

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



# Convection naturelle du mélange air-vapeur dans une cavité carrée 2D en présence de la condensation

Présentation Club Cast3M 2017

Nan JIANG

Encadrant : Etienne STUDER

CEA/DANS/DM2S/STMF/LATF

## Introduction

## Modèle physique et analyse

- Équations de contrôle

- Modèle bas-Mach

- Modèle de Boussinesq

## Calcul numérique

- Convections thermiques

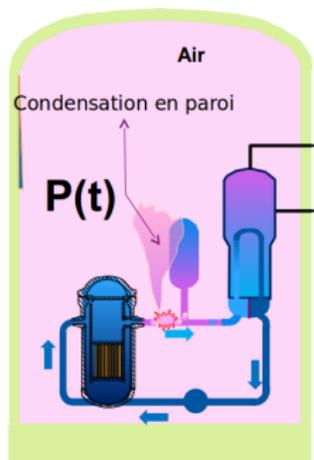
- Convections thermo-solutales

- Application : mélange air-vapor

## Conclusions and perspectives

# Section 1

## Introduction



**FIGURE** – Intégrité du Bâtiment réacteur en situation accidentelle

Pression dans l'enceinte  $P(t)$  dépend :

- ▶ de la source de vapeur
- ▶ **du transport de la vapeur**
- ▶ **de la condensation en paroi**

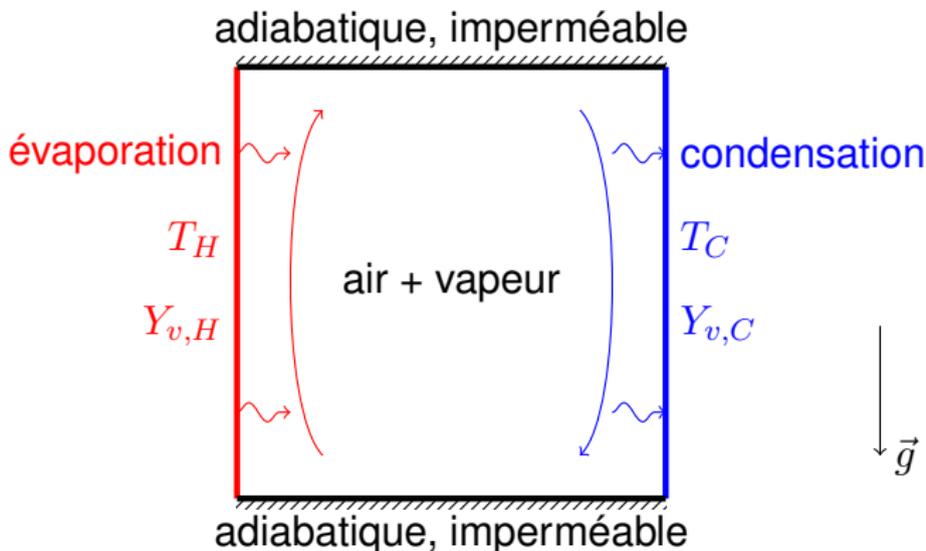
Forte disparité d'échelle :

- ▶ Écoulements dans le BR :  $40 \times 60$  m
- ▶ Couches limites : qqs cm
- ▶ Film liquide : 0,1 à 0,2 mm

**Challenge**

les **outils de simulation CFD** utilisés pour la conception et les analyses de sûreté

## Cavité carrée 2D



- ▶ Film liquide négligé
- ▶ Air : gaz parfait,  $\gamma = 1,4$
- ▶ Vapeur : gaz parfait,  $\gamma = 1,29$
- ▶ effet de couplage : **inter-diffusion**

Qu'est-ce qui sont déjà faits en problème cavité carrée 2D ?

- ▶ Cavité **différentiellement chauffée** 2D **d'une gaz** avec le **modèle de Boussinesq** (de Vahl Davis) et avec le **modèle bas-Mach** (Vierendeels)
- ▶ Solution **thermosolutale** 2D en utilisant le **modèle de Boussinesq double-diffusif** (Weaver)
- ▶ Solution **thermosolutale** 2D avec le **modèle bas-Mach double-diffusif** (Sun)

## Modèle (physique) double-diffusif

- ▶ A l'origine de la simulation d'une **solution diluée**
- ▶ Hypothèse : **petit gradient de concentration**  $\Rightarrow c_p$  constant
- ▶ Conservation des flux de chaleur **non garantie** sous un **grand gradient de concentration**

## Section 2

# Modèle physique et analyse

# Équations dimensionnelles en forme conservative

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_v) + \nabla \cdot (\rho Y_v \vec{u}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_v)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho \vec{g}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_t) + \nabla \cdot (\rho h_t \vec{u}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (\bar{\tau} \vec{u}) + \rho \vec{g} \cdot \vec{u}$$

$$+ \nabla \cdot \left( \sum_{i \in \{a,v\}} \rho D_i h_i \nabla Y_i \right)$$

- ▶ Loi de Fick
- ▶ Loi de Fourier
- ▶ Interdiffusion

# Équations dimensionnelles

## en forme conservative

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_v) + \nabla \cdot (\rho Y_v \vec{u}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_v)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho \vec{g}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_t) + \nabla \cdot (\rho h_t \vec{u}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (\bar{\tau} \vec{u}) + \rho \vec{g} \cdot \vec{u}$$

$$+ \nabla \cdot \left( \sum_{i \in \{a,v\}} \rho D_i h_i \nabla Y_i \right)$$

- ▶ Loi de Fick
- ▶ Loi de Fourier
- ▶ Interdiffusion

# Équations dimensionnelles en forme conservative

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_v) + \nabla \cdot (\rho Y_v \vec{u}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_v)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho \vec{g}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_t) + \nabla \cdot (\rho h_t \vec{u}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (\bar{\tau} \vec{u}) + \rho \vec{g} \cdot \vec{u} + \nabla \cdot \left( \sum_{i \in \{a,v\}} \rho D_i h_i \nabla Y_i \right)$$

- ▶ Loi de Fick
- ▶ Loi de Fourier
- ▶ Interdiffusion

## Nombres adimensionnels

$$\theta = \frac{T - T_0}{T_H - T_C},$$

$$\xi = \frac{Y_v - Y_{v,0}}{Y_{v,H} - Y_{v,C}}$$

$s^* = s/s_0$  ( $\cdot^*$  omit dans la suite ...)

