

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

UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre:...

Série :...

MEMOIRE

PRESENTE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE MAGISTER EN PHYSIQUE

SPECIALITE : Physique Energétique

OPTION : Photothermique

THEME

*Etude d'un jet en spray d'une solution chimique
sur un substrat chaud destiné à l'élaboration des
couches minces*

Par :

MESSAOUDA KHAMMAR

SOUTENU LE : 25/11/ 2010

Devant le jury :

Président :	L. BAH	Prof.	Université Mentouri Constantine
Rapporteur :	N. ATTAF	Prof.	Université Mentouri Constantine
Examineurs :	L. HADJERIS	M.C.A	Université d'Oum El-Bouaghi

Remerciements

Je remercie mon «DIEU» pour le peu de savoir qu'il nous a permis d'acquérir.

Ce travail qui est présenté dans ce mémoire a été réalisé au laboratoire des couches minces et interfaces à l'université Mentouri-Constantine.

*C'est avec beaucoup de plaisir que j'exprime ma profonde gratitude à monsieur **N.ATTAF** Professeur à l'Université-Constantine, mon encadreur qui m'a dirigé pour réaliser efficacement ce travail. Ces quelques lignes suffisent-elles à exprimer ma reconnaissance pour la confiance qu'il m'a témoigné, pour l'attention jamais relâchée qu'il a porté à mon travail, la rigueur de travail scientifique à ses cotés et nos discussion sur la physique en générale auront fortement contribués a mon épanouissement scientifique.*

*Je tiens à remercier monsieur **L.BAHI**, Professeur au laboratoire de physique énergétique à l'Université-Constantine, qui a bien voulu accepter de présider le jury de ma thèse.*

*Je tiens à remercier également monsieur, **L. HADJERIS**, Maitre de conférences à l'Université d'Oum El-Bouaghi, qui a bien voulu examiner mon travail et donner ses appréciations.*

*Je voudrais exprimer mes remerciements les plus sincères à messieurs, **M.S.AIDA, M.AFRID, L.AISSANI, O.KHOLAI, M.KADJA, A.H.BOUNCER** pour leurs aides, conseils et encouragements.*

*Enfin, je tiens à exprimer ma gratitude à toutes mes amies et, plus particulièrement **S.GUITOUNI, N.SOBTTI, M.A.BERKANI, D.MENNACERE, S.SAADI.***

A mes très chers parents

A mes sœurs et mes frères

*A Islam et **Radji***

Nomenclature

a	Diffusivité thermique	m^2/s
A	Coefficient dans le système d'équations algébriques discrétisées	
$A P $	Fonction d'un schéma numérique en fonction du nombre de Peclet	
b	Terme source dans le système d'équations algébriques discrétisées	
B	Nombre adimensionnel de transfert de chaleur de Spalding	
C_d, C_g	Les concentrations de la goutte et du gaz ambiant	kg/m^3
C_D	Le coefficient de drag	
C_p	La chaleur spécifique	$J/kg\ k$
dX_e, dX_w, dY_n, dY_s	sont respectivement les distances entre le nœud considéré P et les nœuds E, W, N, S	
D	Terme de diffusion dans le système d'équations algébriques discrétisées	
$D_d(R_d)$	Diamètre (rayon) de la goutte	μm
D_V	Le coefficient de diffusion massique	m^2/s
F	Terme de convection dans le système d'équations algébriques discrétisées	
F_A, F_{drag}	Les forces d'Archimède et de Drag	$kg.m/s^2$
g	Accélération de pesanteur	m/s^2
Gr	Nombre adimensionnel de Grashof	
h	Le coefficient de transfert de chaleur par convection	W/m^2k
$h_{bec_substrat}$	La distance entre le bec et le substrat	cm
k_m	Le coefficient de transfert de masse	m/s
l	Longueur de porte substrat	m
L_v	La chaleur latente d'évaporation de l'eau	J/kg
m	La masse	kg
M	La masse molaire de la vapeur d'eau	g/mol
Nu	Nombre adimensionnel de Nusselt	
p	Pression	Pa
P	Pression adimensionnelle	
P_{vg}	La pression partielle de la vapeur d'eau dans l'air	Pa
P_{sat}	La pression de saturation d'eau	Pa
Pe	Nombre adimensionnel de Peclet	
R	La constante des gaz parfait	$J/mol\ k$

Re	Nombre adimensionnel de Reynolds	
Ra	Nombre adimensionnel de Rayleigh	
S	La surface superficielle de la goutte sphérique ($S = 4\pi R_d^2$)	m^2
Sc	Nombre adimensionnel de Schmidt	
sf	La fraction solide	%
Sh	Nombre adimensionnel de Sherwood	
S_ϕ	Terme source	
T	La température	k
t	Le temps	s
u	Composante de la vitesse de l'air dans la direction x	m/s
U	Composante de la vitesse adimensionnelle de l'air dans la direction x	
v	Composante de la vitesse de l'air dans la direction y	m/s
V	Composante de la vitesse adimensionnelle de l'air dans la direction y	
x	Coordonnée parallèle le porte substrat	m
X	Coordonnée adimensionnelle dans la direction x	
y	Abscisse dans le sens perpendiculaire à la surface du substrat	m
Y	Coordonnée adimensionnelle dans la direction y	
v	La vitesse	m/s
v_r	La vitesse relative	m/s
V_d	Volume de la gouttelette ($=\frac{4}{3}\pi R_d^3$)	m^3
y_d	La position de la gouttelette	cm

Symboles grecques

β	Coefficient d'expansion thermique à pression constante	K^{-1}
ϕ	Variable dépendante générale (présente : la pression, la température et les composantes de la vitesse).	
μ	La viscosité dynamique	$kg/m s$
ρ	La masse volumique	kg/m^3
λ	La conductivité thermique	$W/m.K$
θ	température adimensionnelle	
Γ	Coefficient de diffusion générale	
$\Delta X, \Delta Y$	Dimensions du volume de contrôle considéré.	
Δt	Le temps d'incrément	s

Indices

<i>E</i>	Coté Est du nœud <i>P</i>
<i>e</i>	La face Est du volume de contrôle considéré
<i>N</i>	Coté Nord du nœud <i>P</i>
<i>n</i>	La face Nord du volume de contrôle considéré
<i>P</i>	Nœud considéré du maillage
<i>S</i>	Coté sud du nœud <i>P</i>
<i>s</i>	La face sud du volume de contrôle considéré
<i>W</i>	Coté Ouest du nœud <i>P</i>
<i>w</i>	La face Ouest du volume de contrôle considéré
<i>d</i>	Gouttelette
<i>g</i>	Gaz (air)
<i>l</i>	Liquide (eau)
<i>s</i>	Solide
0	Référence
<i>ini</i>	Initiale
<i>w</i>	Substrat

Sommaire

Introduction générale	1
-----------------------------	---

Chapitre I : Etude bibliographique d'un spray dans un milieu chauffé

I.1 Le spray.....	3
I.1.1 Introduction.....	3
I.1.2 Génération des gouttes.....	4
I.1.3 Différents types d'atomiseurs.....	4
I.1.4 Spray dans l'industrie.....	5
I.1.5 Spray dans les couches minces.....	7
I.1.5.1 Définition d'une couche mince.....	7
I.1.5.2 Le spray pyrolyse.....	8
I.1.5.3 Le principe de spray ultrasonique.....	9
I.1.5.3.1 Principe général de procédé spray ultrasonique.....	9
I.1.5.3.2 Les paramètres qui influent les films élaborés.....	10
I.2 La convection.....	13
I.2.1 Introduction.....	13
I.2.2 La convection naturelle.....	14
I.2.2.1 Classification des problèmes de la convection naturelle.....	14
I.2.2.2 Définition des termes de la convection naturelle.....	14
I.2.2.3 L'écoulement sur les plaques horizontales.....	15
I.2.2.4 Résumé des corrélations usuelles en convection naturelle.....	17

Chapitre II : Etude numérique d'une convection naturelle d'air sur une plaque horizontale (substrat) chauffée

Introduction.....	19
II.1 Les équations vectorielles de la convection naturelle.....	19
II.1.1 Equation de continuité.....	19

II.1.2 Equation de quantité de mouvement.....	19
II.1.3 Equation d'énergie.....	19
II.2 Formulation des équations en coordonnées cartésiennes.....	19
II.2.1 Equation de continuité.....	19
II.2.2 Equation de quantité de mouvement.....	20
II.2.3 Equation d'énergie.....	20
II.3 Représentation du modèle.....	20
II.4 Modélisation mathématique.....	22
II.5 Formulation du problème étudié.....	23
II.5.1 Equation de continuité.....	23
II.5.2 Equation de quantité de mouvement.....	23
II.5.3 Equation d'énergie.....	23
II.6 Conditions aux limites.....	23
II.7 Formulation adimensionnelle.....	24
II.7.1 Principales grandeurs physiques et variables adimensionnelles.....	24
II.7.2 Equations adimensionnelles.....	25
II.7.2.1 Equation de continuité.....	25
II.7.2.2 Equation de quantité mouvement.....	25
II.7.2.3 Equation d'énergie.....	25
II.7.3 Conditions aux limites.....	25
II.8 Modélisation numérique.....	26
II.8.1 Méthode des volumes finis.....	26
II.8.2 Equations générales de transport.....	26
II.8.3 Maillage.....	28
II.9 Discrétisation des équations de conservation.....	32
II.10 Application de schéma numérique quelconque.....	34

Chapitre III : Etude numérique de la chute d'une gouttelette dans un milieu gazeux chauffé

Introduction	40
III.1 La présentation du modèle.....	40
III.2 Les hypothèses simplificatrices.....	42
III.3 Les équations d'évaporation d'une gouttelette.....	43

III.3.1 L'équation de taux d'évaporation.....	43
III.3.2 L'équation d'énergie de la gouttelette.....	45
III.3.3 L'équation du rayon de la gouttelette.....	46
III.3.4 L'équation de mouvement de la gouttelette dans le gaz ambiant.....	47
III.4 Les propriétés thermophysiques de l'air et des composantes de la gouttelette.....	49
III.4.1 Les propriétés thermophysiques de l'air	49
III.4.2 Les propriétés thermophysiques de l'eau liquide (H_2O).....	50
III.4.3 Les propriétés thermophysiques de chlorure de Zinc ($ZnCl_2$).....	50
III.5 La fraction solide sf	50
III.6 Modélisation numérique.....	52
III.6.1 La méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.....	52
III.6.2 Les avantages d'utilisation de RK4.....	52
III.6.3 Discrétisation des équations du problème.....	53
III.6.4 Traitement informatique.....	55
III.6.5 Organigramme.....	58

Chapitre IV : Résultats et discussions

Introduction.....	59
IV.1 Résultats numériques du modèle de la chute d'une gouttelette dans un milieu à température constante.....	59
IV.1.1 Etude de l'effet de la température du milieu ambiant sur la goutte.....	60
IV.1.2 Etude de l'effet du diamètre initial de la goutte.....	64
IV.1.3 Etude de l'effet de la fraction solide initiale.....	67
IV.1.4 Etude de l'effet de la distance entre le bec et le substrat.....	69
IV.2 Résultats de la convection sur une paroi horizontale.....	71
IV.2.A) Résultats de distribution de la température et de la vitesse.....	73
IV.2.B) Résultats des évolutions verticale et horizontale de la température et de la vitesse.....	76
IV.2.C) Les évolutions de T_g et v_g au centre du substrat.....	78
IV.2.D) Validation des résultats numériques avec ceux de la mesure.....	81
IV.3 Couplage des modèles de la goutte avec celui du milieu convectif.....	83
IV.3.1 Etude de l'effet de la température du milieu ambiant sur la goutte.....	83
IV.3.2 Etude de l'effet du diamètre initial de la goutte.....	85
IV.3.3 Etude de l'effet de la fraction solide initiale.....	87

IV.3.4 Etude de l'effet de la distance entre le bec et le substrat.....	89
Conclusion générale.....	91
Références bibliographiques.....	93

Annexes

Annexe I : L'algorithme SIMPLE et la méthode de Gauss Seidel.....	i
Annexe II : La méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.....	xi

Résumés

Introduction générale

A L'heure actuelle, le domaine d'application des couches minces est très vaste. Celui-ci englobe une grande diversité de matériaux solides ayant pour objectif de répondre aux problèmes technologiques de l'heure. La qualité des films minces obtenus repose sur la source, le processus d'élaboration, le type des substrats sur lesquels la couche est formée et les conditions expérimentales choisies. Parmi les différents processus d'élaboration de couches minces, nous considérons que la technique de déposition par spray pyrolytique est devenue une alternative sur les autres procédés parce qu'elle produit des couches de bonnes propriétés physiques avec l'avantage d'être simple à mettre en œuvre et non coûteuse.

Le procédé spray pyrolytique d'une solution chimique dans la préparation des couches minces est une technique basée sur l'atomisation de la solution et son éjection sur un substrat chauffé qui permet de produire la réaction chimique. Cette atomisation s'effectue dans un milieu de convection naturelle.

Notre travail est une étude numérique d'un jet en spray d'une solution chimique de ($ZnCl_2 + eau$) dans un milieu convectif d'air provoqué par le chauffage d'un porte substrat. L'étude a pour but d'optimiser les conditions opératoires du procédé pour améliorer la qualité des couches. Cette étude porte plus précisément sur les influences des propriétés physico-chimiques et géométriques soit de la goutte spray (la taille et la concentration du sel dans la gouttelette) ou de l'air du milieu environnant la goutte (la température du substrat, et la distance entre le bec et le porte substrat).

Dans le but de situer notre travail, le mémoire est organisé en quatre chapitres :

- Dans le premier chapitre, on présente une étude bibliographique d'un spray dans un milieu chauffé; c-à-d la technique du spray, plus précisément le spray pyrolyse son procédé et son principe dans la formation des couches minces, sur la convection, plus précisément, naturelle.
- Le deuxième chapitre est une étude numérique de la convection naturelle d'air sur une plaque horizontale chauffée à diverses températures. Cette partie est consacrée à la formulation du problème, aux hypothèses simplificatrices et à

l'établissement des équations et des conditions aux limites. La discrétisation des équations par la méthode des volumes finis, la résolution se fait par la méthode itérative de Gauss-Seidel. L'étude a pour but de suivre les évolutions de la température et de la vitesse de l'écoulement d'air dans un volume choisi.

- Le troisième chapitre est une étude numérique de la chute d'une gouttelette spray de $(ZnCl_2 + Eau)$ dans un milieu gazeux d'air chauffé. Celle-ci commence par la formulation du problème, aux choix d'hypothèses simplificatrices et à l'établissement des équations différentielles. La résolution numérique est basée sur l'utilisation de la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.
- Le dernier chapitre est consacré au couplage des deux parties précédentes ainsi qu'à l'exposé de l'ensemble des résultats obtenus au cours de ce travail, et à leurs interprétations.

Pour ne pas alourdir la présentation du texte, ces quatre chapitres sont complétés par deux annexes qui représentent les différentes méthodes utilisées dans ce travail (volume finis, Gauss-Seidel, Runge-Kutta).

Chapitre I

Etude bibliographique d'un spray dans un milieu chauffé

I.1 Le spray

I.1.1 Introduction

De manière générale, l'atomisation désigne l'action de séparer un corps liquide en gouttelettes ou en particules autrement dit la fragmentation des solutions en fines gouttelettes de manière à obtenir un nuage de gouttes qui permet une répartition et une efficacité optimales des traitements appliqués. C'est l'opération qui correspond au passage d'un volume continu de liquide à un ensemble de gouttes de tailles diverses comme illustré sur la **Fig. I.1** [1]. Lorsque les gouttes sont suffisamment petites et donc très nombreuses, on obtient un brouillard de gouttes appelé spray, on parle alors d'atomisation **Fig. I.2** [2].

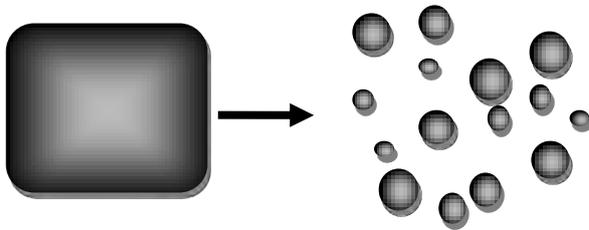


Fig. I.1 Fragmentation d'un liquide



Fig. I.2 brouillard de gouttes « spray »

L'atomisation d'un jet liquide comporte classiquement deux étapes (voir **Fig. I.3**) : la première, l'atomisation primaire, correspondant à la formation de fragments liquides, sphériques ou non, à la surface du jet, et la seconde, l'atomisation secondaire désignant la cassure supplémentaire de ces éléments liquides en gouttelettes plus fines [2].

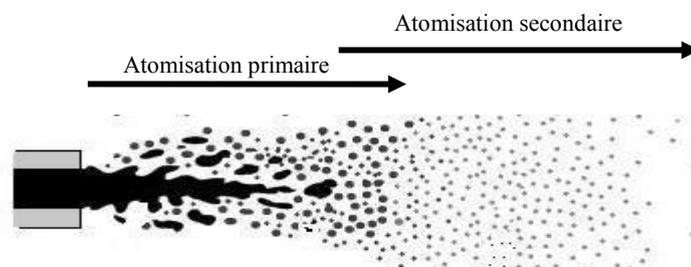


Fig. I.3 l'atomisation primaire et secondaire

I.1.2 Génération des gouttes

Les gouttes peuvent être créées principalement par condensation des vapeurs ou par la désintégration d'une masse liquide. La formation d'une goutte par condensation homogène peut se produire sous des conditions à haute supersaturation, tandis que la condensation non-homogène est observée à basse supersaturation en présence des petites particules considérées comme des germes de condensation. Les gouttes générées par la condensation jouent un rôle important dans plusieurs processus naturels et techniques. La désintégration d'un volume liquide peut être observée lors de l'impact d'une goutte de pluie sur une surface solide ou la décomposition d'une grande goutte de pluie en petites gouttes. En effet, la transformation d'un volume liquide en spray est d'une grande importance technique que l'on rencontre dans diverses applications pratiques. Il existe une vaste littérature sur les propriétés de spray et leurs productions [3].

La fragmentation du liquide est liée aussi bien à la géométrie de l'injecteur utilisé qu'à la tension superficielle [2,3]. Les dispositifs de la technique de la génération des gouttes ou spray sont décrits ci-dessous.

I.1.3 Différents types d'atomiseurs

Atomiseurs de pression : les sprays sont souvent produits en déchargeant un liquide par une petite ouverture ou bec dans l'air ou une chambre de combustion. Le liquide émerge comme un jet mince qui se désagrège dans un spray. Dans ce processus, l'énergie liée à la pression est convertie en énergie cinétique et énergie de surface des gouttelettes. Les différents types d'atomiseurs de pression sont nombreux et bien discutés dans [3].

Atomiseurs rotatifs : les atomiseurs rotatifs basés sur l'utilisation d'un disque, bol ou autre objet tournant à grande vitesse alimenté en son centre par un jet liquide. Le liquide s'étale sur l'objet, puis se résout sur les bords de l'objet soit sous forme d'une nappe liquide qui se résout ensuite en gouttes, soit sous forme de jets qui se transforment en gouttes, soit directement sous forme de gouttes.

Atomiseurs ultrasoniques : Un film liquide mince sur une surface solide vibrant à haute fréquence sera présente comme un motif de vagues capillaires. À grande amplitude, la vague crête devient instable et un brouillard de fines gouttelettes est observé au-dessus de la surface du liquide. L'atomiseur à ultrasons peut livrer des gouttelettes très fines, a été

souvent utilisé pour des applications médicales. Les gouttelettes produites dans les brouillards ont une vitesse très faible. Un autre concept de l'atomisation ultrason est l'atomiseur à onde stationnaire. Cette technique a été proposée pour la pulvérisation de fluides visqueux et des métaux liquides [3].

I.1.4 Spray dans l'industrie

La connaissance du comportement dynamique des gouttelettes et des systèmes de goutte est importante dans de nombreux processus naturels et techniques. Certaines de ces applications ont été étudiées depuis de nombreuses années, d'autres sont à la base pour les nouvelles technologies, telles que l'impression à jet d'encre ou de gouttelettes destinées aux diverses applications technologiques utilisées dans l'industrie [3], tels que la pharmacie, le carbonate de calcium, le kaolin, les herbicides, les fertilisants, l'agro alimentaire, les cosmétiques et les détergents.

