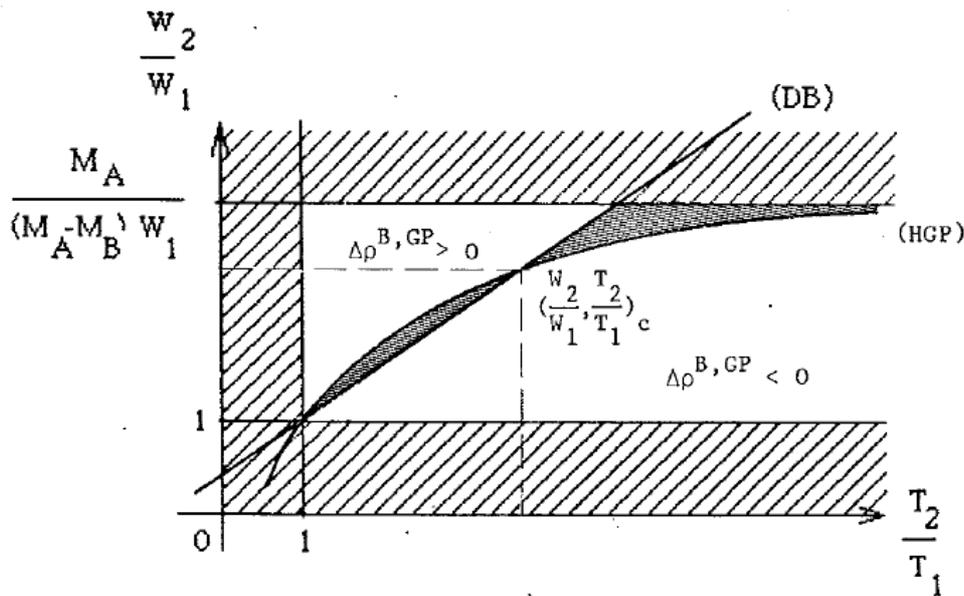


Fig. A4.4. Domaines de compatibilité:
 $M_A > 2M_B$ et $W_1 < M_B / (M_A - M_B)$

Ces conditions sont vérifiées dans les deux cas suivants:

→ $M_B < M_A < 2M_B$ et $W_1 < 1$ quelconque. Dans ce cas, il s'agit d'un mélange binaire dont les espèces sont de masses voisines (fig. A.4.3).

→ $M_A > 2M_B$ et $W_1 < M_B / (M_A - M_B)$. Dans ce cas, les masses molaires sont très différentes (comme pour le cas $f'(1) < g'(1)$), mais la fraction massique des puits est bornée par une valeur supérieure (fig. A4.4).

A4.3. Résumé

Pour classifier les résultats, nous adopterons les notations suivantes utiles pour le cas $M_A > M_B$:

→ La droite correspond aux points de fonctionnement $(T_2/T_1, W_2/W_1)^B$ pour lesquels l'approximation de Boussinesq conduit à $\Delta\rho^B = 0$, est notée "droite de Boussinesq" (DB) et :

$$\left(\frac{W_2}{W_1}\right)^B = \frac{T_1 M_0 (M_A - M_B)}{T_0 M_A M_B W_1} \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^B + \left(1 - \frac{T_1 M_0 (M_A - M_B)}{T_0 M_A M_B W_1}\right) \quad (\text{A4.22})$$

→ L'hyperbole correspondant aux points de fonctionnement $(T_2/T_1, W_2/W_1)^{GP}$ pour lesquels l'approximation des gaz parfaits conduit à $\Delta\rho^{GP} = 0$, est notée "hyperbole de gaz parfaits" (HGP) et:

$$\left(\frac{W_2}{W_1}\right)^{GP} = \left(1 - \frac{M_A}{(M_A - M_B) W_1}\right) \left(\frac{T_1}{T_2}\right)^{GP} + \frac{M_A}{(M_A - M_B) W_1} \quad (\text{A4.23})$$

→ Il existe un point d'intersection de ces deux courbes en :

$$\frac{T_2}{T_1} = 1 \quad \text{et} \quad \frac{W_2}{W_1} = 1$$

→ Il existe un deuxième point d'intersection dans le domaine des applications physiques, $T_2/T_1 > 1$, $W_2/W_1 > 1$ (relation A4.1) pour certaines conditions entre M_A , M_B et W_1 ; le second point d'intersection sera noté $((T_2/T_1)_c, (W_2/W_1)_c)$.