Nombre de Reynolds

$$\text{Re} = (U_{\text{ref}} L_{\text{ref}}) / \nu_0$$

Nombre de Prandtl

$$\text{Pr} = \nu_0 / \alpha_0$$

Nombre de Schmidt

$$\text{Sc} = \nu_0 / D_0$$

Facteurs non-Boussinesq

de la température

$$\varepsilon_T = (T_H - T_C) / T_0$$

de la masse

$$\varepsilon_m = (r_H - r_C) / r_0$$

Nombre de Rayleigh

$$\text{Ra} = [g(\varepsilon_T + \varepsilon_m) L_{\text{ref}}^3] / (\nu_0 \alpha_0)$$

Nombre de Froude

$$\text{Fr} = U_{\text{ref}} / \sqrt{g_0 L_{\text{ref}}}$$

Nombre de Mach

$$\text{Ma} = U_{\text{ref}} / c_0$$

$$U_{\text{ref}} = \sqrt{(\varepsilon_T + \varepsilon_m) g L_{\text{ref}}} \quad \text{et} \quad c_0 = \sqrt{\gamma_0 \frac{p_0}{\rho_0}}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

$$\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \xi = \frac{1}{Sc \cdot Re} \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi)$$

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = - \frac{1}{\gamma_0 Ma^2} \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \bar{\tau} + \frac{1}{Fr} \rho \vec{g}^*$$

$$\varepsilon_T \rho c_p \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \theta \right) = \frac{\gamma_0 - 1}{\gamma_0} \left( \frac{\partial p}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla p \right)$$

Termes liés à la pression

Terme en facteur  $Ma^2$

Inter-diffusion effective

$$+ \varepsilon_T \frac{1}{Re \cdot Pr} \nabla \cdot (\lambda \nabla \theta)$$

$$+ (\gamma_0 - 1) \frac{Ma^2}{Re} \bar{\tau} : \nabla \vec{u}$$

$$+ \frac{\Delta c_p}{c_{p,0}} \frac{1}{Re \cdot Sc} \rho D \varepsilon_T \nabla \theta \cdot \nabla \xi$$

## Hypothèse du bas nombre de Mach

- ▶ Nombre de Mach :  $Ma = U_{\text{ref}}/c_0$
- ▶ Convection naturelle : vitesse environ 1 m/s
- ▶ Vitesse du son :  $c_0 \simeq 340$  m/s
- ▶ Résultat :  $Ma^2 \ll 1$

Par analyse asymptotique, on sépare la pression adimensionnelle en trois parties :

$$p = P(t) + \left( p_g(t, \vec{x}) + p_d(t, \vec{x}) \right) Ma^2,$$

where

$P(t)$  la pression thermodynamique adimensionnelle

$p_g(t, \vec{x})$  la pression hydrostatique  $p_g = \frac{\gamma_0}{Fr} \vec{g}^* \cdot \vec{x}$

$p_d(t, \vec{x})$  la pression d'entraînement

## Modèle bas-Mach (numérique)

$$-\nabla \cdot \vec{u} = \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho \right)$$

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = - \frac{1}{\gamma_0} \nabla p_d + \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \vec{\tau} + \frac{1}{\text{Fr}} (\rho - 1) \vec{g}^*$$

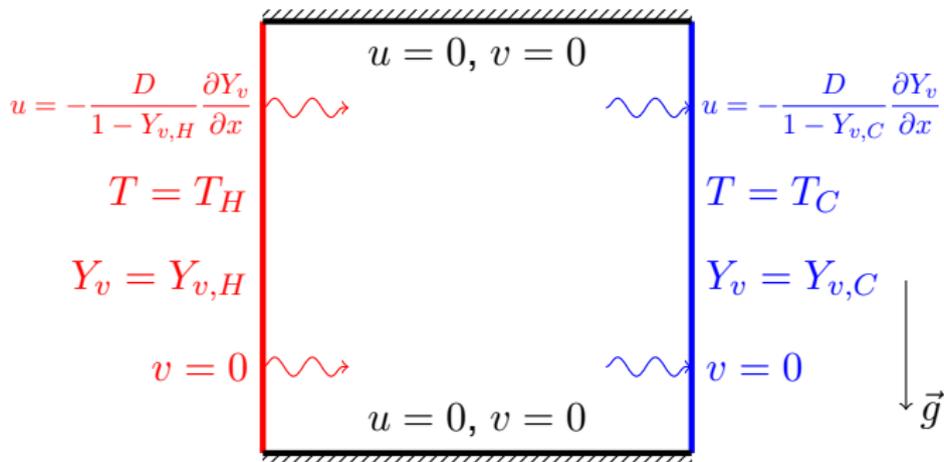
$$\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \xi = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi)$$

$$\rho \varepsilon_T c_p \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \theta \right) = \frac{\gamma_0 - 1}{\gamma_0} \frac{dP}{dt} + \varepsilon_T \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla \cdot (\lambda \nabla \theta) + \frac{\Delta c_p}{c_{p,0}} \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \varepsilon_T \nabla \theta \cdot \nabla \xi$$

et puisque la masse de l'air (incondensable) conserve,

$$P = \int_{\Omega} \frac{(1 - Y_{v,\text{ini}})}{(1 + \varepsilon_T \theta_{\text{ini}})(1 + \varepsilon_m \xi_{\text{ini}})} dV / \int_{\Omega} \left( \frac{1 - Y_v}{rT} \right) dV$$