Technologie de séparation de gouttelette : Les gouttes qui se séparent d'un gaz en écoulement couvrent un domaine assez large avec des dimensions qui varient de 0.2 à 20 μm [3]. Dans les séparateurs par impact, les gouttes sont transportées jusqu'à une surface solide ou elles sont déposées. Elles fusionnent avec des gouttes liquides, des films ou des feuilles. Dans ce contexte on trouve une grande variété de séparateur, tels que des cyclons, séparateur par onde de surface, filtres, épurateurs humides, etc.... La séparation des grosses gouttelettes peut être réalisée par de faibles vitesses des gaz. Par ailleurs, les vitesses trop importantes peuvent mener à la désintégration de la goutte en plusieurs gouttelettes fines.

Moteurs à combustion interne : Dans les moteurs diesel ou des brûleurs à Mazout le carburant est fourni à la région de combustion en tant que particules liquides. Dans ce cas, le contrôle de la taille des gouttes ainsi que leur dispersion dans la chambre de combustion est un problème important pour l'amélioration des rendements des machines. La formation des mélanges dans les carburateurs des moteurs et dans les machines d'injection des fuels est très bien documentée dans la littérature. Les processus de relaxations thermique et mécanique, l'évaporation des mélanges liquides, les processus de diffusion et d'interaction avec les surfaces solides sont importants dans la modélisation de la combustion. La nucléation homogène du carbone et du carburant imbrûlé peuvent être des éléments de formation de la

suie, tandis que le cendre volant est le résultat d'une combustion incomplète. La suie et toute autre matière particulaire transportent une partie de l'énergie de combustion.

Refroidissement par spray : L'évaporation des gouttelettes liquides est d'intérêt pratique pour le refroidissement en spray. Le refroidissement par l'eau en spray est employé par exemple dans l'industrie sidérurgique des tôles métalliques. En raison de la vitesse élevée de la couche de vapeur entre la gouttelette et la surface chaude le taux de transfert de la chaleur est très élevé. L'utilisation des brumes ou d'aérosols fins a été suggérée pour évacuer la chaleur loin des puces et pastilles électroniques, des semi-conducteurs de puissance, et des ordinateurs. L'objectif est de fabriquer de petits et légers systèmes de refroidissement efficaces [3].

Nettoyage avec les jets à haute pression : Les jets à haute pression conviennent pour détacher la saleté et pour le nettoyage des objets tels que les véhicules, les machines, les façades des bâtiments ou des piscines. En raison de la pression d'impact élevée un effet nettoyant très bon est réalisé même pour la saleté collante et lourde. En raison de la haute pression de tels dispositifs économisent de l'énergie et de l'eau [3].

Applications dans l'agriculture : L'application saine et efficace des sprays agricoles pour le contrôle des parasites et la protection des récoltes dépend essentiellement, de l'éventail de la taille des gouttelettes. L'utilisation de spray avec un bon dimensionnement de distribution permet une réduction du débit et du volume de jet à appliquer et ce qui mène à une utilisation avec moins en moins de gaspillage du jet. Le transport, la distribution, le dépôt sur la cible et la dérivation des nuages de jet sont affectés par la distribution de la taille des gouttes dans le jet. Les phénomènes de base importants sont l'atomisation et la caractérisation des sprays agricoles qui contiennent : l'atomisation des liquides non newtoniens, la variation dans la distribution de taille provoquée par l'évaporation, l'éclaboussement des gouttes sur la cible après impact. Afin de réduire ce problème des atomiseurs rotatoires sont utilisés comme des dispositifs tenus à la main, des pulvérisateurs montés sur tracteur et même sur des avions.

Applications dans la médecine : Pour des procédures d'application chirurgicales et dentaires du laser dans des endroits où les tissus ne sont pas appropriés aux méthodes de laser à cause de leur faible absorption de l'énergie optique, pour y remédier à ça, il est recommandé d'utiliser, au cours de chaque impulsion laser, un jet d'encre liquide comme amortisseur de

l'énergie optique. Ainsi, le procédé d'ablation du tissu ou de l'os dépend des propriétés d'absorption [3].

Pulvérisation thermique : La pulvérisation thermique décrit une large classe des processus dans lesquels des gouttelettes des métaux fondus, des verres ou des polymères sont pulvérisées sur une surface pour produire des couches, formes de filet ou produire des matières composites avec de nouvelles propriétés. La source de chaleur pour fondre la matière de base peut être fournie par la flamme ou par un arc électrique. Les particules fondues sont accélérées par la flamme et transportées à la surface. La pulvérisation par plasma peut être employée pour déposer des couches en métal pour enlever les pièces et pour d'autres applications ou déposer diverses couches. La qualité des enduits dépend de l'impact de gouttelette de rebondissement de la gouttelette et l'éjection du liquide devrait être évitée [3].

Gouttelettes de boue (mixte) : Les gouttelettes de carburant de boue contiennent les combustibles liquides et les particules de combustible solide. Charbon pulvérisé mélangé aux combustibles liquides ou aux boues sous forme d'eau qui peut être pompés, transporté et manipulé comme les carburants de meilleure qualité. Des boues de l'eau de charbon ont été étudiées au cours des dernières années comme carburant alternatif pour des chaudières d'industrie et de centrale électrique. Ces carburants de boue ont attiré un intérêt spécial et ont été étudiés en tant que carburants alternatifs parce que leur coût, transport de canalisation et manipulation sont commodes et économiques [3].

I.1.5 Spray dans les couches minces

La technique "spray" a été proposée pour la première fois par Chamberlin et Skarman en 1963. Elle fut utilisée avec succès pour de films de CdS. Elle a, ensuite, été adapté pour l'élaboration de plusieurs matériaux tels que (Cd, Zn) Sn, CuInS₂, FeS₂, etc. Ainsi que pour l'obtention de films minces d'oxydes transparents et conducteurs (SnO₂, ZnO,...) [4].

I.1.5.1 Définition d'une couche mince

Par principe, une couche mince d'un matériau donné est un élément de ce matériau dont l'une des dimensions qu'on appelle l'épaisseur a été fortement réduite de telle sorte qu'elle s'exprime en Angstrom et que cette faible distance entre les deux interfaces, entraîne une perturbation de la majorité des propriétés physiques [5].

I.1.5.2 Le spray pyrolyse

Le procédé " spray pyrolyse "est une méthode bien adaptée à la préparation des couches minces.

"**Spray**" est le mot anglais qui indique le jet d'un liquide (parfum, déodorant, insecticide, etc.) projeté par fines gouttelettes par pulvérisation.

"**Pyrolyse**" vient de pyrolytique est indique le chauffage du substrat. On assiste à une décomposition thermique d'une source pour libérer un métal ou un composé. La température du substrat fournit l'énergie nécessaire, dite énergie d'activation, pour déclencher la réaction chimique entre les composés [4].

Cette méthode présente de nombreux avantages:

- * La rapidité et la simplicité de mise en œuvre.
- * Elle permet de bien contrôler la composition chimique du matériau que l'on veut obtenir.
- * On peut utiliser plusieurs produits à la fois, en particulier pour faire le dopage.
- * Les couches minces préparées par cette technique sont de bonne qualité.
- * C'est une technique très peu coûteuse et économique. Elle est industrialisable.
- * On peut effectuer par cette méthode des dépôts sur des surfaces importantes dans les cas des cellules solaires ou d'écrans plats [4].

Typiquement, l'équipement utilisé dans le spray pyrolyse se compose d'un atomiseur, précurseur de solution, substrat chauffé et contrôleur de température.

En générale, les atomiseurs utilisés pour produire un jet en spray se classent en deux catégories :

Technique d'un **spray pneumatiques** : dans ce cas, c'est l'effet de la pression du gaz porteur qui provoque la pulvérisation du liquide en fines gouttelettes.

Technique d'un **spray ultrasonique** : dans ce cas, l'atomisation du liquide est produite par des ondes ultrasoniques.

Dans le premier cas, le jet sort du bec avec une vitesse initiale dépendant des valeurs de la pression et du diamètre du bec, mais l'inconvénient c'est que les tailles des gouttes ne sont

pas homogènes. Par contre, dans le deuxième processus la vitesse de sortie du bec est nulle mais la taille des gouttelettes est très fine et homogènes [5].

I.1.5.3 Le principe de spray ultrasonique

La pulvérisation ultrasonique est basée sur l'exploitation de l'énergie des ondes acoustiques de haute fréquence (les ultrasons) pour fractionner des films liquides en une multitude de petites gouttelettes de tailles uniformes qui sortent du bec sous forme d'un jet. Les pulvérisateurs sont destinés à fonctionner à des fréquences relativement faibles (quelques dizaines de KHz) consistent en deux éléments piézoélectriques, générateurs de vibrations mécaniques, fixés entre un support et un amplificateur d'amplitude des vibrations. Les résultats des travaux expérimentaux réalisés dans ce domaine confirment les propriétés suivantes de la pulvérisation ultrasonique des liquides [6]:

- ✓ Distribution très étroite du diamètre des gouttelettes;
- ✓ Possibilité de contrôler le diamètre moyen des gouttelettes et le débit du liquide à pulvériser de manière indépendante;
- ✓ Possibilité de pulvériser de très petits débits ;
- ✓ Grande facilité de transport des gouttelettes par un gaz porteur et modification aisée de la forme du jet des gouttelettes ainsi que de leur concentration suivant le flux de ce gaz;
- ✓ Très faible consommation d'énergie.

I.1.5.3.1 Principe général du procédé spray ultrasonique

Une solution contenant les différents constituants du composé est pulvérisée, en fines gouttes de 40µm de diamètre par un générateur à ultrasons 40KHz, sur un substrat chauffé. La température du substrat comprise entre 200 et 400°C permet l'activation de la réaction chimique entre les composés. L'expérience (**Fig.I.4**) peut être réalisée à l'air, et peut être préparée dans une enceinte (ou bien dans une chambre de réaction) sous un vide, environ, de 50 Torr [4,6].

La description de la formation des films par la méthode Spray pyrolyse peut être résumée comme suit:

*Formation des gouttelettes à la sortie du bec

*Le transport des gouttelettes par gravité du bec jusqu'au substrat

*Décomposition de la solution des précurseurs sur la surface du substrat chauffé par réaction de pyrolyse.

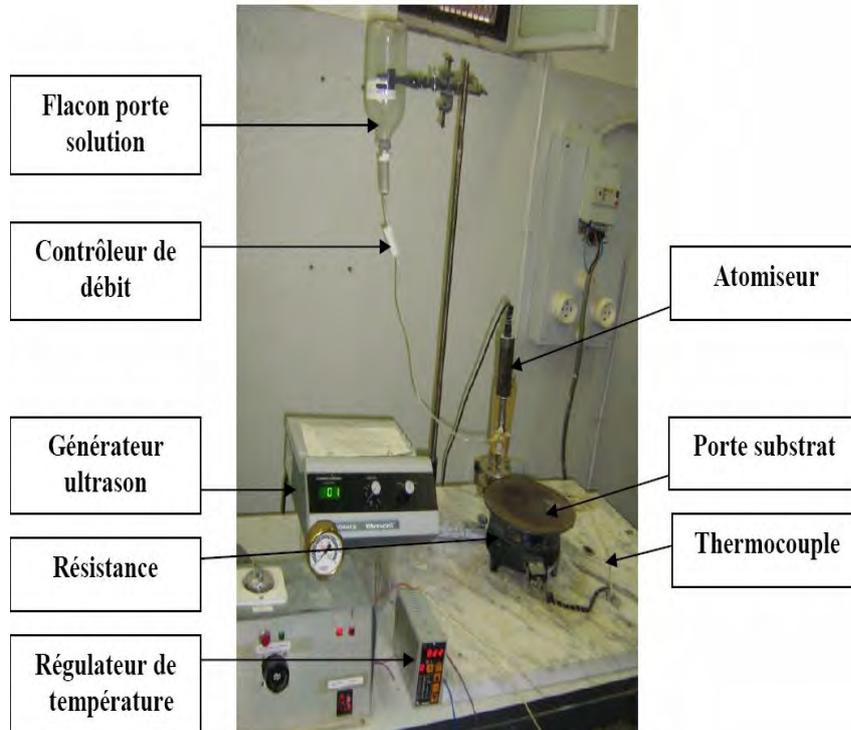


Fig. I.4 : Le dispositif complet de la technique Spray ultrasonique (Labo. des couches minces et interfaces, Univ. Mentouri-Constantine)

a- Solutions de départ (source) :

La composition de la solution finale est déterminée par les corps ou les réactifs dissous dans le dissolvant (solution de départ) selon le rapport stœchiométrique prédéterminé.

Les matériaux employées comme précurseurs dans le laboratoire des couches minces et interfaces de l'université-Constantine, sont habituellement peu coûteux, tels que les nitrates, les chlorures et les acétates qui sont rangés dans la catégorie des réactives. L'eau distillée ou l'alcool est souvent employé comme dissolvant. Dans la solution de base il est nécessaire d'éliminer les problèmes de solubilité et de ségrégation de phase, où les différents composants se précipitent à des temps différents. La concentration globale de la solution peut être variée de 0.01 à quelque *mole /litre*. Notons que ce paramètre a pour effet de changer la taille moyenne des particules fluides éjectées [4].

b- Le transport des gouttelettes :

L'homogénéité du matériau déposé peut être déterminée à partir de la taille des gouttelettes pulvérisées et de la concentration de la solution tandis que sa morphologie peut être également déterminée par la concentration et la vitesse des gouttelettes produite par les atomiseurs [4].

c- Réaction chimique sur le substrat (dépôt) :

Quand les gouttelettes d'aérosol s'approchent de la surface du substrat chauffé (200-400°C), dans les conditions expérimentales appropriées, la vapeur formée autour de la gouttelette empêche le contact direct entre la phase liquide et la surface du substrat. Cette évaporation des gouttelettes permet un renouvellement continu de la vapeur, donc les gouttelettes subissent la décomposition thermique et donnent la formation de films fortement adhérents [4].

I.1.5.3.2 Les paramètres qui influent les films élaborés

Les phénomènes intervenant dans les étapes de la préparation des films sont gouvernés par plusieurs facteurs qui peuvent être classés en 2 groupes : les propriétés des particules à l'impact (le diamètre, la morphologie, la vitesse, la température, l'état physicochimique etc...) et l'état de la surface du substrat où des particules sont déjà étalées (la rugosité, la température, les propriétés thermiques, l'oxydation, etc...)[4,7].

Les propriétés du substrat ne sont pas moins importantes vis à vis du comportement de la goutte à l'étalement : en effet, sa diffusivité, son effusivité, sa température, sa rugosité, la présence de contaminants ou d'une couche d'oxyde en surface ainsi que l'angle d'impact de la goutte agissent sur le comportement à l'écrasement et lors de l'étalement [4,7].

On peut résumer les paramètres caractéristiques de la formation d'une couche mince (particules, milieu environnant, interface, substrat) dans la (**Fig. I. 5**).

On note d'après la partie précédente et par rapport aux différentes utilisations de la technique spray que le spray pyrolyse dans la préparation des couches minces est une technique basée sur le chauffage du substrat et ça indique que la convection naturelle joue un rôle capital sur la qualité de la couche. Dans ce cadre on fait une brève étude sur la convection et en particulier on se base sur la convection naturelle (partie suivante), et qui fait l'objectif du chapitre II. Dans ce dernier on fait une étude numérique de la convection naturelle dans le but

de voir les évolutions de la température et de la vitesse de l'écoulement d'air (résistance thermique, la vitesse de l'écoulement au contre courant...). Le chapitre III porte sur la connaissance des effets de ces résultats sur la chute d'une gouttelette (plus précisément l'effet sur la vitesse, la température, la taille, la concentration des gouttelettes) et bien sûr son influence sur la qualité des films.

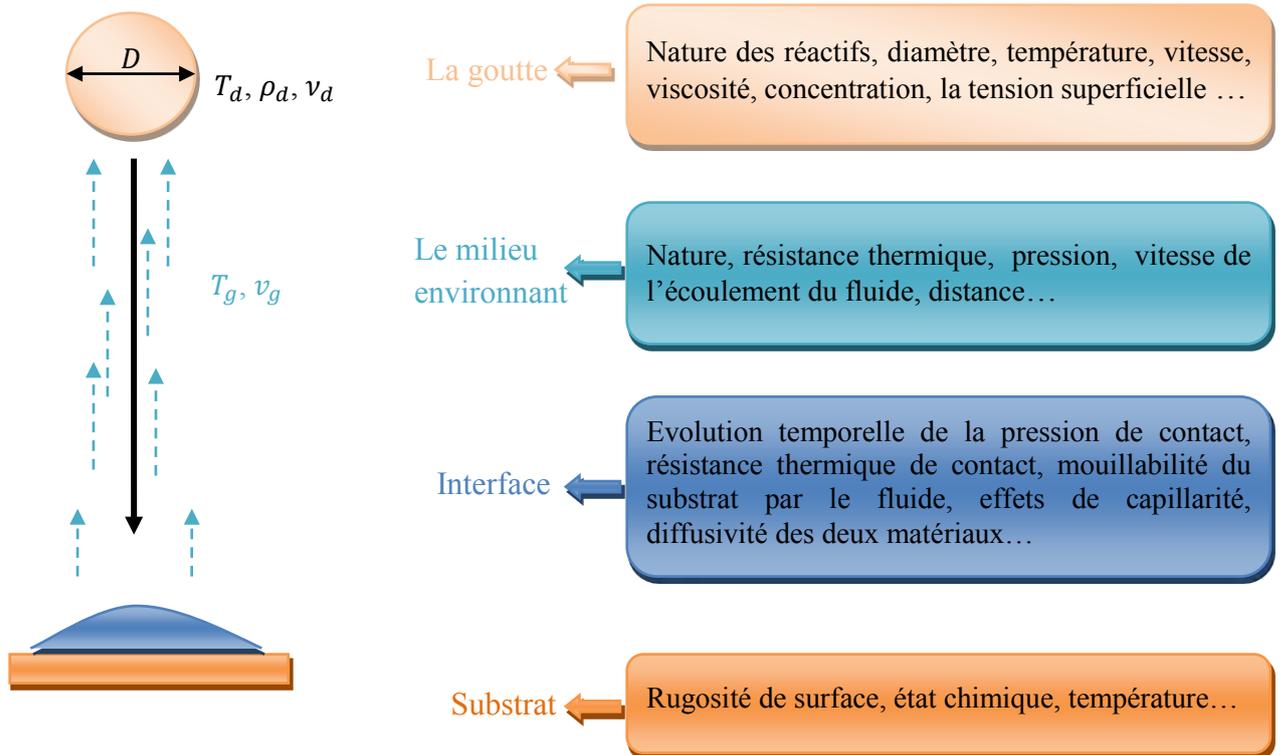


Fig. I. 5: Paramètres caractéristiques de la formation d'une couche mince.

I.2 La convection

I.2.1 Introduction

La convection est un mode de transport d'énergie par l'action combinée de la conduction, de l'accumulation de l'énergie et du mouvement du milieu. Elle est le mécanisme le plus important de transport d'énergie entre une surface solide et un liquide ou un gaz. Le transport d'énergie par convection d'une surface dont la température est supérieure à celle du fluide qui l'entoure s'effectue en plusieurs étapes. D'abord la chaleur s'écoule par conduction de la surface aux molécules du fluide adjacentes. L'énergie ainsi transmise sert à augmenter la

température et l'énergie interne de ces molécules du fluide. Ensuite les molécules vont se mélanger avec d'autres molécules situées dans une région à basse température et transférer une partie de leur énergie. Dans ce cas l'écoulement transporte, le fluide et l'énergie. L'énergie est, à présent, emmagasinée dans les molécules du fluide et elle est transportée sous l'effet de leur mouvement [8,9].

La transmission de chaleur par convection est désignée, selon le mode d'écoulement du fluide, par convection libre, convection forcée et convection mixte.

- La convection forcée

Le phénomène de la convection forcée apparaît quand le mouvement du fluide est imposé par une cause mécanique extérieure (pompe, ventilateur,...) au système [8].

- La convection naturelle

Le phénomène de convection naturelle thermique apparaît spontanément, sous le seul effet des différences de masse volumique résultantes des différences de températures sur les frontières et d'un champ de forces extérieures (le champ gravitationnel,...) [8]. La convection libre est pure si le mouvement n'est dû qu'à des effets thermiques (le choix de la vitesse caractéristique est arbitraire) [10].

- La convection mixte

La convection mixte correspond au couplage des deux phénomènes précédents (convection naturelle et forcée) quand la vitesse d'écoulement, fictives, dues aux deux types de convection sont considérées séparément, du même ordre de grandeur [8].

I.2.2 La convection naturelle

Lorsqu'un fluide se trouve en contact avec un corps chaud, sa température augmente et sa masse volumique diminue, et il se déplace (il monte) par rapport au corps chaud. Cet écoulement de fluide le long de ce corps chaud entraîne un phénomène de convection que l'on appelle naturelle ou libre. Si le fluide est plus chaud que le corps, l'écoulement se fera vers le bas mais il y aura toujours de la convection. Dans le cas de la convection forcée la vitesse moyenne était une donnée du problème. En convection naturelle, la vitesse du fluide dépend indirectement des conditions du problème. Il convient donc de trouver une expression qui représente cette vitesse. En convection libre comme en convection forcée, l'écoulement peut être laminaire ou turbulent et dépend de la distance à la surface du corps solide, des propriétés du fluide, de la force de pesanteur et de l'écart de température entre la surface et le fluide [9].