a) **Lorsque $M_A < M_B$** , il n'y a pas de limite de compatibilité pour l'approximation de Boussinesq, relativement à la loi des gaz parfaits :

$$\Delta\rho^{GP} < 0 \quad \text{et} \quad \Delta\rho^B < 0, \quad \text{pour tout } 1 < W_1 < W_2 \quad \text{et} \quad T_1 < T_2$$

b) **Lorsque $M_A > 2M_B$** , avec $\frac{M_A}{M_A - M_B} > 1 > W_2 > W_1 > \frac{M_B}{M_A - M_B} > 0$:

– il y a une borne supérieure (DB) pour le domaine de compatibilité correspondant à $\Delta\rho^{GP} > 0$ et $\Delta\rho^B > 0$, du côté des "petits nombres de Rayleigh thermiques", Ra_T : $\frac{T_2}{T_1} < \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^B$.

– pour les " Ra_T moyens", $\left(\frac{T_2}{T_1}\right)^B < \frac{T_2}{T_1} < \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{GP}$, on a $\Delta\rho^{GP} < 0$ et $\Delta\rho^B > 0$, donc non compatibilité.

– Pour les " Ra_T grands", $\frac{T_2}{T_1} > \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{GP}$ il y a à nouveau compatibilité : $\Delta\rho^{GP} < 0$ et $\Delta\rho^B < 0$.

c) **Lorsque $M_A > 2M_B$** avec : $1 > \frac{M_B}{M_A - M_B} > W_1 > 0$, $\frac{M_A}{M_A - M_B} > 1 > W_2 > W_1 > 0$,

ou **lorsque $M_B < M_A < 2M_B$** avec : $\frac{M_A}{M_A - M_B} > \frac{M_B}{M_A - M_B} > 1 > W_2 > W_1 > 0$:

– Pour $W_2/W_1 > (W_2/W_1)_c$ (nombre de Rayleigh solutal Ra_M grand), il y a une limite de

compatibilité correspondant à $\Delta\rho^{GP} > 0$ et $\Delta\rho^B > 0$: la droite de Boussinesq (DB) constitue cette limite supérieure.

- Pour $1 < W_2/W_1 < (W_2/W_1)_c$ (nombre de Rayleigh solutal Ra_M petit), la limite supérieure du domaine de compatibilité correspondant à $\Delta\rho^{GP} > 0$ et $\Delta\rho^B > 0$ est fournie par l'hyperbole des gaz parfaits (HGP).
- Pour les valeurs élevées de Ra_T (domaine correspondant à $\Delta\rho^{GP} < 0$ et $\Delta\rho^B < 0$) l'hyperbole (HGP) constitue la borne inférieure de compatibilité lorsque $W_2/W_1 > (W_2/W_1)_c$ (" Ra_M grands"), et la droite de Boussinesq (DB), la borne inférieure lorsque $W_2/W_1 < (W_2/W_1)_c$ (" Ra_M petits").
- Dans la zone intermédiaire, il y a non compatibilité: les valeurs de $\Delta\rho^{GP}$ et $\Delta\rho^B$ sont de signes opposés.

A4.4. Conclusion

A4.4.1. La droite de Boussinesq (DB) constitue la limite supérieure pour les "petits Ra_T ":

- lorsque $M_A > 2M_B$, avec $1 > W_2 > W_1 > \frac{M_B}{M_A - M_B} > 0$
- lorsque $M_A > 2M_B$, avec $1 > \frac{M_B}{M_A - M_B} > W_1 > 0$ et $1 > W_2 > W_1$ pour $W_2/W_1 > (W_2/W_1)_c$
- lorsque $M_B < M_A < 2M_B$ avec $1 > W_2 > W_1 > 0$ pour $W_2/W_1 > (W_2/W_1)_c$

A4.4.2. Lorsque $W_2/W_1 < (W_2/W_1)_c$ la limite supérieure correspond à l'hyperbole (HGP).

A4.4.3. Lorsque $M_A < M_B$, il y a compatibilité entre les deux approximations.