## Conditions aux bords



### Vitesse de Stefan aux bords

- ▶ Pas de flux de l'air
- ▶ Propriétés constantes du gaz ( $T$  et  $Y_v$ )

$$\rho u Y_a - \rho D \frac{\partial Y_a}{\partial x} = 0 \quad \Rightarrow \quad u = -\frac{D}{1-Y_v} \frac{\partial Y_v}{\partial x}$$

- ▶ Gradients petits :  $\varepsilon_T \simeq 0$  et  $\varepsilon_m \simeq 0$
- ▶ Variation de la pression thermodynamique négligeable
- ▶ Variations de  $\rho$  et de  $c_p$  négligeables
- ▶ Inter-diffusion effective négligeable

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p_d + \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \bar{\tau} + (\rho - 1) \vec{g}^*$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \xi = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 \xi$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \theta = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 \theta$$

- ▶ Anti-symétrie : flottabilité  $(\rho - 1) \vec{g}^*$
- ▶ Analogie des transferts de chaleur et de masse

## Nombres de Nusselt et de Sherwood

$$\text{Nu} = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\Delta c_p}{c_{p,0}} \frac{\rho(1 + \varepsilon_T \theta)}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \rho c_p (1 + \varepsilon_T \theta) u$$

- ▶ Diffusion de Fourier  $\text{Nu}_d$
- ▶ Inter-diffusion  $\text{Nu}_i$
- ▶ Convection (vitesse de Stefan)  $\text{Nu}_c$

$$\text{Sh} = \frac{\rho}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \rho \xi u$$

- ▶ Diffusion de Fick  $\text{Sh}_d$
- ▶ Convection (vitesse de Stefan)  $\text{Sh}_c$

## Nombres de Nusselt et de Sherwood

$$\text{Nu} = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\Delta c_p \rho (1 + \varepsilon_T \theta)}{c_{p,0} \text{Re} \cdot \text{Sc}} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \rho c_p (1 + \varepsilon_T \theta) u$$

- ▶ Diffusion de Fourier  $\text{Nu}_d$
- ▶ Inter-diffusion  $\text{Nu}_i$
- ▶ Convection (vitesse de Stefan)  $\text{Nu}_c$

$$\text{Sh} = \frac{\rho}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \rho \xi u$$

- ▶ Diffusion de Fick  $\text{Sh}_d$
- ▶ Convection (vitesse de Stefan)  $\text{Sh}_c$

## Nombres de Nusselt et de Sherwood

$$\text{Nu} = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\Delta c_p}{c_{p,0}} \frac{\rho(1 + \varepsilon_T \theta)}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \rho c_p (1 + \varepsilon_T \theta) u$$

- ▶ Diffusion de Fourier  $\text{Nu}_d$
- ▶ Inter-diffusion  $\text{Nu}_i$
- ▶ Convection (vitesse de Stefan)  $\text{Nu}_c$

$$\text{Sh} = \frac{\rho}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \rho \xi u$$

- ▶ Diffusion de Fick  $\text{Sh}_d$
- ▶ Convection (vitesse de Stefan)  $\text{Sh}_c$

## Nombres de Nusselt et de Sherwood

$$\text{Nu} = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\Delta c_p}{c_{p,0}} \frac{\rho(1 + \varepsilon_T \theta)}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \rho c_p (1 + \varepsilon_T \theta) u$$

- ▶ Diffusion de Fourier  $\text{Nu}_d$
- ▶ Inter-diffusion  $\text{Nu}_i$
- ▶ Convection (vitesse de Stefan)  $\text{Nu}_c$

$$\text{Sh} = \frac{\rho}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \rho \xi u$$

- ▶ Diffusion de Fick  $\text{Sh}_d$
- ▶ Convection (vitesse de Stefan)  $\text{Sh}_c$

## Nombres de Nusselt et de Sherwood

$$\text{Nu} = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\Delta c_p}{c_{p,0}} \frac{\rho(1 + \varepsilon_T \theta)}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \rho c_p (1 + \varepsilon_T \theta) u$$

- ▶ Diffusion de Fourier  $\text{Nu}_d$
- ▶ Inter-diffusion  $\text{Nu}_i$
- ▶ Convection (vitesse de Stefan)  $\text{Nu}_c$

$$\text{Sh} = \frac{\rho}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \rho \xi u$$

- ▶ Diffusion de Fick  $\text{Sh}_d$
- ▶ Convection (vitesse de Stefan)  $\text{Sh}_c$

## Section 3

# Calcul numérique

- ▶ Plateforme : Cast3M, outil : NLIN
- ▶ Méthode des éléments finis

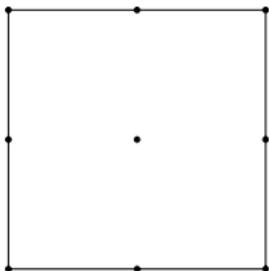


FIGURE – QUAF pour  $u, v, \theta, \xi$



FIGURE – LINM pour  $p_d$

- ▶ Termes non-linéaires : résolus par itération interne
- ▶ Solutions stationnaires : obtenues par comportement asymptotique des calculs transitoires