I.2.2.1 Classification des problèmes de convection naturelle

Dans le cas de la convection libre, les équations de quantité de mouvement et celles de l'énergie sont couplées. Ce fait rend l'étude de la convection libre délicate. Cependant certaines notions introduites lors de l'étude de la convection forcée pourront encore nous être utiles. Ainsi, tout comme la convection forcée, la convection libre peut être laminaire ou turbulente et on distinguera *les problèmes internes* (conduites, cavités) et *les problèmes externes*. Dans chacune de ces deux dernières catégories de nombreuses géométries ont été examinées [10].

I.2.2.2 Définition des termes de convection naturelle

- **Le coefficient d'expansion volumétrique (β)** : pour un fluide est le changement de volume de fluide avec la température à pression constante. Le coefficient d'expansion volumétrique est donné par : $\beta = (\partial V / \partial T)_P / V$ est à l'unité de l'inverse de température. Pour les gaz parfaits, $\beta = 1/T$ où T est la valeur absolue de la température du gaz en Kelvin [11].
- **La longueur caractéristique (L)** : est la longueur pour la quelle la convection est établi. Pour des plaques verticales et cylindriques; c'est la longueur de la plaque. Pour des cylindres ou la sphère c'est le diamètre. Finalement ; pour des plaques

horizontales la longueur caractéristique est le rapport entre la surface de la plaque et son périmètre [11].

- **Le nombre de Grashof (Gr):** est les forces ascensionnelles multipliées par forces d'inerties et divisées par les forces de viscosité à la puissance 2. Il remplace le nombre de Reynolds en convection naturelle [10] :

$$Gr = g\beta(T_w - T_0)l^3/\nu^2$$

Où g : L'accélération de pesanteur

T_w : La température de la surface

T_0 : La température du fluide

l : La longueur caractéristique (La longueur de la plaque)

ν : La viscosité cinématique du fluide

Le nombre Gr est utilisé pour déterminer le rapport importance des modes de transfert de chaleur par la convection. Si $Gr \ll Re^2$, le mode de la convection forcé est dominant. Pour $Gr \gg Re^2$, la convection naturelle est dominant.

- **Le nombre de Rayleigh (Ra):** est le produit des nombres de Grashof et de Prandtl $Ra = GrPr$ [11].

I.2.2.3 L'écoulement sur des plaques horizontales

Le coefficient de transfert de chaleur dans la convection naturelle sur des plaques rectangulaires horizontales dépend de l'orientation de la plaque avec le respect de température comme l'écoulement dépend des coté de la plaque comme schématisé sur la Fig. I.6 [11].

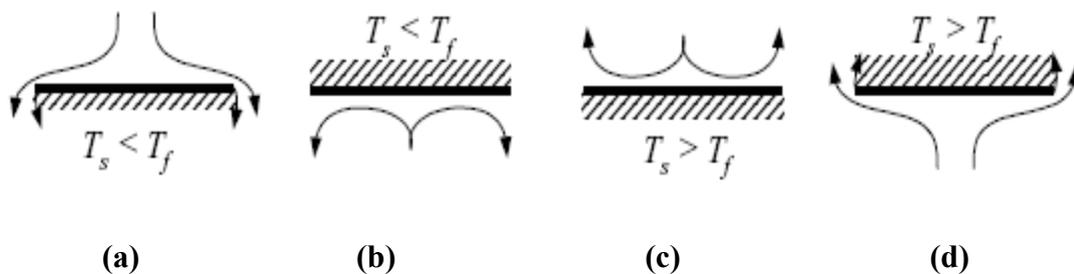


Fig. I.6. Les plaques horizontales dans la convection naturelle

Considérer par exemple une plaque horizontale froide dans un fluide plus chaud (a). Le fluide sur le dessus se déplacerait au-dessus de la plaque, obtient le refroidisseur, et coulerait en bas du côté du plaque. D'autres parts, dans le cas (b), le fluide s'écoule sous la plaque, il devient froid et de façon naturelle redescend vers le bas avec d'efficacité de transfert de chaleur dans le cas (b) que le cas (a). La même situation existe pour les cas (c) et (d) où le fluide froid s'écoule sur la plaque, il devient chaud et de façon libre s'écoule vert la haut où dans le cas (b), le fluide s'écoule sous la plaque, il devient chaud, et se déplace vers le haut seulement où il atteint les bords de la plaque [11].

Pour les plaques horizontales isothermes,

Dans les cas (b) et (c) où l'échange thermique est plus efficaces, de le nombre de Nusselt Nu peut être calculé par :

$$Nu = 0.54Ra^{0.25} \qquad 10^4 \leq Ra \leq 10^7$$

$$Nu = 0.15Ra^{0.33} \qquad 10^7 \leq Ra \leq 10^{11}$$

- Dans les cas moins efficaces de (a) et (d), le nombre Nu peut être calculé par :

$$Nu = 0.27 Ra^{0.25} \qquad 10^5 \leq Ra \leq 10^{10}$$

Dans ces corrélations, la longueur caractéristique L utilisé dans le calcul du nombre de Grashof est $L=A/P$ où A est la surface de la plaque et P le périmètre. Les propriétés du fluide dans les corrélations précédentes peuvent être évaluées à la température moyenne [11]:

$$T_m = (T_w + T_0)/2$$

Cas des plaques horizontales dans l'air, nous avons trouvé des relations proches aux précédents.



(A). Pour un flux descendant

$$Nu = 0.27(GrPr)^{1/4} \quad \text{Valable si} \quad 3.10^5 \leq GrPr \leq 3.10^{10}$$

(B). Pour un flux ascendant

$$Nu = 0.54(GrPr)^{1/4} \quad \text{Valable si} \quad 10^5 \leq GrPr \leq 2.10^7$$

$$Nu = 0.14(GrPr)^{1/3} \quad \text{Valable si} \quad 2.10^7 \leq GrPr \leq 3.10^{10}$$

I.2.2.4 Résumé des corrélations usuelles en convection naturelle

Comme le nombre de Reynolds n'est plus caractéristique de l'écoulement en convection libre, si la vitesse de référence est correctement choisie, on doit trouver une valeur critique du nombre de Grashof ou du nombre de Rayleigh. L'expérience prouve que cette valeur « critique » Gr_c se situe aux environs de 10^9 , mais la zone de transition est assez grande car elle va d'environ 10^6 à 10^{10} [10].

Dans le cas d'une convection sur des surfaces isothermes, la forme générale du nombre de Nusselt est:

$$\overline{Nu}_m = A. (Gr_m Pr_m)^n$$

Pour l'air $Pr = 0.7$ et $Nu_m = B. Gr^n$

L'indice m rappelle que les propriétés du fluide sont évaluées à la température moyenne T_m

La transition laminaire turbulente a lieu pour $Ra_c = 10^9$.

Nous donnons ci-dessous un tableau récapitulatif (Tab.I.1) des différentes valeurs et coefficients A,B,n

Géométrie	$Ra_m = Gr_m Pr_m$	A	n	B (cas de l'air)	Observation
Plans verticaux, hauteur L, et cylindres verticaux si $D/L \geq 35 Gr^{0.25}$	$< 10^4$ lam.	0.59	0.25	0.54	Gr évalué sur L
	10^4 à 10^9 lam. 10^9 à 10^{13} turb.	0.13	0.33	0.12	
Cylindres horizontaux diamètre D	$< 10^4$ lam.	0.53	0.25	0.49	Gr évalué sur D
	10^4 à 10^9 lam. 10^9 à 10^{13} turb.	0.13	0.33	0.12	
Surfaces planes horizontales : face sup. de plaque chaude (par rapport au fluide) Ou face inf. de plaque froide face inf. de plaque chaude (par rapport au fluide) Ou face sup. de plaque froide	10^5 à 2.10^7 lam.	0.54	0.25		Gr évalué sur L
	2.10^7 à 3.10^{10} turb.	0.14	0.33		
	3.10^5 à 10^{10}	0.27	0.25		

Tab.I.1 : Les différentes valeurs et coefficients A,B,n [10]

utilisées dans le calcul de numérique.

Chapitre II

*Etude numérique d'une convection
naturelle d'air sur une plaque horizontale
(substrat) chauffée*

Dans ce chapitre nous présentons le modèle physique et les hypothèses simplificatrices adaptées pour la résolution du problème. Nous formulons le problème physique régissant le phénomène de convection naturelle de l'air provoqué par une plaque chauffée.

Nous exprimons les équations de conservation et les conditions aux limites sous forme adimensionnelle et nous introduisons les principales grandeurs dynamique et thermique.

II.1 Les équations vectorielles de la convection naturelle

Les équations générales vectorielles (pouvant s'exprimer dans n'importe quel système de coordonnées) dans le cadre de l'approximation de Boussinesq; régissant le phénomène de la convection naturelle laminaire et permanente s'établissent comme suit [10]:

II.1.1 L'équation de continuité :

$$\text{div } \vec{v} = 0 \quad (\text{II.1})$$

II.1.2 L'équation de mouvement :

$$(\vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \vec{v} = \frac{1}{\rho_0} \overrightarrow{\text{grad}}(p - p_0) + \nu \Delta \vec{v} - \vec{g} \beta (T - T_0) \quad (\text{II.2})$$

II.1.3 L'équation d'énergie :

$$\vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} T = \frac{\nu}{Pr} \Delta T \quad (\text{II.3})$$

II.2 Formulation des équations en coordonnées cartésiennes

Pour un écoulement laminaire et permanent les équations de la convection naturelle en coordonnées cartésiennes bidimensionnelles sont:

II.2.1 L'équation de continuité :

L'équation de continuité déduite du principe de la conservation de masse s'exprime mathématiquement comme suit:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0$$

(II.4)

II.2.2 L'équation de mouvement :

Les équations de conservation de quantité de mouvement, connues sous le nom des équations de Navier-Stokes, s'écrivent comme suit [10,12]:

$$\frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial \rho uv}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \rho f_x \quad (\text{II.5})$$

$$\frac{\partial \rho vu}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \rho f_y \quad (\text{II.6})$$

où le symbole σ_{ij} est utilisé pour désigner les contraintes tangentielles et f_x, f_y les composantes des forces volumiques par unité de masse.

II.2.3 L'équation d'énergie :
$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\nu}{Pr} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (\text{II.7})$$

ν : est la viscosité cinématique

Pr : est le nombre de Prandtl

II.3 Représentation du domaine d'étude

Le fluide considéré est l'air confiné dans un domaine de forme carré. Les dimensions de ce domaine d'étude sont la hauteur **H**, la longueur **L**. La face inférieure est décomposée en trois parties : au centre une plaque plane horizontale (porte substrat) chauffée à des températures fixes dans le domaine $T_w = 200^\circ\text{C} - 400^\circ\text{C}$, de longueur ($l = l_2 - l_1 = 40\text{cm}$) et d'épaisseur négligeable, les côtés gauche et droit sont considérés à la température ambiante, les autres faces sont à l'air libre ($T_0 = 20^\circ\text{C}$) et à la pression atmosphérique. Nous nous retrouvons dans le cas (d) de la figure I.6 précédente. Le domaine choisi pour l'étude de la convection naturelle est représenté dans la figure **(Fig. II.1)**.

Dans le but de choisir des conditions aux limites proches de la réalité afin de ne pas influencer sur les calculs nous avons sélectionné un domaine d'étude assez large par rapport aux dimensions du substrat de manière à ce que la quasi-totalité de l'écoulement de l'air soit incluse dans ce domaine.

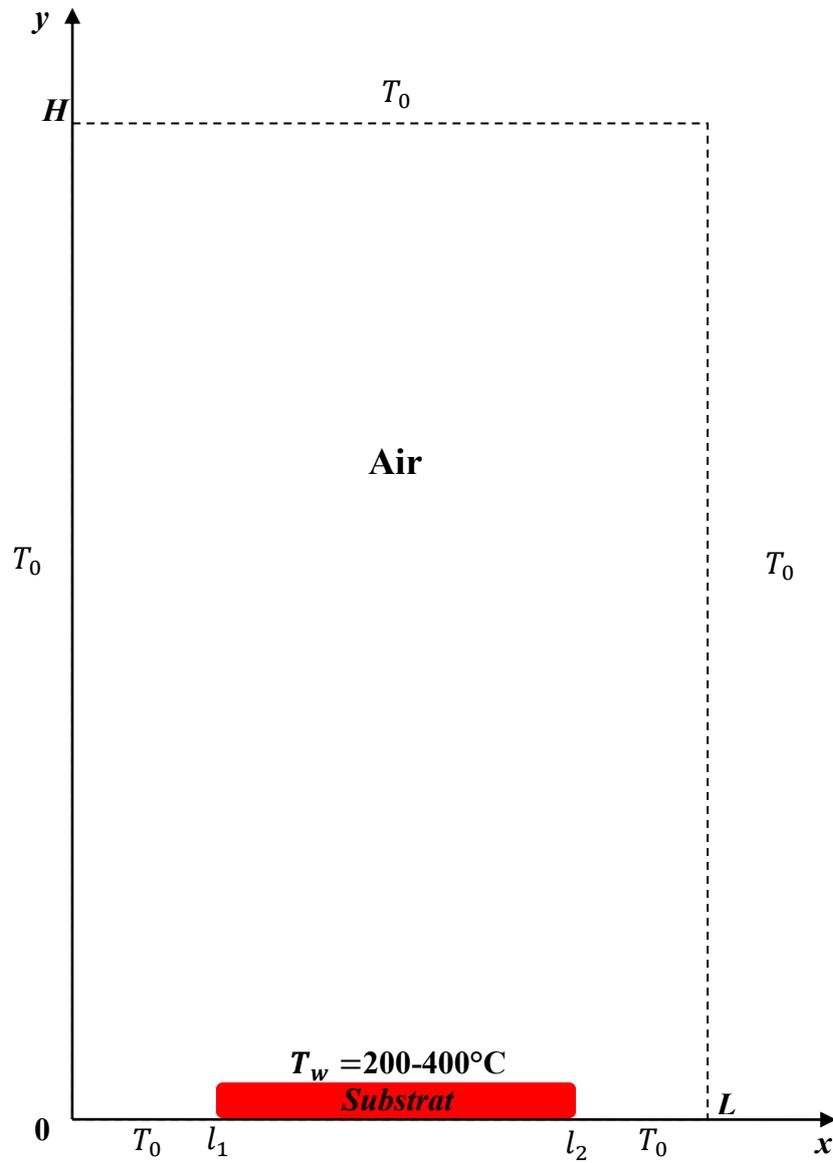


Fig. II.1 : Représentation schématique du domaine d'étude et des conditions aux limites associées.

II.4 Modélisation mathématique

En convection purement thermique, les variables primitives de l'écoulement sont, les composantes de la vitesse, la pression et la température. L'écoulement à étudier est simplifié en considérant les hypothèses simplificatrices suivantes :

- L'écoulement est :
 - Bidimensionnel
 - Stationnaire
 - Laminaire
- Le fluide (Air) est :
 - Newtonien
 - incompressible
- Il n'y a pas de source de chaleur.
- Les variations des différentes caractéristiques du fluide (viscosité; conductivité thermique et la chaleur massique à pression constante ...etc.) en fonction de la température sont négligeables avec la prise en compte de l'approximation de Boussinesq.
- L'approximation de Boussinesq est valide, celle-ci consiste à considérer que les variations de la masse volumique sont négligeables dans tous les termes des équations de quantités de mouvement ($\rho = \rho_0$), sauf au niveau du terme de gravité. Dans ce dernier la variation de la masse volumique ρ en fonction de la température est donnée par [9]:
$$\rho = \rho_0(1 - \beta(T - T_0))$$

ρ_0 : La masse volumique de fluide à la température de référence (de l'air) T_0 .

β : Le coefficient de dilatation thermique.
- La température de la plaque est supposée uniforme.

- $H \gg l$, ce qui nous permet de supposer qu'en dehors de ce domaine les paramètres physiques ($T, P, \rho \dots$) sont quasi-constants.

II.5 Formulation du problème étudié

Le système d'équations qui gouverne l'écoulement laminaire et permanent ainsi que le transfert de chaleur en coordonnées cartésiennes relatifs à la convection naturelle, après simplifications, s'écrivent comme suit :

II.5.1 L'équation de continuité :
$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{II.8})$$

II.5.2 L'équation de mouvement :

Selon (ox) :

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (\text{II.9})$$

Selon (oy) :

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + g \beta (T - T_0) \quad (\text{II.10})$$

II.5.3 L'équation d'énergie :
$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\nu}{Pr} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (\text{II.11})$$

II.6 Conditions aux limites

En $y = 0$:

$$0 \leq x < l_1 \text{ et } l_2 < x \leq L ; u = 0 \text{ et } v = V_0 \quad (\text{Imposée au départ et réajusté par}$$

le bilan de conservation de masse)

$$T = T_0 \quad (T_0 = 20^\circ\text{C})$$

$$l_1 \leq x \leq l_2 ; u = 0 \text{ et } v = 0$$

$$T = T_w \quad (T_w = 200 - 400^\circ\text{C}) \quad (\text{II.13})$$

En $y = H$:

$0 \leq x \leq L$; $u = 0$ et $v = v_H$ (On considère un écoulement ascendant et uniforme ; $v_H = V_0 \frac{2\rho_1 l_1}{\rho_1 L}$; débit massique d'entrée = débit massique de sortie)

$$T = T_0 \quad (T_0 = 20^\circ C) \quad (II.14)$$

En $x = 0$:

$$0 < y < H ; T = T_0 \quad (T_0 = 20^\circ C) \quad (II.15)$$

En $x = L$:

$$0 < y < H ; T = T_0 \quad (T_0 = 20^\circ C) \quad (II.16)$$

II.7 Formulation adimensionnelle

L'emploi des variables adimensionnelles permet d'exprimer la réalité des phénomènes physiques indépendamment des systèmes de mesure, pour permettre d'avoir des informations généralisées à une variété des problèmes ayant les mêmes grandeurs de coefficient de similitudes d'un coté, et d'un autre coté, réduire le nombre de paramètres d'un problème.

En effet, pour faire apparaître les paramètres de contrôle du problème étudié, il est nécessaire d'avoir les grandeurs de référence.

II.7.1 Principales grandeurs physiques et variables adimensionnelles

Le nombre de Prandtl, le nombre de Grashof sont définis par :

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda} , \quad Gr = \frac{g \beta l^3 (T_w - T_0)}{\nu^2} \quad (II.17)$$

Les variables adimensionnelles choisies sont :

$$X = \frac{x}{l} , \quad Y = \frac{y}{l} , \quad \theta = \frac{T - T_0}{T_w - T_0} , \quad U = \frac{u}{(\nu/l)} , \quad V = \frac{v}{(\nu/l)} , \quad P = \frac{p}{\rho_0 (\nu/l)^2} \quad (II.18)$$

$\frac{\nu}{l}$: Représente la vitesse caractéristique de l'écoulement de fluide (air). (m/s)

II.7.2 Équations adimensionnelles:

Les équations adimensionnelles de continuité, de quantité de mouvement et d'énergie qui gouvernent le phénomène de convection naturelle s'écrivent alors :

II.7.2.1 L'équation de continuité :
$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0 \quad (\text{II.19})$$

II.7.2.2 L'équation de mouvement :

Selon (OX) :

$$U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} = -\frac{\partial P}{\partial X} + \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \right) \quad (\text{II.20})$$

Selon (OY) :

$$U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} = -\frac{\partial P}{\partial Y} + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} \right) + Gr \cdot \theta \quad (\text{II.21})$$

II.7.2.3 L'équation d'énergie :

$$U \frac{\partial \theta}{\partial X} + V \frac{\partial \theta}{\partial Y} = \frac{1}{Pr} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} \right) \quad (\text{II.22})$$

II.7.3 Conditions aux limites :

En $Y = 0$:

$$0 \leq X < \frac{l_1}{l} \text{ et } \frac{l_2}{l} < X \leq \frac{L}{l}; \quad U = 0 \quad V = 1 \quad \theta = 0$$

$$\frac{l_1}{l} \leq X \leq \frac{l_2}{l}; \quad U = 0 \text{ et } V = 0 \quad \theta = 1 \quad (\text{II.23})$$

En $Y = \frac{H}{l}$:

$$0 \leq X \leq \frac{L}{l}; \quad U = 0 \text{ et } V = \frac{v_H}{(v/l)} \quad \theta = 0 \quad (\text{II.24})$$

En $X = 0$:

$$0 < Y < \frac{H}{l}; \quad \theta = 0 \quad (\text{II.25})$$

En $X = \frac{L}{l}$:

$$0 < Y < \frac{H}{l}; \quad \theta = 0 \quad (\text{II.26})$$

II.8 Modélisation numérique

Le système d'équations aux dérivées partielles du problème formulées précédemment est résolu numériquement par la méthode des volumes finis (qui est l'une des méthodes de discrétisation des équations différentielles aux dérivées partielles telles que : la méthode des volumes finis, des différences finis est des éléments finis,...etc.) où la correction de la pression et de la vitesse est obtenue par l'algorithme SIMPLE. Cette discrétisation est l'opération de transformer ces équations différentielles en un système d'équations algébriques et qui donne un système matriciel tridiagonal dont la résolution est obtenue par l'application de l'algorithme de Thomas [13].