A4.4.4. Pour les "grands Ra_T " ($T_2/T_1 \gg 1$), les limites sont décrites en A4.3. Néanmoins on peut admettre que pour le type d'application considéré T_2 n'est pas "trop" différent de T_1 et que cette gamme de Ra_T n'est pas considérée.

Dans les applications rapportées dans le présent mémoire, on se limitera aux configurations physiques décrites dans le paragraphe A4.4.1, c'est-à-dire lorsque la droite de Boussinesq (DB) définit la borne supérieure du domaine. Elle fournit des critères qui s'expriment simplement en fonction des paramètres caractéristiques sans dimension Ra_T , Ra_M et Le .

Références

- Abernathey, J.R., Rosenberger, F.
Soret diffusion and convection in stability in a closed vertical cylinder
Phys. Fluids, 24, 377-381, 1981
- Bejan, A., Al-Homoud, A.A., Imberger, J.
Experimental study of high Rayleigh number convection in a horizontal cavity with different end temperatures
J. Fluid Mechanics, 109, 283-299, 1981
- Bejan, A., Tien, C.L.
Laminar natural convection heat transfer in a horizontal cavity with different end temperatures
Trans. of ASME, J. Heat Transfer, 100, 641-647, 1978
- Bejan, A., Tien, C.L.
Fully developed natural counter flow in a long horizontal pipe with different end temperatures
Int. J. Heat Mass Transfer, 21, 701-708, 1978
- Beysens, D.
Critical point phenomena in fluids
ESA SP-191, June 1983
- Birikh, R.V.
J. Appl. Math. And Tech. Phys., 30, 432, 1966
- Boccaro, N.
Symétries brisées
Hermann, Paris, 1976
- Bondet de la Bernardie, B.
Th; Univ. Aix-Marseille II, 1980
- Bontoux, P., Bondet de la Bernardie, B., Roux, B.
GAMM Workshop, Univ. LLN, Belgique 1980/Num. Meth. For Coupled problems, Pineridge 1981
- Camel, D., Favier, J.J.
Analyse théorique des régimes de transport de soluté lors de la croissance cristalline en bain fondu dans une configuration idéale de type Czochralski
J. Crystal Growth, 1982
- Carruthers, J.R.
Thermal convection instabilities relevant to crystal growth from liquids
Preparation and properties of solid state materials, vol.3, Wilcox and Lefever, 1977
- Cooley, J.W., Tukey, J.W.
An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series
Math. of Comp., vol.19, 297-301, 1965
- Cormack, D.E., Leal, L.G., Imberger, J.
Natural convection in shallow cavity with differentially heated end walls; Part 1: Asymptotic theory
J. Fluid Mechanics, 65, Part 2, 209-229, 1974

- Derby,B.
Implications of the lack of wetting at the monotectic growth front
ESA-SP 191, june 1983
- Elder,J.W.
Laminar free convection in a vertical slot
J. Fluid Mechanics, vol.23, 77-98, 1965
- Elie,F., Chikhaoui,A., Randriamampianina,A., Bontoux,P., Roux,B.
Spectral approximation for Boussinesq double diffusion
Proc. Fifth GAMM-Conference on Num. Meth. In Fluid Mech., Roma, 1983
- Ettouney,H.M., Brown,R.A.
Finite element methods for steady solidification problems
J. Comp. Physics 49, 118-150, 1983
- Favier,J.J., Camel,D.
Ordre of magnitude analysis of solute macrosegregation in crystal growth from the melt
ESA SP-191, june 1983
- Fredriksson,H.
The effect of the natural convection on the solidification of the metallic alloys
ESA SP-191, june 1983
- Gill,A.D.
The boundary layer regime for convection in a rectangular cavity
J. Fluid Mech., vol.26, part 3, 515-536, 1966
- Glicksman,M.E., Fang,Q.T., Coriell,S.R., Boisvert,R.F.
Convection effects at solid-liquid interfaces. Influence of gravity
ESA SP-191, june 1983
- Gottlieb,D., Orszag,S.A.
Numerical analysis of spectral methods
CBMS-NSF, Conf. S. Applied Math., 1977
- Greenwell,D.W., Markham,B.L., Rosenberger,F.
Numerical modelling of diffusive physical vapor transport in cylindrical ampoules
J. Crystal Growth, 51, 413-425, 1981
- Haidvogel, Zang
J. Comp. Physics, 30, 1979
- Hart,J.E.
Low Prandtl number convection between differentially heated end walls
Int. J. Heat Mass Transfer 26,1069-1074, 1983
- Henry,D., Roux,B.
Stationary and oscillatory instabilities for mixture subjected to Soret effect in a vertical cylinder with axial temperature gradient
ESA SP-191, june 1983

Imberger,J.