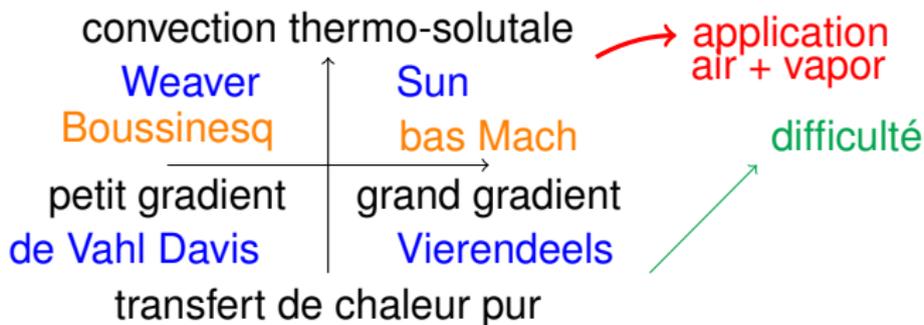


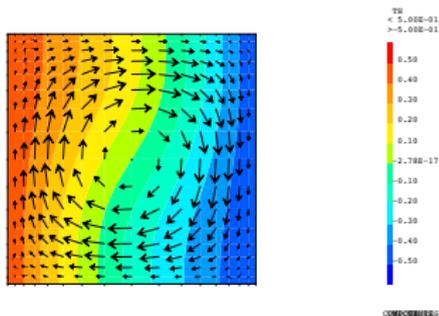
FIGURE – Modèle de validations **sans** inter-diffusion

## Critères de validation

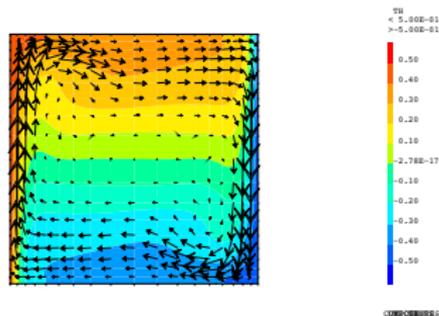
- ▶ **Cohérence** avec les références
- ▶ **Conservation** de la masse et de la chaleur (les flux  $\text{total}_{\text{gauche}} = \text{total}_{\text{droite}}$  en stationnaire)

# Approximation de Boussinesq

## Résultat cavité 2D



**FIGURE** – Distribution de  $\theta$ ,  
 $Ra = 10^3$



**FIGURE** – Distribution de  $\theta$ ,  
 $Ra = 10^6$

- ▶  $Ra = 10^3$  : diffusion dominante,  $Ra = 10^6$  : convection dominante
- ▶ Épaisseurs des couches limites thermiques
- ▶ Anti-symétrie des champs de température

## Nu pour les différents Ra

	Nu
$10 \times 10$	4,5362
$16 \times 16$	4,5265
$24 \times 24$	4,5235
$40 \times 40$	4,5220
$64 \times 64$	4,5217
$102 \times 102$	4,5217

TABLE – Vérification de sensibilité maillage :  $Ra = 10^5$

	Nu	$Nu_{max}$	$Nu_{min}$
$Ra = 10^3$ de Vahl Davis $16 \times 16$	1,118 1,118	1,505 1,506	0,692 0,691
$Ra = 10^4$ de Vahl Davis $40 \times 40$	2,243 2,245	3,528 3,531	0,586 0,585
$Ra = 10^5$ de Vahl Davis $102 \times 102$	4,519 4,522	7,717 7,720	0,729 0,728
$Ra = 10^6$ de Vahl Davis $166 \times 166$	8,800 8,825	17,925 17,536	0,989 0,980

TABLE – Nombres de Nusselt comparés avec les résultats de Vahl Davis

- ▶ Modèle **non sensitif** au maillage
- ▶ Modèle **validé** en cas de la convection thermique Boussinesq 2D

# Approximation bas-Mach

## Résultat cavité 2D

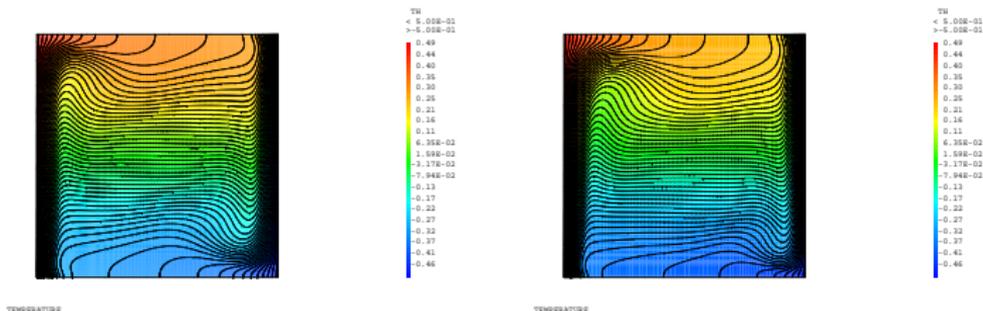
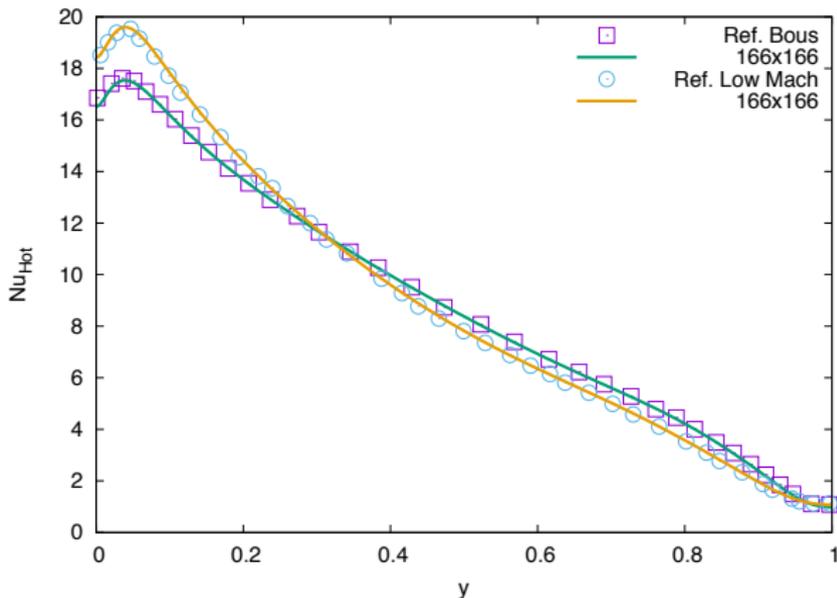