II.8.1 Méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis est caractérisée par son avantage à satisfaire la conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie dans tous les volumes finis ainsi que dans tout le domaine de calcul. Elle facilite la linéarisation des termes non linéaires dans les équations de conservation tel que le terme source par exemple (Annexe I). La méthode consiste à partager le domaine de calcul en plusieurs volumes, où chaque volume entoure un nœud. En utilisant différents schémas d'approximations on peut intégrer les termes des équations différentielles modélisantes sur chaque volume de contrôle, où les valeurs et les quantités sont stockées aux nœuds du volume de contrôle [13].

Ces équations algébriques produites expriment la conservation des quantités physiques pour le volume de contrôle et pour tout le domaine de calcul.

II.8.2 Equations générales de transport

L'équation générale de transport d'une variable ϕ pour un écoulement incompressible s'écrit dans le système cartésien comme suit :

$$\underbrace{\text{div}(\bar{V} \cdot \phi)}_1 = \underbrace{\Gamma \cdot (\nabla^2 \phi)}_2 + \underbrace{S_\phi}_3 \quad (\text{II.27})$$

1 : représente le terme de transport par convection.

2 : représente le terme de transport par diffusion.

3 : représente le terme de source.

tels que : \vec{V} : est le vecteur de vitesse.

Γ : est le coefficient de diffusion

$$\nabla^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) : \text{Le laplacien en bidimensionnel}$$

Dans le tableau suivant, nous donnons la définition de ϕ , Γ et S_ϕ pour les équations qui gouvernent notre problème général.

Equation	ϕ	Γ	S_ϕ
Quantité de mouvement suivant (OX)	U	1	$-\frac{\partial P}{\partial x}$
Quantité de mouvement suivant (OY)	V	1	$-\frac{\partial P}{\partial y} + Gr \cdot \theta$
Energie	θ	$\frac{1}{Pr}$	0
Continuité	1	0	0

Tableau. II. 1 : Les variables et les coefficients des équations de transport adimensionnelles.

II.8.3 Maillage

Le domaine de calcul est divisé en une série de sous domaines appelés volume de contrôle. Ces volumes enveloppent tout le domaine de calcul, de telle façon que la somme de leurs volumes soit exactement égale au volume du domaine de calcul.

Le schéma du maillage adopté est du type décalé, proposé par Patankar [13]. Un point est positionné au centre de chaque volume est appelé centre du volume de contrôle, il sera noté P . (**Fig. II.2**)

Les nœuds des volumes voisins seront notés suivant leurs positions N , S , W et E (se rapportant aux directions North, South, West et East respectivement). Les faces d'un volume de contrôle sont localisées aux points e , w , n et s . Les quantités scalaires (pression et température) sont stockées aux centres des volumes finis. Par contre, les composantes de la vitesse sont localisées aux faces des volumes finis.

Ce volume de contrôle est utilisé pour l'expression des bilans des grandeurs scalaires, appelé volume de contrôle principal (**Fig. II.3**), et pour l'expression des grandeurs vectorielles, on utilise un volume de contrôle décalé (**Fig. II.4**) et (**Fig. II.5**).

On utilise un maillage non uniforme dans lequel les mailles sont plus larges là où les grandeurs sont plus faibles.

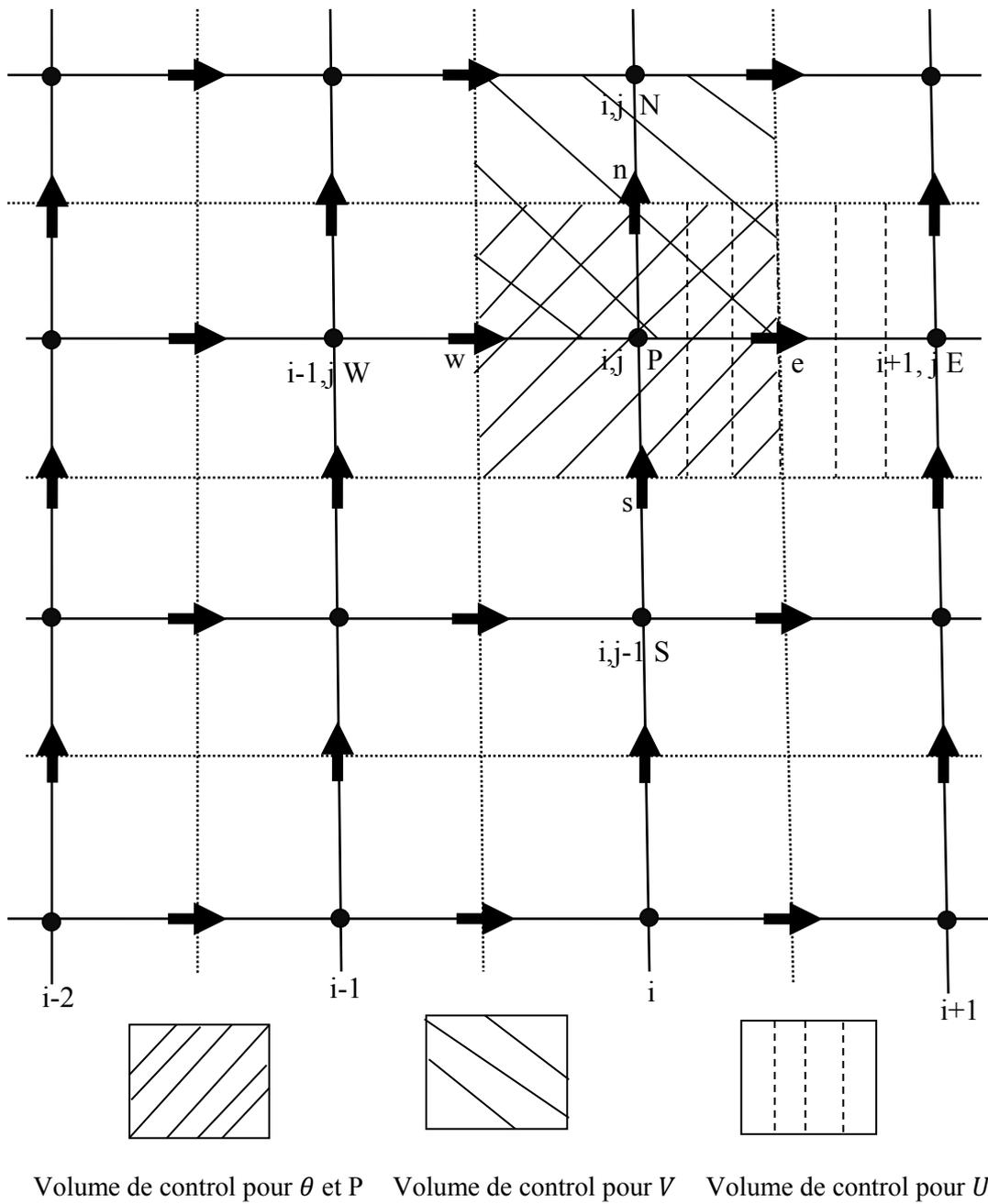


Fig. II.2 : Schéma des différents volumes de contrôle.

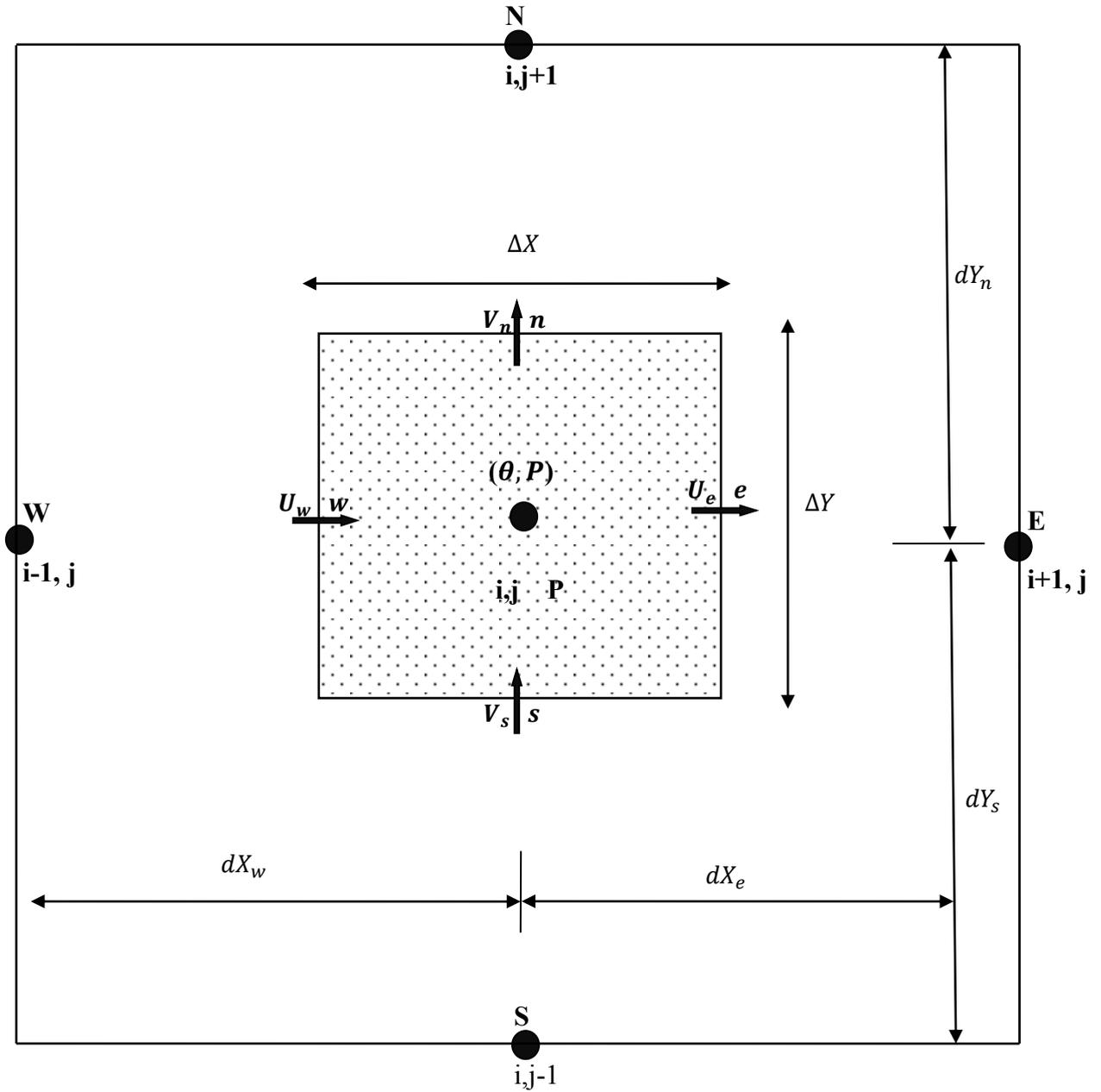


Fig. II.3 : volume de contrôle typique.

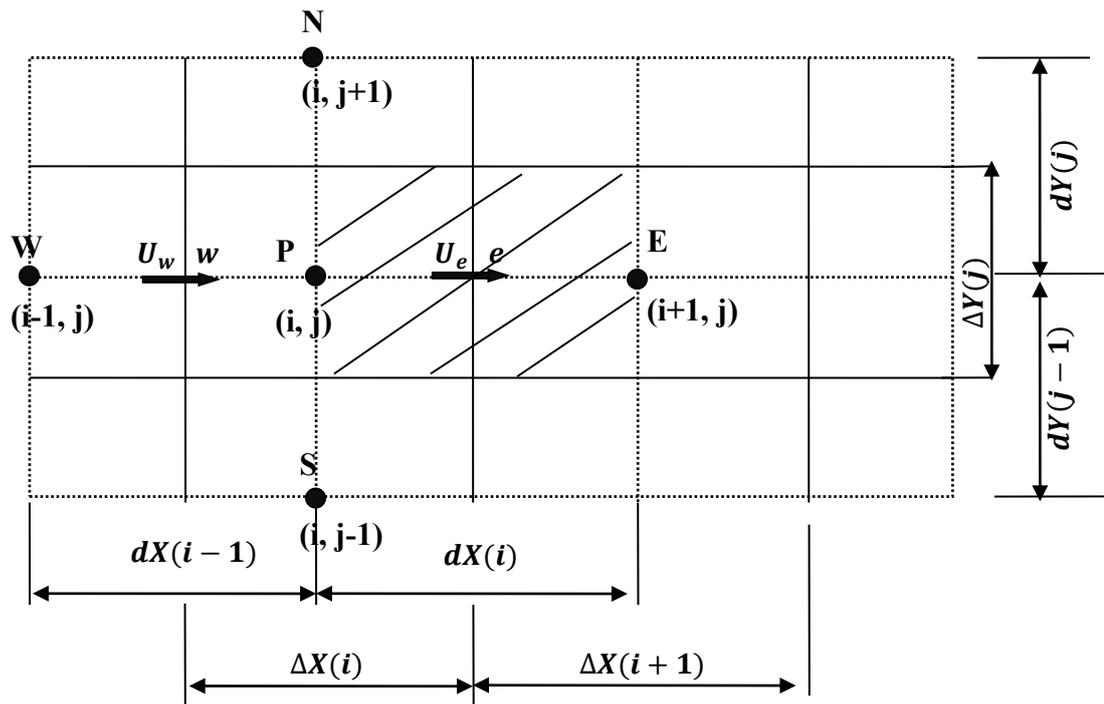


Fig. II.4 : volume de contrôle typique décalé vers la droite.

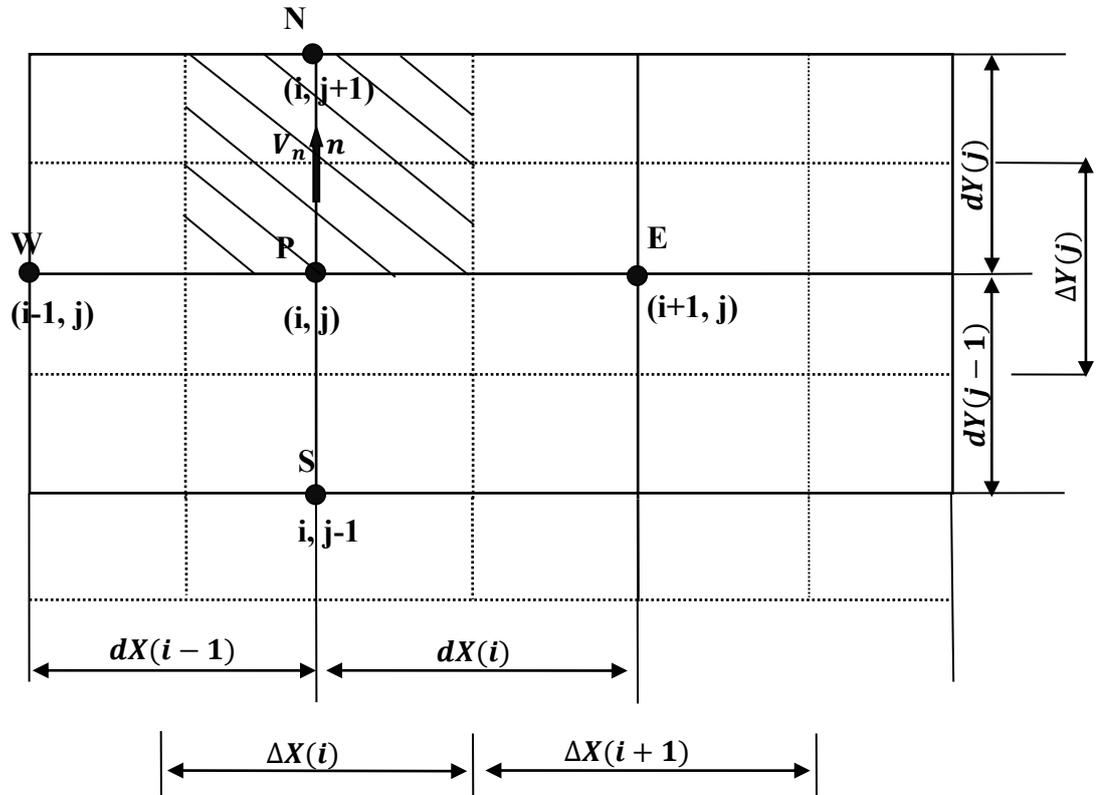


Fig. II.5 : volume de contrôle typique décalé vers le haut.

II.9 Discrétisation des équations de conservation

Les équations de conservation (II.8 –II.11), autrement dit l'équation sous la forme générale (II.27) a été intégrée sur le volume de contrôle $dV = dX. dY. 1$ (**Fig. II.3**).

L'intégration de l'équation (II.27), donne.

$$\oint \text{div}(\phi. \vec{V}). dX. dY = \oint (\Gamma. \nabla^2 \phi + S_\phi). dX. dY \quad (\text{II.28})$$

$$\begin{aligned} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial X} (U. \phi) dX. dY + \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial Y} (V. \phi) dX. dY = \\ \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial X} \left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial X} \right) dX. dY + \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial Y} \left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right) dX. dY + \int_s^n \int_w^e S_\phi dX. dY \end{aligned} \quad (\text{II.29})$$

Le terme convectif :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial X} (U. \phi) dX. dY = \int_s^n [U. \phi]_w^e. dY = [(U. \phi)_e - (U. \phi)_w]. Y \quad (\text{II.30})$$

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial Y} (V. \phi) dX. dY = \int_w^e [V. \phi]_s^n. dX = [(V. \phi)_n - (V. \phi)_s]. X$$

Le terme diffusif :

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial X} \left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial X} \right) dX. dY = \int_s^n \left[\left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial X} \right)_e - \left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial X} \right)_w \right]. dY = \left[\left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial X} \right)_e - \left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial X} \right)_w \right]. Y \quad (\text{II.31})$$

$$\int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial Y} \left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right) dX. dY = \int_w^e \left[\left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right)_n - \left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right)_s \right]. dX = \left[\left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right)_n - \left(\Gamma. \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right)_s \right]. X$$

Le terme de source :

$$\int_s^n \int_w^e S_\phi dX. dY = \overline{S_\phi}. \Delta X. \Delta Y \quad (\text{II.32})$$

L'équation (II.28), s'écrit alors :

$$\begin{aligned} & [(U \cdot \phi)_e - (U \cdot \phi)_w] \cdot Y + [(V \cdot \phi)_n - (V \cdot \phi)_s] \cdot X = \\ & \left[\Gamma \cdot \left(\frac{\partial \phi}{\partial X} \right)_e - \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial X} \right)_w \right] \cdot Y + \left[\left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right)_n - \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right)_s \right] \cdot X + \overline{S_\phi} \cdot \Delta X \cdot \Delta Y \end{aligned} \quad (II.33)$$

Le terme source $\overline{S_\phi}$ dans chaque équation de conservation doit être linéarisé afin que tout le système d'équation prenne la forme linéarisé et la résolution devient ainsi simplifiée. Donc le terme $\overline{S_\phi}$ peut se mettre sous la forme suivante:

$$\overline{S_\phi} = S_c + S_p \quad (II.34)$$

S_p doit être négatif afin de répondre aux règles de la méthode des volumes finis (Patankar 1980) et faciliter ainsi la convergence du système (la diagonale de la matrice du système à résoudre devient dominante) [13].

Où S_p : est le coefficient de ϕ_p .

S_c : est la partie constante de S_ϕ qui ne dépend pas de ϕ_p .

Pour évaluer les ϕ aux interfaces des volumes de contrôle on utilise un des schémas de discrétisation (Différences centrées, Upwind, exponentiel, power law, hybride, quick,...). Ces schémas diffèrent par la façon avec laquelle, on prend en compte les termes de convection et de diffusion. Pour les flux aux interfaces des volumes de contrôle on choisit une interpolation entre les nœuds voisins.