Natural convection in shallow cavity with differentially heated end walls, Part 3: Experimental results

J. Fluid Mechanics 65, Part 2, 247-260, 1974

Jhaveri,B.S., Markham,B.L., Rosenberger, F.

On singular boundary conditions in mass transfer across rectangular enclosures

Chem. Eng. Commun., vol. 13, 65-75, 1981

Jhaveri,B.S., Rosenberger,F.

Expansive convection in vapor transport across horizontal rectangular enclosures

J. Crystal Growth 57, 57-64, 1982

Kimura,S., Bejan,A.

Numerical study of natural circulation in a horizontal duct with different end temperatures

Wärm-und Stoffübertragung, 14, 269-280, 1980

Klosse,K., Ullersma,P.

Convection in a chemical vapor transport process

J. Crystal Growth 18, 167-174, 1973

Kumar,A., Ostrach,S.

An experimental investigation of natural convection flows in rectangular enclosures os aspect ratio less than unity

Case Western Reserve Univ., Dept. Of Mechanical and Aerospace Engineering, FTAS/TR-77-132, 1977

Labrosse, Abboudi, Deville, Haldenwang

Euromech 159, Nice, 1982

Launay,J.C.

Etude de l'influence de la convection sur la vitesse de transport par réaction chimique dans une ampoule placée dans 3 zones de températures

J. Crystal Growth 60, 185-190, 1982

Launay,J.C., Roux,B.

Chemical vapor deposition: numerical models applied to transport of GeI₄ and GeI₂

J. Crystal Growth 58, n°2, 354-364, 1982

Lee,I.E., Sernas,V.

Numerical study of heat transfer in rectangular air enclosures os aspect ratio less than one

ASME Paper, 80-WA/HT-43,1-13, 1980

Lhomme,B., Morgenstein,J., Quandalle,P.

Description de nouveaux programmes de transformation de Fourier rapides à une ou à deux dimensions

Agence Spatiale Européenne, 1981

Leonardi,E.

A numerical study of the effects of fluid properties on natural convection

Ph.D dissertation, Univ. Of New South Wales, Australia, 1984

- Manouélian, D.
Mémoire CNAM, Aix-en-Provence, 1982
- Nikitin, S.A., Polezhaev, V.I., Fedyushkin, A.I.
Mathematical simulation of impurity distribution in crystals prepared under microgravity conditions
J. Crystal Growth 52, 471-477, 1981
- Olson, J.M., Rosenberger, F.
Convective instabilities in a closed vertical cylinder heated from below, Part 1: Monocomponent gases
J. Fluid Mechanics 92, 609-629, 1979
- Omal, J. Robert, M., Cadoret, R.
Study of the crystalline growth of $HgI_2(\alpha)$ using the vapour phase in a sealed tube
Mat. Res., Bull, Vol.16, 1261-1270, Pergamon Press, 1981
- Ostrach, S., Loka, R.R., Kumar, A.
Natural convection in a low aspect ratio rectangular enclosures
Natural convection in enclosures HTD 8 1-10, Catton and Torrance Ed. ASME, New-York, 1980
- Ouazzani, J., Peyret, R.
A pseudo spectral solution of binary gas mixture flows
Proc. Fifth GAMM-Conf. On Num. Meth. In Fluid Mech., Roma, 1983
- Pimputkar, S.M., Ostrach, S.
Convection effects in crystal growth from melt
J. Crystal Growth 55, 614-646, 1981
- Platten, J.K., Chavepeyer, G.
Instabilités et flux de chaleur dans le problème de Bénard à deux constituants aux coefficients de Soret positifs
Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 19, 27-32, 1975
- Randriamampianina, A.
Thèse Univ. Aix-Marseille II, 1984 (à paraître)
- Rosenberger, F.
Fundamentals of crystal growth; I: Macroscopic equilibrium and transport concepts
Springer-Verlag, 1979
- Roux, B., Grondin, J.C., Bontoux, P., De Vahl Davis, G.
Reverse transition from multicellular motion in vertical fluid layer
Physico-Chemical Hydrodynamics, 3, vol.3F, European Physical Society Ed., 1980
- Sanfeld, A., Steinchen, A., Billia, B., Capella, L.
Convection-Marangoni effects in solidification microgravity
ESA SP-191, june 1983
- Schiroky, G.H., Rosenberger, F.
Free convection of gases in a horizontal cylinder with differentially heated end walls
Int. J. Heat Mass Transfer 27, 587-598, 1984