FIGURE –  $\theta$  en  $Ra = 10^6$  : gauche -  $\epsilon_T = 3.36 \times 10^{-6}$ , droite -  $\epsilon_T = 1, 2$

- Grand gradient : **non antisymétrique**

	Vierendeels	Résultat présent
Type de maillage	2048×2048	100×100
$\overline{Nu}(h)$	8,8598	8,8602
$\overline{Nu}(c)$	8,8598	8,8609
$P/P_0$	0,85634	0,85634

## Comparaison de la courbe Nu



- ▶ petit gradient : **validé** avec de Vahl Davis
- ▶ grand gradient : **validé** avec Vierendeels

Weaver Modèle de Boussinesq, pas de terme inter-diffusion :  $\varepsilon_T = 0,125$  et  $\varepsilon_m = -0,273$

Ra	Sc	Pr	$M_a$	$M_v$	$\gamma_a$	$\gamma_v$
$10^5$	1,0	1,0	20 g/mol	100 g/mol	1,4	1,4
$Y_{v,C}$	$Y_{v,H}$	$T_C$	$T_H$	$\xi_{ini}$	$\theta_{ini}$	
0,0	0,3	10 °C	47,7 °C	0,0	0,0	

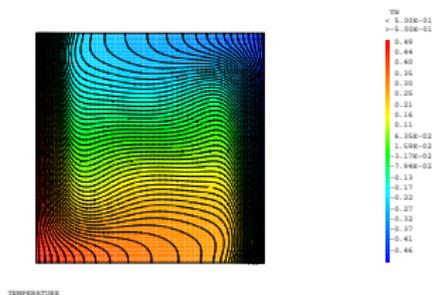


FIGURE – Champ  $\theta$

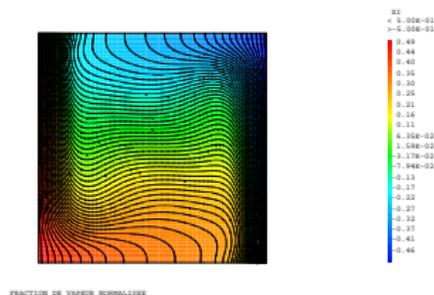


FIGURE – Champ  $\xi$

## Validation : Boussinesq

		Weaver	Double-diffusif	Avec interdiff.
gauche	$\overline{Nu}_d$	3,97	3,91	4,46
	$\overline{Nu}_c$	14,45	12,45	12,40
	$\overline{Nu}_i$	—	—	-9,12
	$\overline{Nu}$	18,42	16,36	7,74
	$\overline{Sh}_d$	3,97	3,95	3,93
droite	$\overline{Nu}_d$	5,69	5,57	4,83
	$\overline{Nu}_c$	12,81	14,34	14,28
	$\overline{Nu}_i$	—	—	-11,45
	$\overline{Nu}$	18,51	19,90	7,66
	$\overline{Sh}_d$	5,69	5,61	5,59

- ▶  $\Delta$  Erreurs dans les flux de chaleur de Weaver
- ▶ Double-diffusif :  $\overline{Nu}$  non conservatif
- ▶ Influence de l'inter-diffusion sur flux diffusif (+12% / -13%)
- ▶ Flux d'inter-diffusion négatif (car  $M_v > M_a$ ) important
- ▶ Conservation des flux de chaleur nécessairement avec inter-diffusion

## Validation : Boussinesq

		Weaver	Double-diffusif	Avec interdiff.
gauche	$\overline{Nu}_d$	3,97	3,91	4,46
	$\overline{Nu}_c$	14,45	12,45	12,40
	$\overline{Nu}_i$	—	—	-9,12
	$\overline{Nu}$	18,42	16,36	7,74
	$\overline{Sh}_d$	3,97	3,95	3,93
droite	$\overline{Nu}_d$	5,69	5,57	4,83
	$\overline{Nu}_c$	12,81	14,34	14,28
	$\overline{Nu}_i$	—	—	-11,45
	$\overline{Nu}$	18,51	19,90	7,66
	$\overline{Sh}_d$	5,69	5,61	5,59

- ▶  $\Delta$  Erreurs dans les flux de chaleur de Weaver
- ▶ Double-diffusif :  $\overline{Nu}$  non conservatif
- ▶ Influence de l'inter-diffusion sur flux diffusif (+12% / -13%)
- ▶ Flux d'inter-diffusion négatif (car  $M_v > M_a$ ) important
- ▶ Conservation des flux de chaleur nécessairement avec inter-diffusion