Dans notre étude, on utilisera le schéma numérique des différences centrées. ce schéma donne des résultats physiquement acceptable pour des rapports $\frac{|F|}{D} < 2$ c.-à-d. pour des petits nombres de Reynolds et si le critère de Scarborough est vérifié c.-à-d. les coefficients négatifs de a_p qui est égales $\sum a_{nb}$ est inférieur à $\sum |a_{nb}|$ [14].

II.10 Application d'un schéma numérique quelconque

La discrétisation des équations permet d'obtenir un système d'équation dont la forme algébrique générale est :

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (\text{II.35})$$

Ou

$$a_P \phi_P = \sum (a_{nb} \phi_{nb}) + b \quad (\text{II.36})$$

Tels que : ϕ est la variable dans l'équation concernée.

Les indices (nb) représentent les nœuds voisins du nœud principal désigné par la lettre P .

Les coefficients a_P et a_{nb} sont calculés avec l'une des méthodes aux problèmes de convection-diffusion (Différences centrées, Upwind, exponentiel, power law, hybride, quick,...).

Dans l'équation (II.35) on a :

$$a_P = \sum a_{nb} - S_p \cdot \Delta X \cdot \Delta Y \quad (\text{II.37})$$

$$a_E = D_e A(|P_e|) + \max(-F_e, 0) \quad (\text{II.38})$$

$$a_W = D_w A(|P_w|) + \max(F_w, 0) \quad (\text{II.39})$$

$$a_N = D_n A(|P_n|) + \max(-F_n, 0) \quad (\text{II.40})$$

$$a_S = D_s A(|P_s|) + \max(F_s, 0) \quad (\text{II.41})$$

$$b = S_c \Delta X \cdot \Delta Y \quad (\text{II.42})$$

Où la fonction $A(|P|)$ décrit le schéma utilisé.

Le schéma des différences centrées est donné par la fonction suivante :

$$A(|P_i|) = 1 - 0.5|P_i| \quad (\text{II.43})$$

$$(i = e, w, n, s)$$

Les coefficients de l'équation (II.35) contiennent une combinaison du flux convectif F et de la conductance de diffusion D pour chaque interface e, w, n et s du volume de contrôle sont données par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} F_e &= U_e \cdot \Delta Y \\ F_w &= U_w \cdot \Delta Y \\ F_n &= V_n \cdot \Delta X \\ F_s &= V_s \cdot \Delta X \end{aligned} \tag{II.44}$$

Et

$$\begin{aligned} D_e &= \frac{\Gamma_e}{dx_e} \cdot \Delta Y \\ D_w &= \frac{\Gamma_w}{dx_w} \cdot \Delta Y \\ D_n &= \frac{\Gamma_n}{dy_n} \cdot \Delta X \\ D_s &= \frac{\Gamma_s}{dy_s} \cdot \Delta X \end{aligned} \tag{II.45}$$

a_E, a_W, a_N, a_S et a_P : sont les coefficients correspondants, respectivement, aux nœuds Est, Ouest, Nord et Sud et centre de volume de contrôle.

b : est un terme de source.

F_e, F_w, F_n et F_s : sont les termes convectifs correspondants, respectivement, aux faces Est, Ouest, Nord et Sud.

$$\begin{aligned} P_e &= \frac{F_e}{D_e} \\ P_w &= \frac{F_w}{D_w} \\ P_n &= \frac{F_n}{D_n} \\ P_s &= \frac{F_s}{D_s} \end{aligned} \tag{II.46}$$

P_e, P_w, P_n et P_s : sont les rapports du flux convectif au flux diffusif aux différent faces du volume de contrôle.

Si l'on exprime l'équation (II.35) en fonction du nouveau système de coordonnées (de numérotation des nœuds, **Fig. II.2**), l'équation générale (II.35) s'écrit donc sous forme indicée.

$$\begin{aligned} a_P(i,j) \cdot \phi_P(i,j) = & a_W(i,j) \cdot \phi_W(i-1,j) + a_E(i,j) \cdot \phi_E(i+1,j) \\ & + a_N(i,j) \cdot \phi_N(i,j+1) + a_S(i,j) \cdot \phi_S(i,j-1) + b(i,j) \end{aligned} \quad (\text{II.47})$$

• **Equation de quantité de mouvement**

➤ **Selon (OX) :**

$$\begin{aligned} a_P(i,j) \cdot U(i,j) = & a_W(i,j) \cdot U(i-1,j) + a_E(i,j) \cdot U(i+1,j) \\ & + a_N(i,j) \cdot U(i,j+1) + a_S(i,j) \cdot U(i,j-1) + b(i,j) \end{aligned} \quad (\text{II.48})$$

Avec

$$a_E(i,j) = D_e A(|P_e|) + \max(-F_e, 0)$$

$$a_W(i,j) = D_w A(|P_w|) + \max(F_w, 0) \quad (\text{II.49})$$

$$a_N(i,j) = D_n A(|P_n|) + \max(-F_n, 0)$$

$$a_S(i,j) = D_s A(|P_s|) + \max(F_s, 0)$$

$$b(i,j) = [P(i,j) - P(i+1,j)] \cdot \Delta Y(j) \quad (\text{II.50})$$

$$a_P(i,j) = a_E(i,j) + a_W(i,j) + a_N(i,j) + a_S(i,j) \quad (\text{II.51})$$

Les flux convectifs :

$$F_e = \frac{1}{2} [U(i+1,j) + U(i,j)] \cdot \Delta Y(j)$$

$$F_w = \frac{1}{2}[U(i-1, j) + U(i, j)]. \Delta Y(j) \quad (\text{II.52})$$

$$F_n = \frac{1}{2}[V(i+1, j) + V(i, j)]. dX(i)$$

$$F_s = \frac{1}{2}[V(i+1, j-1) + V(i, j-1)]. dX(i)$$

Les flux diffusifs :

$$D_e = \frac{\Delta Y(j)}{\Delta X(i+1)}$$

$$D_w = \frac{\Delta Y(j)}{\Delta X(i)}$$

$$D_n = \frac{dX(i)}{dY(j)} \quad (\text{II.53})$$

$$D_s = \frac{dX(i)}{dY(j-1)}$$

- Selon (OY) :

$$\begin{aligned} a_P(i, j). V(i, j) = & a_W(i, j). V(i+1, j) + a_E(i, j). V(i-1, j) \\ & + a_N(i, j). V(i, j+1) + a_S(i, j). V(i, j-1) + b(i, j) \end{aligned} \quad (\text{II.54})$$

Avec

$$a_E(i, j) = D_e A(|P_e|) + \max(-F_e, 0)$$

$$a_W(i, j) = D_w A(|P_w|) + \max(F_w, 0)$$

$$a_N(i, j) = D_n A(|P_n|) + \max(-F_n, 0) \quad (\text{II.55})$$

$$a_S(i, j) = D_s A(|P_s|) + \max(F_s, 0)$$

$$\begin{aligned} b(i, j) = & [P(i, j) - P(i, j+1)]. \Delta X(i) \\ & + 0.5[\theta(i, j) + \theta(i, j+1)]. Gr. \Delta X(i). dY(j) \end{aligned} \quad (\text{II.56})$$

$$a_P(i, j) = a_E(i, j) + a_W(i, j) + a_N(i, j) + a_S(i, j) \quad (\text{II.57})$$

Les flux convectifs :

$$\begin{aligned}F_e &= \frac{1}{2}[U(i, j + 1) + U(i, j)]. dY(j) \\F_w &= \frac{1}{2}[U(i - 1, j + 1) + U(i - 1, j)]. dY(j) \\F_n &= \frac{1}{2}[V(i, j + 1) + V(i, j)]. \Delta X(i) \\F_s &= \frac{1}{2}[V(i, j - 1) + V(i, j)]. \Delta X(i)\end{aligned}\tag{II.58}$$

Les flux diffusifs :

$$\begin{aligned}D_e &= \frac{dY(j)}{dX(i)} \\D_w &= \frac{dY(j)}{dX(i-1)} \\D_n &= \frac{\Delta X(i)}{\Delta Y(j+1)} \\D_s &= \frac{\Delta X(i)}{\Delta Y(j)}\end{aligned}\tag{II.59}$$

• **Equation d'énergie**

$$\begin{aligned}a_P(i, j). \theta(i, j) &= a_W(i, j). \theta(i - 1, j) + a_E(i, j). \theta(i + 1, j) \\&+ a_N(i, j). \theta(i, j + 1) + a_S(i, j). \theta(i, j - 1) + b(i, j)\end{aligned}\tag{II.60}$$

Avec

$$\begin{aligned}a_E(i, j) &= D_e A(|P_e|) + \max(-F_e, 0) \\a_W(i, j) &= D_w A(|P_w|) + \max(F_w, 0) \\a_N(i, j) &= D_n A(|P_n|) + \max(-F_n, 0) \\a_S(i, j) &= D_s A(|P_s|) + \max(F_s, 0)\end{aligned}\tag{II.61}$$

$$b(i, j) = 0 \quad (\text{II.62})$$

$$a_p(i, j) = a_E(i, j) + a_W(i, j) + a_N(i, j) + a_S(i, j) \quad (\text{II.63})$$

Les flux convectifs :

$$F_e = U(i, j) \cdot \Delta Y(j)$$

$$F_w = U(i - 1, j) \cdot \Delta Y(j)$$

$$F_n = V(i, j) \cdot \Delta X(i) \quad (\text{II.64})$$

$$F_s = V(i, j - 1) \cdot \Delta X(i)$$

Les flux diffusifs :

$$D_e = \frac{1}{Pr} \cdot \frac{\Delta Y(j)}{dX(i)}$$

$$D_w = \frac{1}{Pr} \cdot \frac{\Delta Y(j)}{dX(i-1)}$$

$$D_n = \frac{1}{Pr} \cdot \frac{\Delta X(i)}{dY(j)} \quad (\text{II.65})$$

$$D_s = \frac{1}{Pr} \cdot \frac{\Delta X(i)}{dY(j-1)}$$

Chapitre III

*Etude numérique de la chute d'une
gouttelette dans un milieu gazeux chauffé*

Pendant l'étape du processus d'atomisation, l'échange massique et l'échange d'énergie entre le gaz et les gouttelettes peut avoir un grand effet sur la température, la vitesse, le taux d'évaporation et la taille de gouttelettes [15]. Les effets de ces conditions ont été étudiés par le modèle actuel, ce qui permettra, plus tard, d'avoir les meilleures conditions de déplacement de gouttelettes dans un milieu chauffé vers le substrat pour l'élaboration de bonnes couches minces.

III.1 Présentation du modèle

Un jet en spray d'une solution chimique (eau avec le chlorure de zinc) dans un écoulement d'air chauffé (soit la température T_g du milieu constante ou elle varie avec la hauteur entre le bec et le substrat $T_g(y)$ et $v_g(y)$, chapitre II) de concentration C_g à contre courant. Les gouttelettes ($T_d, v_d, \rho_d, \nu_d \dots$) sont sphériques, sortent du bec avec un diamètre initial ($D_{dini} = 40\mu\text{m}$), vitesse initiale nulle ($v_{dini} = 0$). Elles sortent du bec à la température ambiante de $T_{dini} = 20^\circ\text{C}$ chute verticalement vers un substrat chaud porte à une température T_w ($T_w = 200 - 400^\circ\text{C}$, chapitre II). On va essayer de faire une étude numérique pour avoir l'effet de l'écoulement d'air environnant sur la taille, la dynamique et le transfert de chaleur pendant la chute d'une gouttelette. La (Fig.III.1) schématise le parcours de la gouttelette d'une solution chimique quelconque.

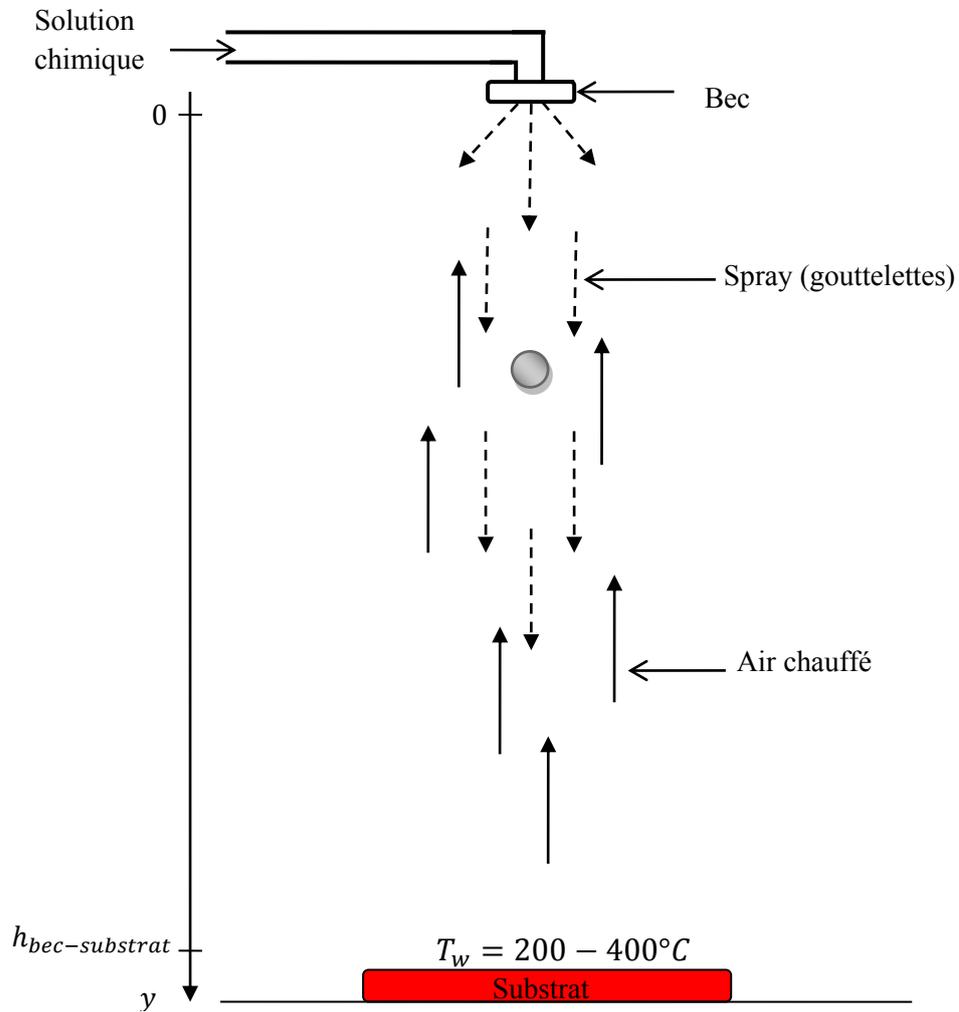


Fig.III.1 : Ecoulement d'air contre courant de spray (chute des gouttelettes)

III.2 Les hypothèses simplificatrices :

Le système étudié est basé sur les hypothèses simplificatrices suivantes :

- ✓ La goutte :
 - Jet en spray d'une solution chimique (liquide : eau ; solide : Chlorure de Zinc).
 - Reste sphérique pendant la chute.
 - Tous les paramètres sont uniformes dans la goutte.
 - Les propriétés thermodynamiques de la goutte sont variables.
 - La chute est dans le sens de la gravité.
 - La gouttelette est chauffée par la convection du gaz environnant.

- ✓ Le fluide :
 - Air
 - Les propriétés thermodynamiques de l'air sont variables.
 - L'écoulement d'air est supposé :
 - Newtonien
 - Laminaire
 - Incompressible
 - L'écoulement d'air est contre courant de spray.

- ✓ Autour de la goutte :
 - Les transferts de chaleur et de masse entre la goutte et le gaz environnant sont considérés comme « quasi-stationnaires ».
 - L'échange de chaleur par rayonnement est supposé négligeable.

L'évaporation d'une gouttelette dans le jet peut causer des changements cruciaux dans la distribution des grandeurs. On le supposera que le taux de perte de liquide par évaporation dépend des propriétés de la surface de gouttelette, de la pression de vapeur du liquide et de la concentration en vapeur dans l'environnement de la gouttelette. Des effets importants additionnels peuvent être produits au cours du mouvement de la gouttelette [3].

III.3 Les équations d'évaporation d'une gouttelette

Une gouttelette de forme sphérique sorte du bec avec une température uniforme T_d , elle chute dans un écoulement d'air chauffé de concentration C_g et de température T_g . Au contact de la surface de la gouttelette, la concentration en vapeur C_d correspond à l'état de saturation à la température T_d . Il se produit simultanément un transfert de chaleur, appelé « *transfert de chaleur sensible* », dû à l'écart de température entre la gouttelette et l'air (par convection), et un transfert de masse, dû au gradient de la pression de vapeur de l'air. Ce transfert de masse s'accompagne d'un transfert de chaleur, appelé « *transfert de chaleur latente* ($L_v \frac{dm_l}{dt}$) », puisque la vaporisation de $1kg$ d'eau nécessite $L_v(T_d)$. $L_v(T_d)$ étant la chaleur latente de vaporisation à la température T_d [10]. Les équations qui caractérisent ces échanges sur la surface de la gouttelette sont les suivantes :

III.3.1 L'équation de taux d'évaporation (transfert de masse):

Le changement de la masse de la goutte dû au gradient de pression de vapeur de l'air (la concentration entre la surface de la gouttelette et l'air environnant) [10] est décrit par l'équation suivante [16,3]:

$$\dot{m}_l = \frac{dm_l}{dt} = k_m S (C_d - C_g) \quad (\text{III.1})$$

Avec

\dot{m}_l : Débit d'eau évaporée sur la surface de la goutte ou le taux de vaporisation (kg/s).

m_l : La masse du liquide dans la goutte (eau).

S : La surface superficielle de la goutte ($S = 4\pi R_d^2$) (m^2).

C_d et C_g Sont respectivement les concentrations de la vapeur d'eau à la surface de la goutte et du gaz ambiant (kg/m^3), sont liées à la pression par les relations suivantes [16,3] :

$$C_d = P_{sat}(T_d)/(M/R)T \quad (III.1.a)$$

$$C_g = P_{vg}/(M/R)T$$

P_{sat} , P_{vg} sont respectivement la pression de saturation de l'eau à la température T_d et la pression partielle de vapeur d'eau dans l'air (Pa) qui sont exprimées par :

La pression de saturation de la vapeur d'eau dans l'air est obtenue par la relation de Bertrand P_{vg} [10] :

$$P_{vg} = (10 ** (17.443 - 2795/(T + 273) - 3.868 * alog10(T + 273))) ** 5$$

La pression de saturation de l'eau $P_{sat}(Pa)$: [16]

$$P_{sat} = exp(-31.39 - (2045.35/(T - 75.29)) - 0.012 * T + 9.16 * log(T) + 4.88E - 18 * T ** 6)$$

M : La masse molaire de la vapeur d'eau ($18.01 g/mol$).

R : La constante des gaz parfait ($8.314 J/mol k$).

k_m : Le coefficient de transfert de masse, relatif à la concentration (m/s) [16,3] :

$$k_m = Sh \cdot D_V / D_d \quad (III.1.b)$$

D_d : Diamètre de la goutte (m).

D_V : Le coefficient de diffusion massique entre l'air et la vapeur d'eau (m^2/s). Pour l'air et la vapeur d'eau, on peut utiliser la relation de Schirmer pour évaluer D_V , utilisable entre $20^\circ C$ et $90^\circ C$ [10] :

$$D_V = 2.26 \cdot 10^{-5} (1/1.0132) (T/273.15)^{1.81} \quad (III.1.c)$$

Sh : Nombre adimensionnelle de Sherwood [16,10]

$$Sh = (2 + 0.6Re^{1/2} \cdot Sc^{1/3}) / (1 + B)^{3/4} \quad (III.1.d)$$

Re : Nombre adimensionnel de Reynolds de la goutte basé sur la vitesse relative v_r

$$Re = \rho_g v_r D_d / \mu_g \quad (III.1.e)$$

V_r : La valeur absolue de la vitesse relative entre la goutte et l'air (m/s)

$$v_r = |v_g - v_d| \quad (III.1.f)$$

μ_g, ρ_g Sont respectivement la viscosité dynamique et la masse volumique du gaz (air).

v_g, v_d Sont respectivement les vitesses de l'air et de la goutte.

Sc : Nombre adimensionnel de Schmidt [10]

$$Sc = \mu_g / (\rho_g \cdot D_v) \quad (III.1.g)$$

B : Paramètre de transfert de chaleur de Spalding est calculé de la manière suivante [16,3]

$$B = C_{pv}(T_g - T_d) / L_v \quad (III.1.h)$$

T_g : La température du gaz (air).

T_d : La température de la gouttelette.

L_v : La chaleur latente d'évaporation du liquide (J/kg).