Schiroky,G.H.

Free convection of gases in a horizontal cylinder with differentially heated end walls. A study by laser-Doppler anemometry

Ph.D. Dissertation, Univ. Of Utah, Salt Lake City, 1982

Shih,T.S.

Computer-extended series: natural convection in along horizontal pipe with different end temperatures

Int. J. Heat Mass Transfer 24, 1295-1303, 1981

Shiralkar,G.S., Tien,C.L.

A numerical study of laminar natural convection in shallow cavities

Trans. of ASME, J. Heat Transfer 103, 226-231, 1981

Shiralkar,G.S., Gadgil,A., Tien,C.L.

High Rayleigh number convection in shallow enclosures with different end temperatures

Int. J. Heat Mass Transfer 24, 1621-1629, 1981

Simpkins,P.G., Dudderar,T.D.

Convection in rectangular cavities with differentially heated end walls

J. Fluid Mech., 110, 433-456, 1981

Singleton

IEEE Trans-on Audio and Electroacoustics, 17, 1969

Smutek,C.

Etude numérique tridimensionnelle de la convection naturelle dans un cylindre

Thèse Univ. Nice, 1984

Smutek,C., Bontoux, P., Roux,B., Schiroky,G.H., Hurford,A.C., Rosenberger,F., De Vahl Davis,G.

Three dimensional free convection in horizontal cylinders. Numerical solutions, experimental results and analytical approximations

Num. Heat Transfer (submitted)

Solan,A., Ostrach,S.

Convection effects in crystal growth by closed tube chemical vapor transport

Preparation and properties of solid state materials, vol.4, Marcel Dekker, Inc., New-York, 1979

Tichy,J., Gadgil,A.

High Rayleigh number laminar convection in a low aspect ratio enclosures with adiabatic horizontal walls and differentially heated vertical walls

Trans. of ASME, J. Heat Transfer, 104, 103-110, 1982

Temperton,C.

Fast Fourier Transforms and Poisson Solvers on CRAY-1 in "Supercomputers"

Infotech State of the Art Report, Infotech. Int. Ltd., Maidenhead U.K., 1979

Thomas,R.W., De Vahl Davis,G.

Natural convection in annular and rectangular cavities. A numerical study

4ème Congrès Int. Sur le Transfert de Chaleur, Versailles, NC 2-4, 1970

Vest,C.M., Arpacı,V.S.
Stability of natural convection in a vertical slot
J. Fluid Mech., vol.36, part 1, 1-15, 1969

Wiedemeier,H., Irene,E.A., Chaudhuri,A.K.
J. Crystal Growth 13/14, 393, 1972

Wiedemeier,H., Irene,E.A.
Z. Anorg. Allg. Chem., 400, 59, 1973

Wiedemeier,H., Klaessig,C.F., Irene,E.A.
Proc. 3 Space processing Symp. Skylab Results, 1: 235, NASA M-74-5, 1974

Wiedemeier,H., Klaessig,C.F., Irene,E.A., Wey,S.J.
J. Crystal Growth, 31, 36, 1975

Wiedmeier,H., Sigai,A.G.
J. Crystal Growth, 6, 67, 1969

Wirtz,R.A., Tseng,W.F.
Natural convection across tilted rectangular enclosures of small aspect ratio
Natural Convection in Enclosures, HTD-8, Catton and Torrance Ed., ASME, New-York, 47-54, 1980

Zappoli,B., Elie,F.
On boundary conditions for hydrodynamic equations in reduced gravity
Soumis à l'AIAA Journal