## Validation : Boussinesq

		Weaver	Double-diffusif	Avec interdiff.
gauche	$\overline{Nu}_d$	3,97	3,91	$\Delta$ 4,46
	$\overline{Nu}_c$	14,45	12,45	12,40
	$\overline{Nu}_i$	—	—	-9,12
	$\overline{Nu}$	18,42	16,36	7,74
	$\overline{Sh}_d$	3,97	3,95	3,93
droite	$\overline{Nu}_d$	5,69	5,57	$\Delta$ 4,83
	$\overline{Nu}_c$	12,81	14,34	14,28
	$\overline{Nu}_i$	—	—	-11,45
	$\overline{Nu}$	18,51	19,90	7,66
	$\overline{Sh}_d$	5,69	5,61	5,59

- ▶  $\Delta$  Erreurs dans les flux de chaleur de Weaver
- ▶ Double-diffusif :  $\overline{Nu}$  non conservatif
- ▶ Influence de l'inter-diffusion sur flux diffusif (+12% / -13%)
- ▶ Flux d'inter-diffusion négatif (car  $M_v > M_a$ ) important
- ▶ Conservation des flux de chaleur nécessairement avec inter-diffusion

## Validation : Boussinesq

		Weaver	Double-diffusif	Avec interdiff.
gauche	$\overline{Nu}_d$	3,97	3,91	4,46
	$\overline{Nu}_c$	14,45	12,45	12,40
	$\overline{Nu}_i$	—	—	$\Delta$ -9,12
	$\overline{Nu}$	18,42	16,36	7,74
	$\overline{Sh}_d$	3,97	3,95	3,93
droite	$\overline{Nu}_d$	5,69	5,57	4,83
	$\overline{Nu}_c$	12,81	14,34	14,28
	$\overline{Nu}_i$	—	—	$\Delta$ -11,45
	$\overline{Nu}$	18,51	19,90	7,66
	$\overline{Sh}_d$	5,69	5,61	5,59

- ▶  $\Delta$  Erreurs dans les flux de chaleur de Weaver
- ▶ Double-diffusif :  $\overline{Nu}$  non conservatif
- ▶ Influence de l'inter-diffusion sur flux diffusif (+12% / -13%)
- ▶ Flux d'inter-diffusion négatif (car  $M_v > M_a$ ) important
- ▶ Conservation des flux de chaleur nécessairement avec inter-diffusion

## Validation : Boussinesq

	Weaver	Double-diffusif	Avec interdiff.	
gauche	$\overline{Nu}_d$	3,97	3,91	4,46
	$\overline{Nu}_c$	14,45	12,45	12,40
	$\overline{Nu}_i$	—	—	$\Delta$ -9,12
	$\overline{Nu}$	18,42	16,36	7,74
	$\overline{Sh}_d$	3,97	3,95	3,93
droite	$\overline{Nu}_d$	5,69	5,57	4,83
	$\overline{Nu}_c$	12,81	14,34	14,28
	$\overline{Nu}_i$	—	—	$\Delta$ -11,45
	$\overline{Nu}$	18,51	19,90	7,66
	$\overline{Sh}_d$	5,69	5,61	5,59

- ▶  $\Delta$  Erreurs dans les flux de chaleur de Weaver
- ▶ Double-diffusif :  $\overline{Nu}$  non conservatif
- ▶ Influence de l'inter-diffusion sur flux diffusif (+12% / -13%)
- ▶ Flux d'inter-diffusion négatif (car  $M_v > M_a$ ) important
- ▶ Conservation des flux de chaleur nécessairement avec inter-diffusion

## Solution 2D thermo-solutale : bas-Mach

Sun modèle bas-Mach, pas d'inter-diffusion, définition du Nusselt convectif **non physique** :

$$\text{Nu}_c = \rho c_p (1 \cancel{\neq} \varepsilon_T \theta) u, \quad \varepsilon_T = 0,2 \text{ et } \varepsilon_m = 0,2$$

Ra	Sc	Pr	$M_a$	$M_v$	$\gamma_a$	$\gamma_v$
$5,63 \times 10^6$	0,71	0,71	29 g/mol	7,25 g/mol	1,4	1,4
$Y_{v,C}$	$Y_{v,H}$	$T_C$	$T_H$	$\xi_{\text{ini}}$	$\theta_{\text{ini}}$	
0,0	0,074	288 K	352 K	-0,5	-0,5	

		Sun	Sans interdiff.	Avec interdiff.
$\overline{\text{Nu}}$	gauche	16,34	16,60	35,52
	droite		16,23	35,54
$\overline{\text{Sh}}$	gauche	18,40	18,40	18,41
	droite		18,40	18,41
$P$		1,255	1,256	1,262

# Solution thermosoluble 2D

## Mélange air-vapor

Ra	Sc	Pr	$M_a$	$M_v$	$\gamma_a$
$10^6$	0,71	0,71	29 g/mol	18 g/mol	1,4
$Y_{v,C}$	$Y_{v,H}$	$T_C$	$T_H$	$\xi_{ini}$	$\theta_{ini}$
0,0	0,3	10 °C	80 °C	0,5	0,5

$$\varepsilon_T = 0,220 \text{ et } \varepsilon_m = 0,168$$

**référence**  $\gamma_v = 1,4$  double-diffusif

**interdiff.**  $\gamma_v = 1,4$  avec inter-diffusion

**var.  $\gamma$**   $\gamma_v = 1,29$  double-diffusif

**$\gamma$  + int.**  $\gamma_v = 1,29$  avec inter-diffusion

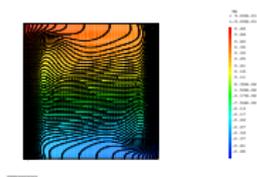


FIGURE –  $\theta, \gamma$  + int.