C_{pv} : La chaleur spécifique de la vapeur de liquide ($J/kg.K$).

III.3.2 L'équation d'énergie de la gouttelette

La puissance totale échangée entre l'air et l'eau est la somme de transfert de la chaleur sensible et le transfert de la chaleur latente [10]. Le bilan énergétique entre la goutte et le gaz environnant est utilisé pour calculer la variation de la température de la goutte, selon l'équation suivante [15,16] :

$$(m_s C_{ps} + m_l C_{pl}) \frac{\partial T_d}{\partial t} = hS(T_g - T_d) + L_v \frac{dm_l}{dt} \quad (III.2)$$

Où

m_s, m_l sont respectivement les masses des phases solide et liquide existantes dans la gouttelette.

C_{ps}, C_{pl} sont respectivement les chaleurs spécifiques du solide et du liquide de la gouttelette ($J/kg.K$).

h : Le coefficient de transfert de chaleur par convection entre la goutte et le gaz environnant est souvent exprimé comme une fonction de nombre de Nusselt [3] :

$$h = Nu \cdot \lambda_g / D_d \quad (\text{III.2.a})$$

Avec

λ_g : La conductivité thermique du gaz (air) ambiant.

Nu : Nombre adimensionnel de Nusselt qui exprimé par la relation [16] :

$$Nu = (2 + 0.6 \cdot Re^{1/2} \cdot Pr^{1/3}) / (1 + B)^{3/4} \quad (\text{III.2.b})$$

Avec

$$Pr = \mu_g \cdot C_{pg} / \lambda_g \quad (\text{III.2.c})$$

C_{pg} : La chaleur spécifique du gaz (air) ($J/kg.K$).

III.3.3 L'équation du rayon de la goutte

La masse du liquide dans la gouttelette est donnée par $m_l = \rho_l \frac{4}{3} \pi R_d^3$, donc l'équation suivante est utilisée pour calculer la variation de la taille de la goutte par rapport au temps [16,17] :

$$\frac{dR_d}{dt} = \frac{1}{4\pi\rho_l R_d^2} \frac{dm_l}{dt} \quad (\text{III.3})$$

La relation (III.2) peut être réécrite d'une autre manière :

$$\frac{dD_d^2}{dt} = \frac{4}{\pi\rho_l D_d} \frac{dm_l}{dt} \quad (\text{III.4})$$

La relation (III.3) est connue sous la loi en « D^2 ».

ρ_l : La masse volumique du liquide (kg/m^3).

III.3.4 L'équation de mouvement de la gouttelette dans le gaz ambiant

Plaçons à présent une goutte de diamètre D_d (de densité ρ_d et de viscosité μ_d) dans un courant de gaz (air de densité ρ_g et de viscosité μ_g) de vitesse relative $|v_d - v_g|$. Une analyse de l'équation de Navier-Stokes de l'écoulement montre que la goutte est soumise à une force de gravité, force de traînée aérodynamique et de la poussée d'Archimède **Fig.III.2**. Alors l'équation de mouvement qui décrit l'évolution d'une goutte sphérique dans un 1D, est exprimée par l'équation (III.5-III.6) [16, 15,18]:

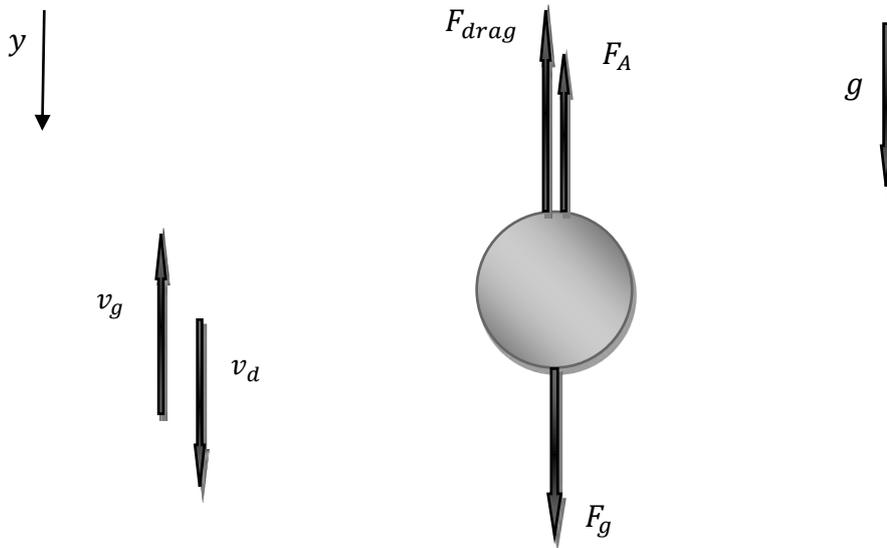


Fig.III.2 : Systèmes des forces d'équilibre pour une goutte individuelle

L'équation de mouvement de la goutte sous la forme vectorielle est donnée par :

$$m \frac{d\vec{v}_d}{dt} = m\vec{g} + \vec{F}_A + \vec{F}_{drag} \quad (III.5)$$

F_A, F_{drag} Sont respectivement Les forces d'Archimède et de Drag (résistance exercé par le gaz sur la goutte).

$$\vec{F}_A = -\rho_g g \cdot V_d \vec{j} \quad (\text{III.5.a})$$

$$\vec{F}_{drag} = -\frac{1}{2} \rho_g S \cdot C_D \cdot v_r \cdot (\vec{v}_d - \vec{v}_g) \quad (\text{III.5.b})$$

Alors n l'équation projetée selon (oy) est :

$$m_d \frac{dv_d}{dt} = m_d g - \rho_g g V_d - \frac{1}{2} \rho_g S \cdot C_D \cdot v_r \cdot (v_d + v_g) \quad (\text{III.6})$$

Avec :

m_d : La masse de la goutte ($= (m_s + m_l) = \rho_d V_d$) (kg)

ρ_d : La masse volumique du la goutte (kg/m³).

V_d : Volume de la gouttelette ($= \frac{4}{3} \pi R_d^3$)

v_d : vitesse de la gouttelette

g : L'accélération de la pesanteur

Le coefficient C_D de traînée est une fonction du nombre de Reynolds, il est calculé empiriquement par la relation suivante [16,18] :

$$C_D = \left(\frac{24}{Re} \right) (1 + 0.2 Re^{0.63}) / (1 + B)^{0.2} \quad (\text{III.6.a})$$

Et à partir l'équation (III.6), on peut déterminer la position de la gouttelette par :

$$v_d = \frac{dy_d}{dt} \quad (\text{III.6.b})$$

III.4 Les propriétés thermophysiques de l'air et des composantes de la gouttelette

Dans notre travail, le spray d'une solution chimique (la gouttelette) est un mélange d'une masse solide (particules en poudre nanométriques) dans un volume du liquide (le chlorure de zinc ($ZnCl_2$) avec l'eau (H_2O)) (Le rapport de mélange appelé la fraction solide défini plus tard).

Pendant le phénomène d'évaporation la masse des particules solides m_s reste constante tandis que la masse du liquide m_l s'évapore, donc l'étude de ce phénomène nécessite la connaissance des propriétés thermophysiques, d'une part, de l'air chauffé et d'autre part du liquide (eau) et des particules solides ($ZnCl_2$). Leurs propriétés ont été tirées des tables [9] et que nous avons, ensuite, interpolé à l'aide de la méthode des moindres carrés. Le type de régression choisie dépend de l'écart type minimum (en général polynomiale ou exponentielle). Les relations obtenues sont facilement intégrées dans le calcul numérique.

III.4.1 Propriétés thermophysiques de l'air

Les variations des propriétés sont dans la gamme de température (100 – 550K) :

La chaleur spécifique $C_p(J/kg.K)$:

$$C_p = 1066.55713 - 0.42088 * T + 7.25011E - 4 * T ** 2$$

La conductivité thermique $\lambda (W/m.K)$:

$$\lambda = 1.19784E - 4 + 9.84806E - 5 * T - 3.89953E - 8 * T ** 2$$

La masse volumique $\rho (kg/m^3)$:

$$\rho = 5.07868 - 0.0201 * T + 2.33494E - 5 * T ** 2$$

La viscosité dynamique $\mu (kg/m.s)$:

$$\mu = 3.85259E - 6 + 5.44753E - 8 * T - 1.74025E - 11 * T ** 2$$

III.4.2 Propriétés thermophysiques de l'eau liquide (H_2O) :

Les variations des propriétés thermophysiques de l'air en fonction de la température, dans la gamme(100 – 550K), sont exprimées par :

La masse volumique ρ (kg/m^3) :

$$\rho = 838.80297 + 1.34101 * T - 0.00273 * T ** 2$$

La chaleur spécifique C_p ($J/kg.K$) :

$$C_p = 5557.31158 - 8.54752 * T + 0.01325 * T ** 2$$

La chaleur latente de vaporisation (J/kg) :

$$L_v = (2453.7 + (2189 - 2453.7)/(125 - 20) * (T - 20)) * 1000$$

III.4.2 Les propriétés thermophysiques de Chlorure de Zinc ($ZnCl_2$) [19]:

La masse volumique ρ (kg/m^3) :

$$\rho = 2907 \text{ kg/m}^3$$

La chaleur spécifique C_p ($J/kg.K$) :

$$C_p = (15.9 + 0.008T) * (4.185/0.136301) \quad \text{Avec} \quad T = (273 - 638)k$$

La conductivité thermique λ ($W/m.K$) [20] :

$$\lambda = 0.1825 \text{ W/m.K}$$

III.5 La fraction solide sf

La fraction solide ou la molarité définie comme le rapport massique entre la masse solide (les particules de $ZnCl_2$) et la masse liquide (H_2O) de la gouttelette (%), comme suit [15-16]:

$$Sf = \frac{m_s}{m_l} \quad \text{(III.7)}$$

qui montre que, pendant l'évaporation, l'augmentation de la fraction solide est proportionnelle à la diminution de la masse liquide évaporée.

Dans les cas étudiés, les valeurs de la fraction solide initiale, imposées par le processus expérimental, sont égales à 5%, 10%, et 15%. Ces valeurs augmentent avec le processus d'évaporation de la goutte pendant sa chute entre le bec (générateur) et le substrat chaud sur lequel se produit la couche mince par réaction pyrolytique. Pour pouvoir synthétiser des films minces de bonnes qualités physico-chimiques il faut éviter la formation de poudres aussi bien sur l'espace bec-substrat que sur la surface du substrat. Dans notre calcul, nous avons introduit cette condition comme un paramètre fondamental qui nous permettra d'optimiser le choix de la distance entre le bec et le substrat. En effet, nous avons supposé qu'une fraction $Sf = 1$ pourrait être comme une condition critique de formation de la poudre. Par ailleurs, une fraction supérieure à cette valeur est à écarter dans le processus car elle peut donner des films de mauvaises qualités.

III.6 Modélisation numérique

Le problème formulé précédemment (Eqs. (III.1)-(III.2)-(III.4)-(III.6)) est un système d'équations différentielles des valeurs initiales du première ordre qui peut être résolu par une des méthodes numériques [21] telles que : la méthode d'Euler, la méthode d'Euler modifiée, la méthode de Milne, la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2, la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4...etc. Ces méthodes sont basées sur des méthodes d'intégration numériques itératives qui permettent de calculer (si elle existe !) les solutions approchées de ces problèmes.

Dans notre étude, nous avons opté pour la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 (RK4). L'importance d'utiliser cette méthode est d'obtenir une meilleure solution approchée du problème.

III.6.1 La méthode de Runge-Kutta d'ordre 4

En 1895 Carl Runge et en 1901 M. W. Kutta publient diverses méthodes de résolution d'équations différentielles bâties sur le principe de développement en série de Taylor d'ordre supérieurs.

Parmi ces méthodes on a la méthode RK4 qui a une erreur du même ordre que celle du développement en série de Taylor d'ordre 4. Elle est caractérisée par son avantage à satisfaire une convergence encore plus rapide que les autres méthodes et donc l'obtention d'une meilleure solution (en générale plus son ordre est élevé, plus la méthode est précise).

Dans cette méthode il existe trois schémas d'approximation (1,2 et3) et dans notre étude, on utilisera le 1^{er} schéma d'approximation. Chacun de ces schémas d'approximation consiste à partager l'intervalle de calcul en plusieurs intervalles par le choix d'un pas de discrétisation suffisamment petit et il faut bien sur connaître les valeurs initiales (masse du liquide, diamètre, la température et la vitesse) pour initialiser la récurrence [21,22].

III.6.2 Les avantages d'utilisation de la méthode RK4

Les formules de Runge-Kutta sont parmi les plus utilisées car elles ont les avantages suivants [22]:

- elles sont faciles à programmer,
- elles sont en générale stables, en tout cas pour les fonctions courantes de la physique,
- la largeur du pas peut être modifiée sans difficultés,
- on peu adapter le pas pour obtenir une précision souhaitée,
- surtout, elles « démarrent » toutes seules : la connaissance des valeurs initiales suffit à intégrer l'équation différentielle.

III.6.3 Discrétisation des équations du problème

Notre problème consiste à déterminer, en fonction du temps et/ou de la position :

- La masse liquide existant dans la gouttelette (m_l).
- Le diamètre de la gouttelette (D_d).
- La température de la gouttelette (T_d).
- La vitesse de la gouttelette (v_d).

et on peut, par la suite déterminer les paramètres suivants :

- La nouvelle position de la gouttelette (y_d).
- La fraction solide (Sf).

On peut remarquer clairement que les quatre équations du problème sont jointes l'une à l'autre et sont estimées par les approximations suivantes (Annexe II):

$$m_{l_{i+1}} = m_{l_i} + \frac{\Delta t}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (\text{III. 8})$$

$$D_{d_{i+1}} = D_{d_i} + \frac{\Delta t}{6} (l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) \quad (\text{III. 9})$$

$$T_{d_{i+1}} = T_{d_i} + \frac{\Delta t}{6} (m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4) \quad (\text{III. 10})$$

$$v_{d_{i+1}} = v_{d_i} + \frac{\Delta t}{6} (n_1 + 2n_2 + 2n_3 + n_4) \quad (\text{III. 11})$$

Avec :

$$k_1 = f_1(m_{l_i}, D_{d_i}, T_{d_i}, v_{d_i}, t_i)$$

$$l_1 = f_2(m_{l_i}, D_{d_i}, T_{d_i}, v_{d_i}, t_i)$$

$$m_1 = f_3(m_{l_i}, D_{d_i}, T_{d_i}, v_{d_i}, t_i) \quad (\text{III. 12})$$

$$n_1 = f_4(m_{l_i}, D_{d_i}, T_{d_i}, v_{d_i}, t_i)$$

$$\begin{aligned} k_2 &= f_1\left(m_{l_i} + \frac{\Delta t}{2} k_1, D_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} l_1, T_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} m_1, v_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} n_1, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \\ l_2 &= f_2\left(m_{l_i} + \frac{\Delta t}{2} k_1, D_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} l_1, T_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} m_1, v_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} n_1, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \\ m_2 &= f_3\left(m_{l_i} + \frac{\Delta t}{2} k_1, D_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} l_1, T_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} m_1, v_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} n_1, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \end{aligned} \quad (\text{III. 13})$$

$$n_2 = f_4\left(m_{l_i} + \frac{\Delta t}{2} k_1, D_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} l_1, T_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} m_1, v_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} n_1, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$\begin{aligned} k_3 &= f_1\left(m_{l_i} + \frac{\Delta t}{2} k_2, D_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} l_2, T_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} m_2, v_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} n_2, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \\ l_3 &= f_2\left(m_{l_i} + \frac{\Delta t}{2} k_2, D_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} l_2, T_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} m_2, v_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} n_2, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \\ m_3 &= f_3\left(m_{l_i} + \frac{\Delta t}{2} k_2, D_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} l_2, T_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} m_2, v_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} n_2, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \end{aligned} \quad (\text{III. 14})$$

$$n_3 = f_4\left(m_{l_i} + \frac{\Delta t}{2} k_2, D_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} l_2, T_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} m_2, v_{d_i} + \frac{\Delta t}{2} n_2, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$k_4 = f_1(m_{l_i} + \Delta t k_3, D_{d_i} + \Delta t l_3, T_{d_i} + \Delta t m_3, v_{d_i} + \Delta t n_3, t_i + \Delta t)$$

$$l_4 = f_2(m_{l_i} + \Delta t k_3, D_{d_i} + \Delta t l_3, T_{d_i} + \Delta t m_3, v_{d_i} + \Delta t n_3, t_i + \Delta t)$$

$$m_4 = f_3(m_{l_i} + \Delta t k_3, D_{d_i} + \Delta t l_3, T_{d_i} + \Delta t m_3, v_{d_i} + \Delta t n_3, t_i + \Delta t) \quad (\text{III. 15})$$

$$n_4 = f_4(m_{l_i} + \Delta t k_3, D_{d_i} + \Delta t l_3, T_{d_i} + \Delta t m_3, v_{d_i} + \Delta t n_3, t_i + \Delta t)$$

où $k_{i=\overline{1,4}}$, $l_{i=\overline{1,4}}$, $m_{i=\overline{1,4}}$ et $n_{i=\overline{1,4}}$ sont les valeurs approximatives de la masse liquide, le diamètre, la température et la vitesse de la gouttelette respectivement et qui permettent de calculer les nouvelles valeurs.

où f_1, f_2, f_3 et f_4 sont respectivement les fonctions qui permettent de calculer la masse liquide, le diamètre, la température et la vitesse de la gouttelette selon les équations (III.1), (III.3), (III.2) et (III.6).

III.6.4 Traitement informatique

Comme il est décrit précédemment que la résolution du système d'équations du problème est effectuée par la méthode de RK4. On a les différents paramètres d'états initiaux et avec l'algorithme de calcul (voir organigramme) nous évaluons les différents nouveaux paramètres.

Dans le traitement informatique de notre problème on a deux parties qui sont jointes : La première partie est la principale, la deuxième partie est la secondaire (des fonctions de chaque équation du système du problème).

❖ La partie de traitement informatique principale

Les diverses étapes de résolution dans cette partie sont les suivantes :

1. Entrer les constantes (le nombre π , la constante des gaz parfait R , la pression atmosphérique P_a , la gravité g , $h_{bec_substrat}$).
2. Entrer le temps initiales ($t = 0$ s).
3. Entrer le temps d'incrément Δt ($\Delta t = 0.001$ s).
4. Entrer la fraction initiale S_f (5%, 10%, 15%)
5. Entrer les différentes propriétés géométriques et thermiques initiales de la gouttelette :
 - Le diamètre D_d
 - La position initiale ($y_d = 0$)
 - La température ($T_d = 20$ °C)
 - La vitesse ($v_d = 0$ m/s)
6. Entrer les différentes propriétés initiales de l'air, de l'eau et des particules solides de Chlorure de zinc :
 - Air (la température, la vitesse, la masse volumique, la viscosité dynamique, la chaleur spécifique, la conductivité thermique)
 - Eau (la masse volumique, la chaleur spécifique, la masse molaire)
 - Les particules solides de $ZnCl_2$ (la masse volumique, la chaleur spécifique, la conductivité thermique)

7. Calcul la masse liquide initiale de l'eau existant dans la gouttelette m_l , puis la masse des particules solides existant dans la gouttelette m_s .
8. Entrer la condition (Sf inférieur à 1) critique de formation de la poudre.
9. Par l'utilisation de la méthode RK4 on :

Calcul des coefficients $k_{i=\overline{1,4}}$, $l_{i=\overline{1,4}}$, $m_{i=\overline{1,4}}$, $n_{i=\overline{1,4}}$ en utilisant les équations (III.12) – (III.15).

Calcul des nouveaux paramètres : la masse liquide m_l , le diamètre D_d , la température T_d , la vitesse v_d de la gouttelette à la nouvelle position y_d en utilisant les approximations données par les équations (III.8) – (III.11).

10. A condition que la hauteur de vole de la gouttelette ne dépasse pas une certaine valeur fixée ($h_{bec_substrat}$) nous calculons :

la nouvelle position de la gouttelette y_d .

la nouvelle température et vitesse de l'air à la nouvelle position (chapitre II).

la nouvelle fraction solide Sf .

11. Les nouveaux paramètres deviennent les initiaux et les calculs à partir de l'étape 7 sont continues.
12. Les calculs sont arrêtées si la nouvelle position de la gouttelette devient égale la valeur de la hauteur fixé $h_{bec_substrat}$.
13. L'écriture des résultats.

❖ La partie de traitement informatique secondaire

Cette partie consiste à donner les différentes étapes pour déterminer les fonctions qui permettent de calculer les coefficients $k_{i=\overline{1,4}}$, $l_{i=\overline{1,4}}$, $m_{i=\overline{1,4}}$, $n_{i=\overline{1,4}}$.