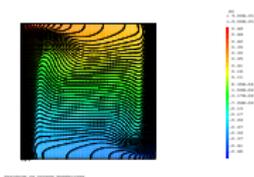


FIGURE –  $\xi, \gamma$  + int.

## Comparaison : interdiff. à la référence

	gauche			droite		
	$\overline{Nu}_d$	$\overline{Nu}_c$	$\overline{Nu}_i$	$\overline{Nu}_d$	$\overline{Nu}_c$	$\overline{Nu}_i$
référence	5,87	10,65	—	7,86	7,25	—
interdiff.	5,53	10,65	3.86	8,34	7,25	4,41

### Discussion

- ▶  $P$  : différence très petite (+0,15%)
- ▶  $\overline{Sh}_d, \overline{Sh}_c$  : pas de différence en 3 chiffres effectifs
- ▶  $\overline{Sh}$  : conservatif dans tous les deux cas
- ▶  $\overline{Nu}_d$  : différence visible (-5,8% / +6,1%), influence sur le champ de température
- ▶  $\overline{Nu}_c$  : pas de différence en 4 chiffres effectifs
- ▶  $\overline{Nu}_i$  : non négligeable (19% / 22% du  $\overline{Nu}$  total)
- ▶  $\overline{Nu}$  : non conservatif (référence : 16,52 / 15,11) v.s. conservative (interdiff. : 20,04 / 20,00)

## Comparaison : var. $\gamma$ à la référence

	gauche			droite		
	$\overline{Nu}_d$	$\overline{Nu}_c$	$\overline{Nu}_i$	$\overline{Nu}_d$	$\overline{Nu}_c$	$\overline{Nu}_i$
référence	5,87	10,65	—	7,86	7,25	—
var. $\gamma$	5,82	11,16	—	7,87	6,84	—

### Discussion

- ▶  $P$  : pas de différence en 3 chiffres effectifs
- ▶  $\overline{Sh}_d, \overline{Sh}_c$  : pas de différence en 3 chiffres effectifs
- ▶  $\overline{Sh}$  : conservative dans tous les deux cas
- ▶  $\overline{Nu}_d$  : différence petite (-0,85% / +0,13%)
- ▶  $\overline{Nu}_c$  : différence visible (+4,8% / -5,7%)
- ▶  $\overline{Nu}$  : non conservatif (reference : 16,52 / 15,11 ; var.  $\gamma$  : 16,99 / 14,71)

## Comparison : $\gamma$ + int. à interdiff.

	gauche			droite		
	$\overline{Nu}_d$	$\overline{Nu}_c$	$\overline{Nu}_i$	$\overline{Nu}_d$	$\overline{Nu}_c$	$\overline{Nu}_i$
interdiff.	5,53	10,65	3.86	8,34	7,25	4,41
$\gamma$ + int.	5,27	11,17	6,25	8,66	6,85	7,13

### Discussion

- ▶  $P$  : différence très petite (+0,15%, +0,30% à la référence)
- ▶  $\overline{Sh}_d, \overline{Sh}_c$  : pas de différence en 3 chiffres effectifs
- ▶  $\overline{Sh}$  : conservative dans tous les deux cas
- ▶  $\overline{Nu}_d$  : différence visible (-4,7% / +3.8%)
- ▶  $\overline{Nu}_c$  : différence visible (+4,9% / -5,5%)
- ▶  $\overline{Nu}_i$  : différence importante (+62% / +62%)
- ▶  $\overline{Nu}$  : conservatif (interdiff. : 20,04 / 20,00 ;  $\gamma$  + int. : 22,70 / 22,62)

## Section 4

# Conclusions and perspectives

## Conclusions and perspectives

- ▶ On a mis en place sur **Cast3M** le modèle bas-Mach avec l'inter-diffusion et la variation de l'indice adiabatique pour calculer l'écoulement d'un mélange air-vapeur dans une cavité carrée 2D et
  - ▶ les cas thermiques sont validés par les résultats de Vahl Davis et de Vierendeels
  - ▶ les cas thermosolutaux sont comparés avec les résultats de Weaver et de Sun
- ▶ On conclut des cas du mélange air-vapeur en état stationnaire que
  - ▶ l'inter-diffusion **n'est pas négligeable** et elle est **nécessaire** à compter pour avoir la conservation de l'énergie
  - ▶ l'inter-diffusion **a une influence** sur le transfert de chaleur
  - ▶  $\gamma$  **a une influence** surtout sur le flux de chaleur inter-diffusion
- ▶ On pourrait aussi prolonger cette étude par
  - ▶ rajouter la variation des coefficients  $\mu$ ,  $\lambda$  et  $D$
  - ▶ rajouter les effets de Soret et de Dufour

Merci pour votre attention !

- [VahlDavis : 1983] DE VAHL DAVIS, G. *Natural Convection in a Square Cavity : A Comparison Exercise*. International Journal for Numerical Methods in Fluids. 3 :227-248, 1983
- [Paillere : 2005] PAILLERE, H. — VIERENDEELS, J. ET AL. *Modelling of Natural Convection Flows with Large Temperature Differences : A Benchmark Problem for Low Mach Number Solvers. Part 2, Contributions to the June 2004 conference*. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis. 39(3) :617-621, 2005
- [Sun : 2010] SUN, H. ET AL. *Transient double-diffusive convection in an enclosure with large density variations* Int. J. Heat Mass Transfer. 53 :615-625, 2010
- [Weaver : 1991] WEAVER, J. A. — VISKANTA, R. *Natural convection due to horizontal temperature and concentration gradients — 1, Variable thermophysical property effects*. Int. J. Heat Mass Transfer. 34(12) :3107-3120, 1991

## inter-diffusion

$$\sum_i \rho_i h_i \vec{u}_i = \sum_i \left( \vec{u} - \frac{1}{Y_i} D_i \nabla Y_i \right) = \rho h \vec{u} - \sum_i \rho D_i h_i \nabla Y_i$$

## variation of $c_p$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \nabla \cdot (\rho h \vec{u}) = \left( \frac{\partial c_p}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla c_p \right) T + c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla T \right) - \frac{\partial p}{\partial t}$$

$$\left( \frac{\partial c_p}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla c_p \right) T = \left( \frac{\partial Y_v}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla Y_v \right) (c_{p,v} - c_{p,a}) T = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_v)$$

## Asymptotic analysis (low Mach number)

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = - \frac{1}{\gamma_0 \text{Ma}^2} \nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \bar{\tau} + \frac{1}{\text{Fr}} \rho \vec{g}^*$$

Let

$$p = p_0 + p_1 \text{Ma}^2 + O(\text{Ma}^4),$$

so that

$$-\frac{1}{\gamma} \nabla p_0 = 0, \forall \vec{x} \in \Omega.$$

We separate the dimensionless pressure into three parts :

$$p = P(t) + \left( p_g(t, \vec{x}) + p_d(t, \vec{x}) \right) \text{Ma}^2,$$

where

$P(t)$

the dimensionless thermodynamic pressure

$p_g(t, \vec{x})$

the gravity pressure  $p_g = \frac{\gamma_0}{\text{Fr}} \vec{g}^* \cdot \vec{x}$

$p_d(t, \vec{x})$

the driving pressure

## low-Mach model at small differences

- ▶  $\varepsilon_T \rightarrow 0$  and  $\varepsilon_m \rightarrow 0$
- ▶  $\rho \rightarrow 1$  and  $c_p \rightarrow 1$
- ▶ Several terms are negligible

$$-\nabla \cdot \vec{u} = \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho \right)$$

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\frac{1}{\gamma_0} \nabla p_d + \frac{1}{\text{Re}} \nabla \cdot \bar{\tau} + \frac{1}{\text{Fr}} (\rho - 1) \vec{g}^*$$

$$\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \xi = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi)$$

$$\rho \varepsilon_T c_p \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \theta \right) = \frac{\gamma_0 - 1}{\gamma_0} \frac{dP}{dt} + \varepsilon_T \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla \cdot (\lambda \nabla \theta)$$

$$+ \frac{\Delta c_p}{c_{p,0}} \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \varepsilon_T \nabla \theta \cdot \nabla \xi$$

## Analogy of mass and heat transfer

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \xi = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 \xi$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \theta = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \nabla^2 \theta$$

### Conditions

- ▶  $\Delta Y_v \simeq 0$  and  $Y_v$  not close to 1,

$$u = -D \frac{\Delta Y_v}{1 - Y_v} \frac{\partial \xi}{\partial x} \simeq 0$$

- ▶  $\text{Sc} = \text{Pr}$
- ▶ No coupling ( $\xi = 0$  or  $\theta = 0$ )

### Result

$$\xi_{\theta=0} = \theta_{\xi=0}$$

## Résultat comparaison avec Weaver

		Weaver	Sans interdiff.	Avec interdiff.
left	$\overline{Nu}_d$	3,97	3,91	4,46
	$\overline{Nu}_c$	14,45	12,45	12,40
	$\overline{Nu}_i$	—	—	-9,12
	$\overline{Nu}$	18,42	16,36	7,74
	$\overline{Sh}_d$	3,97	3,95	3,93
	$\overline{Sh}_c$	—	0,847	0,84
	$\overline{Sh}$	3,97	4,79	4,78
right	$\overline{Nu}_d$	5,69	5,57	4,83
	$\overline{Nu}_c$	12,81	14,34	14,28
	$\overline{Nu}_i$	—	—	-11,45
	$\overline{Nu}$	18,51	19,90	7,66
	$\overline{Sh}_d$	5,69	5,61	5,59
	$\overline{Sh}_c$	—	-0,84	-0,84
	$\overline{Sh}$	5,69	4,77	4,75

## Résultat de l'application

		référence	var. $\gamma$	interdiff.	$\gamma + \text{int.}$
gauche	$\overline{\text{Nu}}_d$	5,87	5,82	5,53	5,27
	$\overline{\text{Nu}}_c$	10,65	11,16	10,65	11,17
	$\overline{\text{Nu}}_i$	—	—	3,86	6,25
	$\overline{\text{Nu}}$	16,52	16,99	20,04	22,70
	$\overline{\text{Sh}}_d$	4,57	4,57	4,57	4,57
	$\overline{\text{Sh}}_c$	0,95	0,95	0,95	0,95
	$\overline{\text{Sh}}$	5,52	5,52	5,52	5,52
droite	$\overline{\text{Nu}}_d$	7,86	7,87	8,34	8,66
	$\overline{\text{Nu}}_c$	7,25	6,84	7,25	6,85
	$\overline{\text{Nu}}_i$	—	—	4,41	7,13
	$\overline{\text{Nu}}$	15,11	14,71	20,00	22,62
	$\overline{\text{Sh}}_d$	6,47	6,47	6,48	6,47
	$\overline{\text{Sh}}_c$	-0,95	-0,95	-0,95	-0,95
	$\overline{\text{Sh}}$	5,51	5,52	5,52	5,52
	$P$	0,668	0,668	0,669	0,670