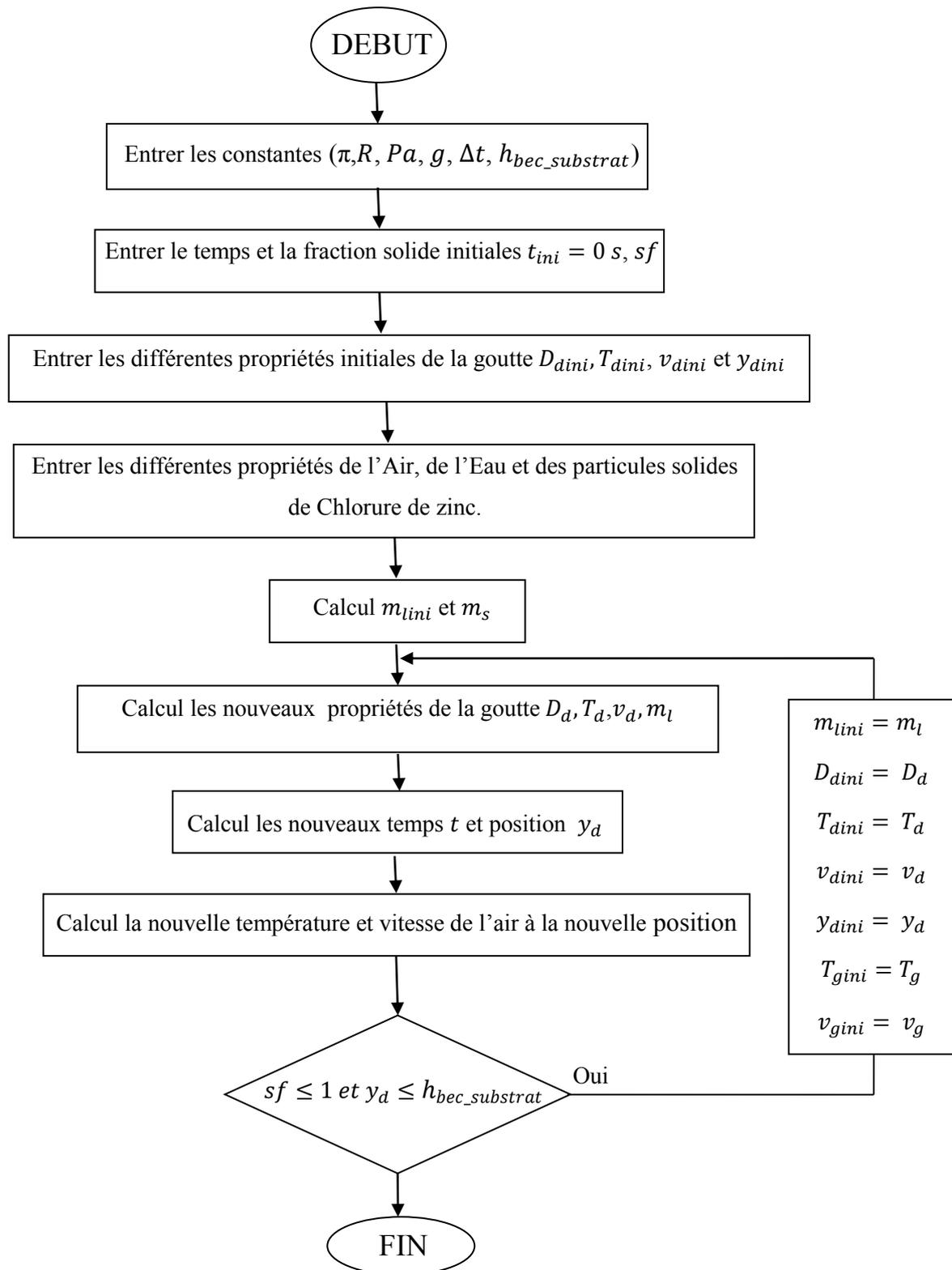
☞ **La fonction f_1** (pour calculer les $k_{i=\overline{1,4}}$) qui définit l'évolution de la masse liquide de la gouttelette m_l :

1. Calcul la vitesse relative v_r donnée par (III.1.f).
2. Calcul de la surface superficielle de la gouttelette $S = \pi D_d^2$.
3. Calcul des concentrations de la vapeur d'eau à la surface de la goutte et du gaz ambient C_d et C_g en utilisant les expressions (III.1.a).

4. Calcul des nombres adimensionnelles suivants : Reynolds Re , Schmidt Sc , Spalding B , et le nombre de Sherwood Sh , en utilisant les expressions (III.1.e), (III.1.g), (III.1.h), (III.1.d) respectivement.
 5. Calcul du coefficient de transfert massique k_m en utilisant (III.1.b)
 6. L'évaluation de $f_1(m_l)$ en utilisant (III.1).
- ☞ **La fonction f_2** (pour calculer les $l_{i=1,4}$) qui définit l'évolution du diamètre de la gouttelette D_d :
1. Les mêmes étapes (1-5) de la fonction f_1 .
 2. L'évaluation de f_2 c.-à-d. (D_d) en utilisant (III.3).
- ☞ **La fonction f_3** (pour calculer les $m_{i=1,4}$) qui définit l'évolution de la température de la gouttelette T_d :
1. Les mêmes étapes (1-5) de la fonction f_1 .
 2. Calcul des nombres adimensionnelles suivants : Nusselt (Nu), Prandtl (Pr) en utilisant les expressions (III.2.b), (III.2.c) respectivement.
 3. Calcul le coefficient de convection h en utilisant (III.2.a).
 4. L'évaluation de $f_3(T_d)$ en utilisant (III.2).
- ☞ **La fonction f_4** (pour calculer les $n_{i=1,4}$) qui définit l'évolution de la vitesse de la gouttelette v_d :
1. Calcul de la vitesse relative v_r donnée par (III.1.f).
 2. Calcul des nombres adimensionnelles de : Reynolds (Re) et Spalding (B) en utilisant les expressions (III.1.e), (III.1.h) respectivement.
 3. Calcul le coefficient de Drag (trainée) C_D en utilisant (III.6.a).
 4. L'évaluation de $f_4(v_d)$ en utilisant (III.6).
- ☞ **La fonction** qui permet d'évaluer la nouvelle position de la gouttelette y_d en utilisant (III.6.b).

Toutes les étapes du traitement informatique principal sont représentées dans l'organigramme suivant. Le programme a été développé en langage **Fortran** [23]. La représentation des résultats est effectuée par l'utilisation de logiciel **Origine 6**.

III.6.5 Organigramme



Chapitre IV

Résultats et discussions

Dans ce chapitre, on présente les résultats de notre étude obtenus par la simulation numérique. Cette étude numérique est basée sur des données et des conditions qui sont proches du système expérimental de déposition des couches minces par la technique spray pyrolytique, où on va décrire le phénomène de l'évolution d'une gouttelette d'une solution chimique composée d'un sel dissout dans un solvant telle que $[ZnCl_2: Eau]$. L'étude a pour objectif d'étudier l'influence de quelques paramètres externes (conditions expérimentales) sur les propriétés géométriques et thermophysiques de la gouttelette. L'étude nous permettra d'optimiser les différentes conditions du système expérimental d'élaboration des couches minces telles que distance bec-substrat, température du substrat, concentration initiale du sel dans le solvantetc. Pour réaliser cette tâche nous avons procédé à une étude par étape. Pour cela, les résultats seront présentés dans trois parties distinctes et complémentaires ou chacune d'elles consiste à décrire un modèle physique de la manière suivante : La première partie porte sur le modèle d'étude de l'évolution d'une gouttelette dans un milieu à propriétés thermodynamiques (température et vitesse) constantes. La deuxième partie est une modélisation numérique de la convection naturelle d'un milieu gazeux (air) provoqué par le chauffage d'un porte substrat. Cette étude permet de suivre les évolutions de la température et de la vitesse de l'air provoquées par une plaque horizontale chauffée (substrat). La troisième partie est un couplage entre les deux modèles c-à-d la chute d'une gouttelette dans un milieu à propriétés thermodynamiques (température et vitesse) variables.

IV.1 Résultats numériques du modèle de la chute d'une gouttelette dans un milieu à température constante

Dans cette partie nous avons étudié le comportement d'une goutte spray dans un milieu gazeux à température et vitesse d'air moyennes constantes. Cette étude est effectuée pour tester la validité du programme numérique réalisé tout en introduisant des hypothèses simplificatrices sur les données du milieu gazeux dans lequel évolue la goutte liquide. Bien que ces données soient constantes, nous avons essayé de s'approcher aux valeurs réelles de l'expérimentation.

La modélisation numérique des équations qui régissent l'évolution du comportement thermophysiques de la gouttelette au cours de sa chute, y compris son évaporation. Le calcul de ses paramètres est basé sur l'utilisation de la méthode RK4 selon les hypothèses qui sont

décrites dans le chapitre III. Le développement du programme est réalisé en langage **Fortran** tandis que la présentation des résultats est obtenue par '**Origine 6**'.

Nous avons étudié l'influence de quelques paramètres fondamentaux sur l'évolution de la goutte pendant son vol dans ce milieu gazeux. Ces paramètres sont la température du milieu ambiante (air) (T_g), Diamètre de la goutte (D_d), la concentration du sel dans le liquide (fraction solide Sf), la hauteur de la chute $h_{bec-substrat}$ et la vitesse de l'air (v_g).

IV.1.1 Etude de l'effet de la température du milieu ambiant sur la goutte

La figure IV.1 illustre l'effet de la température du milieu ambiant sur la dynamique de la gouttelette et son évaporation dans un milieu d'air à température fixe de 60, 80, 100 et 120°C, une vitesse verticale constante de 0.1 m/s et une pression de vapeur P_{vg} exprimée par la relation de Bertrand (chapitre III). Les conditions initiales de la gouttelette à la sortie du bec sont choisies selon les conditions réelles du système de déposition utilisé dans notre laboratoire: diamètre de 40 μm , température égale à 20°C et une vitesse nulle.

Dans ces mêmes conditions et avec une distance de 5cm entre le bec et le substrat, l'influence de la température du milieu ambiant sur le taux d'évaporation de la gouttelette ($ZnCl_2 + Eau$) est présentée dans la Fig.IV.1 (a et b). Les résultats de la variation du diamètre en fonction du temps et qui sont obtenues par Eq. (III.3) de la Fig.VI.1b montrent que le diamètre de la gouttelette a diminué de 40 μm à ~16 μm dans un temps de 0.24 s ($y_d = 2.5cm$) pour une température du milieu fixé à 80°C. Par ailleurs, cette diminution du diamètre est réalisée dans un temps de 0.15 s ($y_d = 3.8cm$) pour $T_g = 120 C$. Il est évident que le taux d'évaporation de la gouttelette à température élevée soit sensiblement plus grand que celui obtenu à une température plus basse. La Fig.IV.1a explique et confirme ce résultat car la masse liquide de la gouttelette, pour les mêmes températures du milieu, diminue de 3.2 10⁻¹¹ kg à une valeur plus faible de 2 10⁻¹² kg. En effet, de plus en plus que la température du milieu gazeux est élevée, plus est la quantité de chaleur transmise à la gouttelette c'est ce qui mène à une température de saturation T_d élevée (Fig.IV.1c) causant ainsi, l'élévation de la concentration en sel C_d par rapport à sa valeur initiale.

La Fig.IV.1c présente la variation de la température de la gouttelette en fonction du temps et la position pour différentes températures fixes du milieu ambiant $T_g = 60 - 120^\circ c$.

On remarque dans cette figure que la température de la gouttelette (bien que la vitesse v_d dans la Fig.IV.1d) augmente dans l'intervalle de temps 0 à $\sim 0.02s$ ($y_d = 0$ à $\sim 2mm$) quelque soit la température du milieu ambiant. Cette première phase correspond à la phase de chauffage du liquide jusqu'aux conditions de saturation. A partir de $0.02s$, T_g devient constante (pression constante, L_v constante) selon la température du milieu ambiant considérée: ($T_g=80^\circ C$, $T_d \cong 29^\circ C$ avec $t \in [0.02 - 0.23s]$ et $y_d \in [0 - 2.9cm]$, $T_g = 120^\circ C$, $T_d \cong 38^\circ C$ avec $t \in [0.02 - 0.18s]$ et $y_d \in [0 - 1.8cm]$). Cette figure nous permet aussi de voir que plus le milieu gazeux est chaud plus la température de la goutte est élevée et plus le temps d'atteindre l'état de saturation devient faible.

Les courbes qui décrivent l'influence de la température du milieu ambiant sur la variation de la vitesse de la gouttelette sont présentées dans la Fig.IV.1d. Toujours dans les mêmes conditions, la vitesse de la goutte augmente dans le même sens que celui de la température T_d , lorsque T_d atteint l'état de saturation la vitesse atteint une valeur maximale quelque soit la température T_g ($v_d \cong 0.14m/s$). On note qu'en cours d'évaporation la vitesse de la gouttelette est diminuée jusqu'à $0.11m/s$, ce qui peut être expliqué par l'augmentation du coefficient de drag C_D qui traduit la résistance de l'air contre le mouvement de la goutte. Sur la même figure, nous remarquons aussi que la diminution de la vitesse est produite pour toutes les températures du milieu ambiant T_g , sauf qu'elle est plus rapide lorsque cette dernière est plus importante. Pour les deux températures T_g extrêmes on reporte les résultats suivants: ($T_g=60^\circ C$, $t \in [0.02 - 0.3s]$ et $y_d \in [0.003 - 0.038m]$, $T_g = 120^\circ C$, $t \in [0.02 - 0.18s]$, et $y_d \in [0.003 - 0.018m]$). La figure nous permet donc de dire que quelque soit la température du milieu gazeux la vitesse de la gouttelette atteint une valeur maximale ($0.14m/s$), mais plus T_g est élevée plus la diminution de v_d est rapide ($0.11m/s$).

La figure IV.1.e illustre l'effet de la température du milieu ambiant sur l'évolution de la fraction solide. Comme décrit précédemment et à cause de l'évaporation, la masse liquide diminue tandis que celle de la partie solide reste constante, ce qui conduit à un accroissement de la fraction solide dans la goutte, selon l'Eq.(III.7). On note que $Sf = 1$ est la condition que nous avons imposé au mélange afin d'éviter l'état d'évaporation totale (poudre) qui ne nous permet pas de former des couches minces de bonne qualité. La fraction solide Sf augmente du taux initial de 5% jusqu'à $\sim 100\%$ quelque soit T_g . On observe que l'évaporation de la goutte est produite dans un parcours de chute variant entre 2 et 4cm. Ce parcours la température T_g . À $T_g=80^\circ C$, Sf atteint la valeur 100% dans un temps de 0.23s correspondant à

la position $y_d \cong 0.028 \text{ m}$ tandis que pour $T_g=120^\circ\text{C}$ elle atteint la même valeur mais dans un temps plus court de l'ordre de 0.14s pour une distance de $y_d \cong 0.02\text{m}$). Ce résultat nous permet d'avoir une meilleure normalisation dans le choix de la distance bec-substrat selon la température du substrat imposée. En conséquence et pour la température T_g explorée, une distance $0.02 \leq y_d \leq 0.04\text{cm}$ est conseillée pour les expériences.

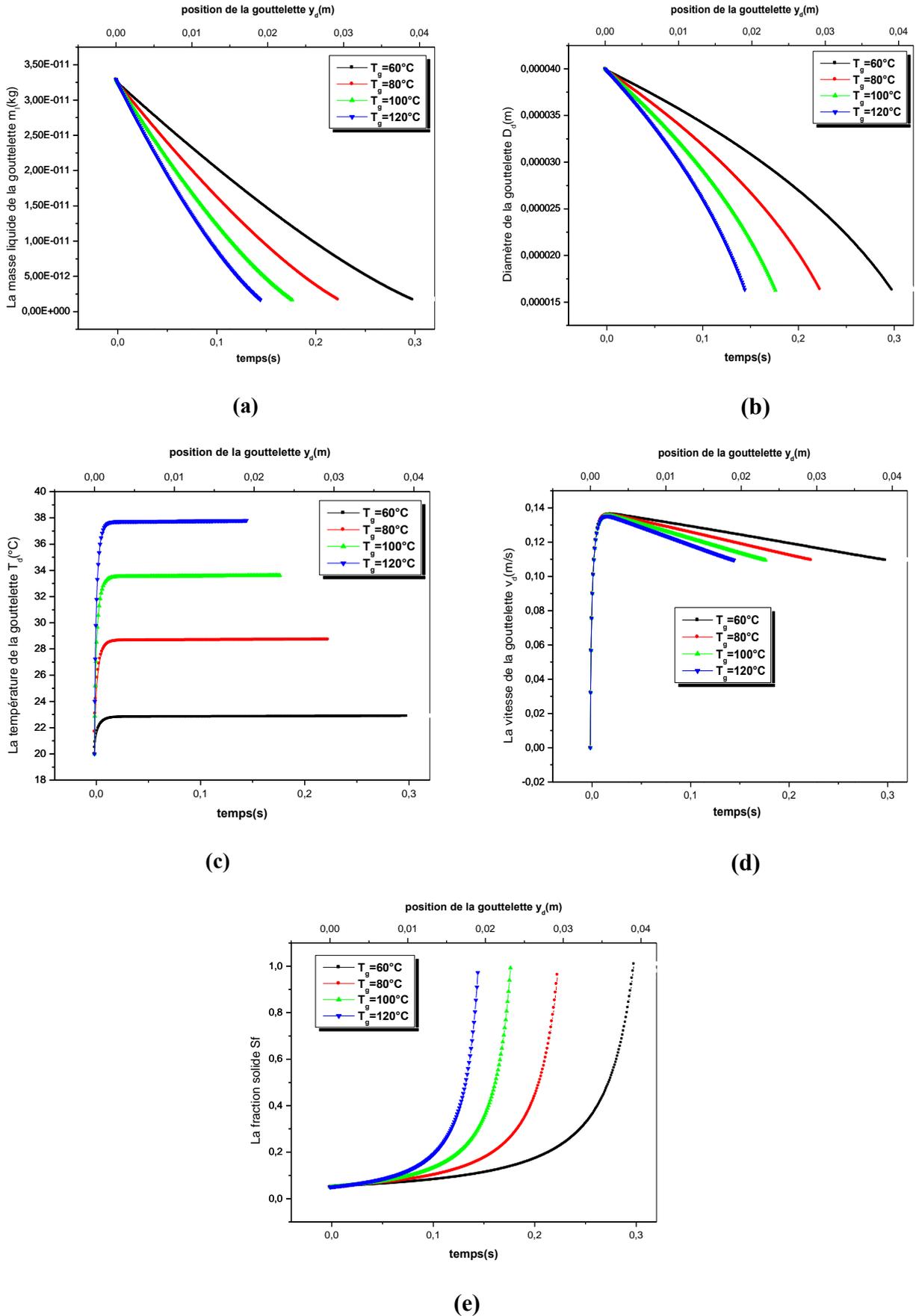


Fig.IV.1 : L'effet de la température du milieu ambiant sur l'évaporation (a,b,c) et la dynamique (d,e) de la gouttelette : (a) masse liquide, (b) diamètre, (c) température, (d) vitesse et (e) fraction solide avec les conditions initiales: $v_g = 0.1 \text{ m/s}$, $h_{bec-substrat} = 0.05 \text{ m}$, $D_d = 40 \mu\text{m}$ et $Sf = 0.05$.

IV.1.2 Etude de l'effet du diamètre initial de la goutte

La figure IV.2 schématise l'effet du diamètre initial de la gouttelette sur sa dynamique et son évaporation dans un milieu d'air à température fixe de $100\text{ }^{\circ}\text{C}$, une vitesse verticale constante de 0.1 m/s , les diamètres choisis sont $20\mu\text{m}$, $40\mu\text{m}$ et $60\mu\text{m}$. Les conditions initiales de la gouttelette à la sortie du bec sont : position $y_d = 0$, température égale à 20°C et une vitesse nulle.

Dans ces mêmes conditions et avec une distance de 5cm entre le bec et le substrat, la figure IV.2a présente la variation de la masse liquide de la gouttelette pour différents diamètres à la sortie du bec. Les différentes tailles de la goutte montrent des taux d'évaporation différents, où m_l de la goutte la plus grande est diminuée de $1.1 \cdot 10^{-10}\text{kg}$ à $0.2 \cdot 10^{-10}\text{kg}$ dans un temps de $\sim 0.32\text{s}$ qui correspond à sa position $y_d = 4.5\text{cm}$, en revanche, m_l de la goutte la plus petite diminue de 10^{-12}kg à 10^{-13}kg dans un temps de $\sim 0.05\text{s}$ à la position $y_d = 0.5\text{cm}$. La même remarque pour la figure IV.2b qui présente l'évolution du D_d de la goutte au cours de son évaporation. A partir de ces courbes on peut conclure que le temps d'évaporation et, par suite, la distance de chute est proportionnelle à sa dimension [3,24]. D_d diminue de $20\mu\text{m}$ à $\sim 7\mu\text{m}$ pour une distance de 5mm et de $60\mu\text{m}$ à $\sim 35\mu\text{m}$ pour une distance de 4.5cm .

La Fig.IV.2c présente, pour différentes tailles de la goutte, la variation de la température de la gouttelette en fonction du temps. La figure montre que la température de saturation est la même pour toutes les gouttes, elle est de $\sim 34^{\circ}\text{C}$ mais la goutte de faible taille, en l'occurrence $D_d = 20\mu\text{m}$ atteint cette valeur plus rapidement.

La fig.IV.2d montre les variations des vitesses des trois gouttes étudiées. On observe deux phases différentes, la première est celle de la phase liquide avec augmentation de la température (chaleur sensible) jusqu'à une valeur maximale limitée par le début de l'évaporation, suivie d'une seconde phase de décélération plus lente de la vitesse. Comme l'inertie thermique d'une goutte est proportionnelle à sa taille, alors la plus grande goutte exige plus d'énergie avant d'arriver à la saturation puis à l'évaporation, en conséquence plus de temps, c'est ce qui explique la grande vitesse v_d de la goutte la plus grande (valeur maximale de 0.17 m/s pour la goutte de $60\mu\text{m}$). Pendant le processus d'évaporation v_d diminue linéairement au cours du temps : pour $D_d = 60\mu\text{m}$, v_d chute jusqu'à 0.14m/s .

La figure IV.2e illustre l'évolution de la fraction solide pour les différents diamètres. On peut noter que les gouttes de $20\mu m$ et $40\mu m$ s'évaporent dans l'espace bec-substrat ($Sf = 1$) avant d'atteindre le substrat ; i.e dans les positions respectives de 0.8 et $2.6cm$. La goutte de $60\mu m$ arrive sur la surface du substrat avec une fraction de l'ordre de 30% .

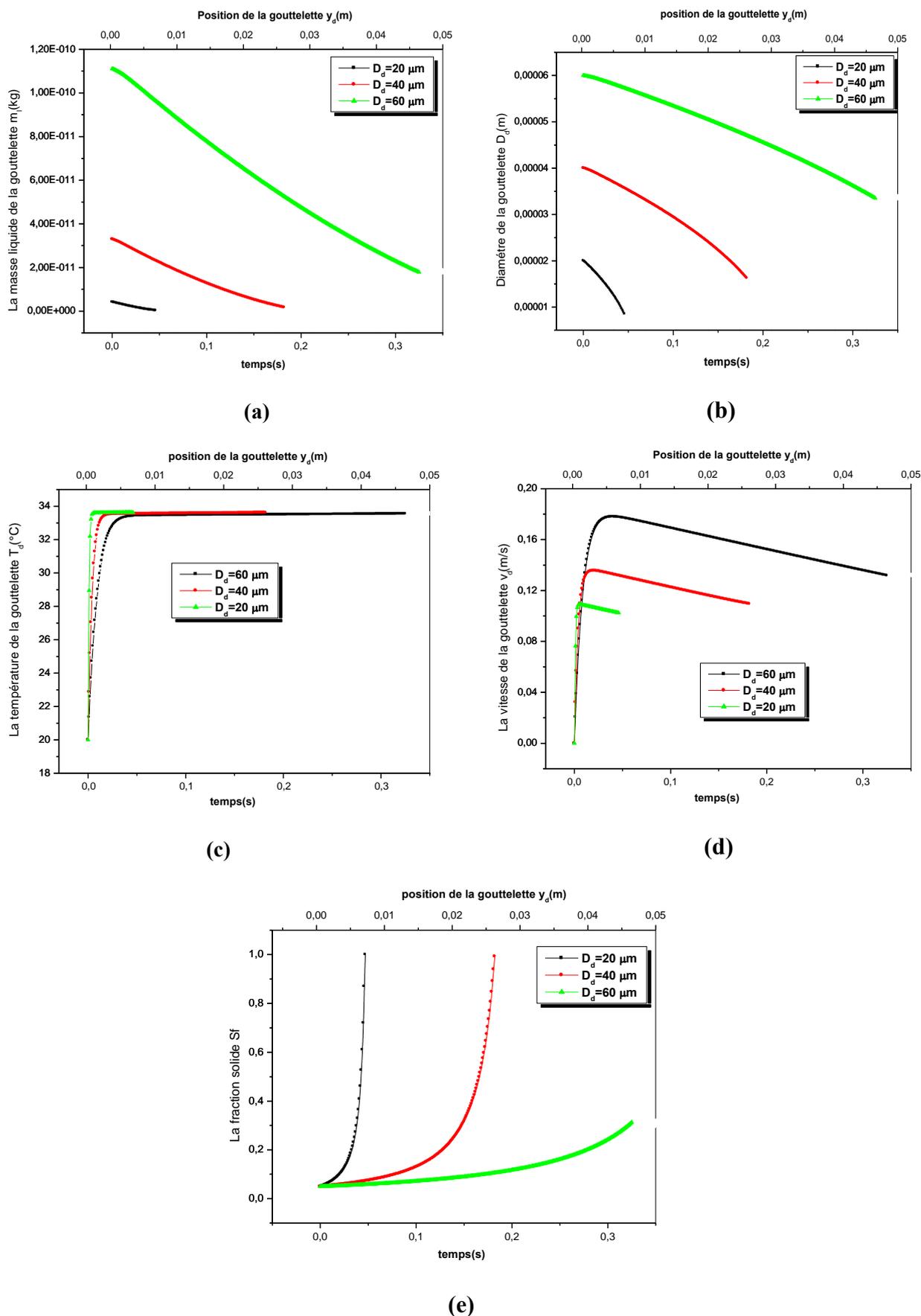


Fig.IV.2 : L'effet du diamètre initial de la gouttelette sur l'évaporation (a,b,c) et la dynamique (d,e) de la gouttelette : (a) masse liquide, (b) diamètre, (c) température, (d) vitesse et (e) fraction solide avec les conditions initiales : $T_g = 100^\circ\text{C}$, $v_g = 0.1 \text{ m/s}$, $h_{bec-substrat} = 0.05 \text{ m}$ et $Sf = 0.05$.

IV.1.3 Etude de l'effet de la fraction solide initiale

Afin d'étudier l'effet de la quantité des particules solides sur la dynamique et le taux d'évaporation de la goutte, différentes fractions solides initiales $Sf = 5\%$, 10% et 15% ont été choisies. La figure IV.3 schématise les résultats obtenus pour une gouttelette dont les conditions initiales à la sortie du bec sont : position $y_d = 0$, $D_d = 40\mu m$, température égale à $20^\circ C$ et une vitesse nulle qui chute dans un milieu d'air à température fixe de $100^\circ C$ et une vitesse verticale constante de $0.1 m/s$.

Les courbes de la Fig.IV.3a qui représentent les évolutions des masses liquides des trois gouttelettes. Ces dernières ont le même profil car le taux d'évaporation est régi par les mêmes équations. La goutte ayant la concentration la plus élevée s'évapore plus vite que les autres. Pour un déplacement de $y_d = 1.7cm$ ($0.14s$), la masse liquide de celle de $Sf = 0.15$, diminue de $3.2 \cdot 10^{-11}$ à $0.5 \cdot 10^{-11} kg$ alors que pour la goutte ayant $Sf = 0.05$, elle atteint la position $2.4cm$ ($0.18s$) avec une masse liquide égale $\sim 10^{-13} kg$.

La Fig.IV.3b montre des variations similaires des diamètres, indépendamment de la fraction solide initiale car le taux d'évaporation est le même pour l'ensemble. La différence réside dans le temps d'arrêt du processus car ceci est limité par $Sf = 1$. Ce résultat peut s'expliquer aussi par les variations inverses des concentrations Sf de la figure IV.3e. En effet, lorsque le diamètre diminue, il y'a une diminution de la masse liquide par évaporation au détriment de la masse solide d'où une croissance de Sf .

Les figures IV.3c et VI.3d décrivent les évolutions simultanées de la température et de la vitesse des gouttes pendant le spray. On note que le changement de la quantité des particules solides initiales ne fait apparaître aucun effet aussi bien sur la température de la goutte que sur la température de saturation ($\sim 34^\circ C$) qui reste la même pour les trois fractions solides. Par ailleurs, on constate une légère différence dans les vitesses de chute, surtout dans la phase évaporation. La vitesse v_d diminue de $\sim 0.14m/s$ jusqu'à $\sim 0.12m/s$ pour $Sf = 0.15$ et jusqu'à $\sim 0.11m/s$ pour $Sf = 0.05$.

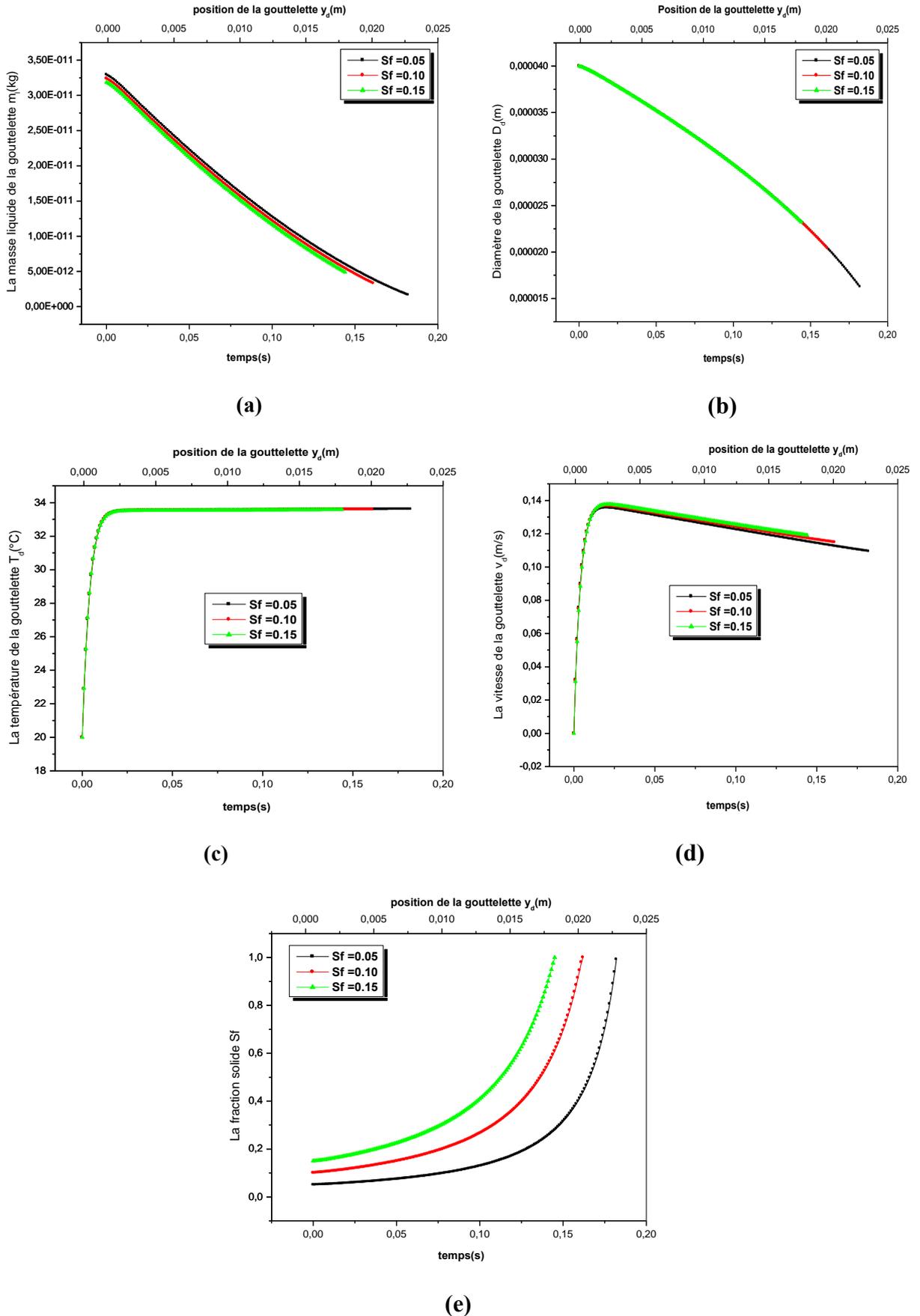
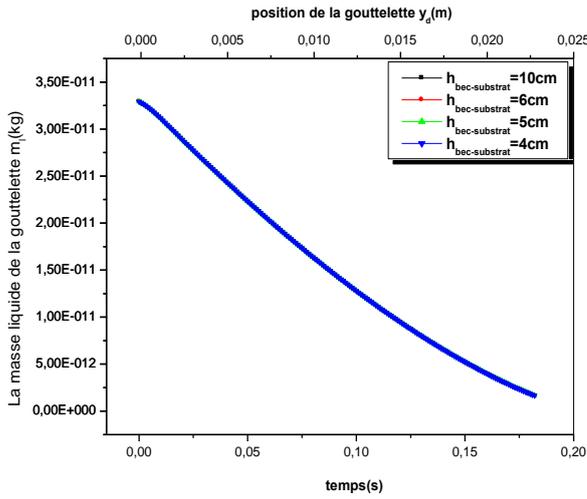


Fig.IV.3: L'effet du fraction solide initiale sur l'évaporation (a,b,c) et la dynamique (d,e) de la gouttelette : (a) masse liquide, (b) diamètre, (c) température, (d) vitesse et (e) fraction solide avec les conditions initiales : $T_g = 100^\circ\text{C}$, $v_g = 0.1 \text{ m/s}$, $D_d = 40\mu\text{m}$ et $h_{bec-substrat} = 0.05 \text{ m}$.

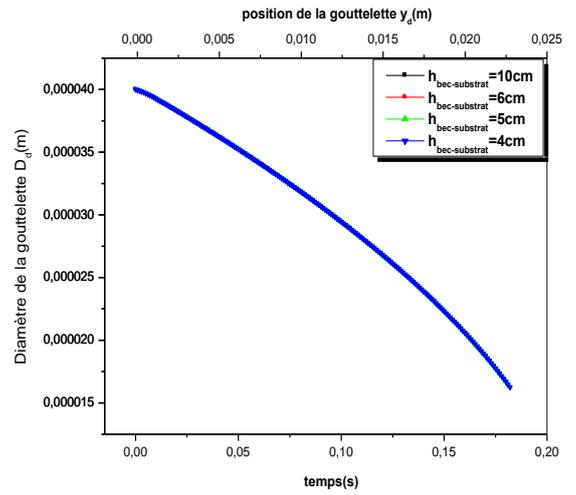
IV.1.4 Etude de l'effet de la distance entre le bec et le substrat

Les courbes des figures IV.4 (a,b,c,d,e) illustrent les résultats de la variation de la distance entre le bec et le porte substrat sur la dynamique de la gouttelette et son évaporation dans un milieu d'air à température fixe de 100 C , une vitesse verticale v_g constante de 0.1 m/s . Les conditions initiales de la gouttelette à la sortie du bec sont: position $y_d = 0$, diamètre de $40\mu\text{m}$, température égale à 20°C et une vitesse nulle. Cette étude a pour objectif de voir l'effet de la variation de la distance bec-substrat $h_{\text{bec-substrat}}$ entre $4 - 10\text{cm}$.

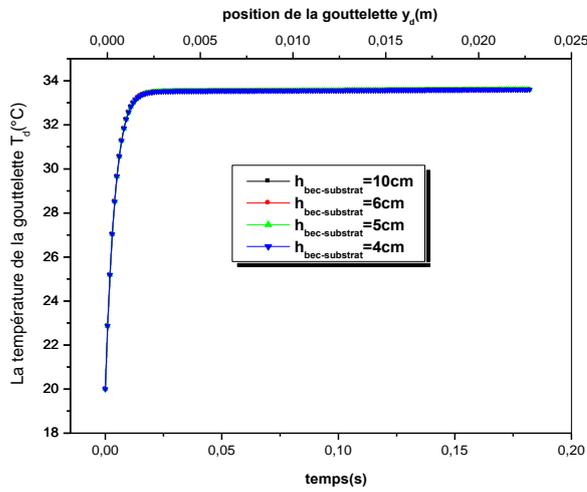
Dans ces mêmes conditions les différentes évolutions qui décrivent le taux d'évaporation (fig. IV.4a, b et c) et/ou la dynamique (fig. IV.4d, e) ont les mêmes profils quelque soit la distance. Le processus d'évaporation s'effectue dans le même temps et s'arrête à la même position $y_d \sim 2.3\text{cm}$ quelque soit la distance. Ces résultats sont la conséquence des mêmes paramètres externes qui influent sur les propriétés thermodynamiques de la goutte.



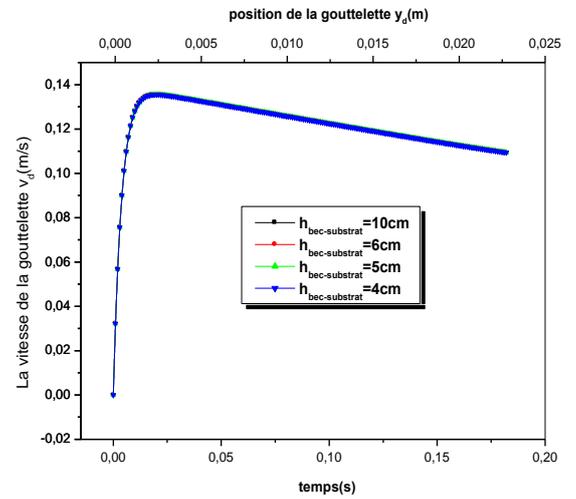
(a)



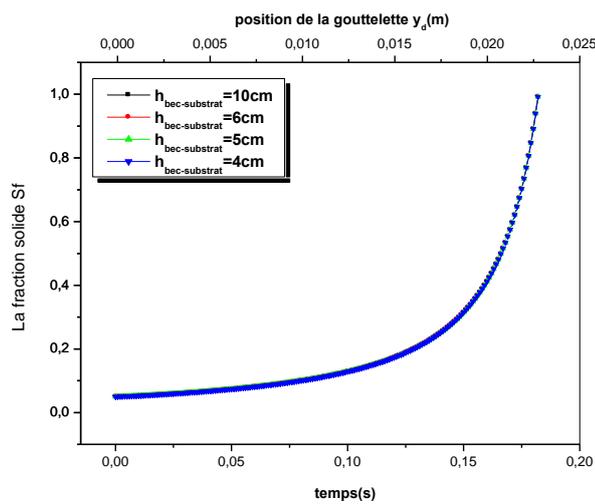
(b)



(c)



(d)



(e)

Fig.IV.4: L'effet de la distance $h_{bec-substrat}$ sur l'évaporation (a,b,c) et la dynamique (d,e) de la gouttelette : (a) masse liquide, (b) diamètre, (c) température, (d) vitesse et (e) fraction solide avec les conditions initiales : $T_g = 100^\circ\text{C}$, $v_g = 0.1\text{ m/s}$, $D_d = 40\mu\text{m}$ et $Sf = 0.05$.

IV.2 RESULTATS DE LA CONVECTION SUR UNE PAROI HORIZONTALE

Dans cette partie nous avons tenté d'étudier le phénomène de la convection naturelle qui est générée par le chauffage d'une plaque plane horizontale. Cette étude numérique de simulation est basée sur des données qui sont proches du système expérimental de déposition des couches minces par la technique spray pyrolytique. En effet, dans ce processus nous utilisons un porte substrat que l'on chauffe jusqu'à une température fixe T_w et que l'on maintient constante tout au long du processus. Cette dernière est connue sous le nom de température de substrat. Les paramètres du milieu gazeux au dessus du substrat, en l'occurrence la température et la vitesse du courant d'air ascendant, dépendent de la température T_w imposée.

Nous présentons, ci-dessous, les résultats de l'étude numérique de la convection naturelle stationnaire et bidimensionnelle d'un écoulement ascendant d'un fluide (air) généré par un substrat (une plaque plane horizontale) porté à une température imposée fixe et uniforme. Notre étude est axée sur l'effet de la température du substrat sur les deux paramètres thermodynamiques de l'air qui influencent la goutte au cours de sa chute entre le bec et le substrat. La modélisation numérique de ce milieu est basée sur les équations de Navier Stokes appliquées à la convection naturelle d'un écoulement d'air, supposé newtonien et incompressible avec la prise en compte de l'approximation de Boussinesq. Pour cela, nous avons utilisé la méthode des volumes finis en utilisant la méthode itérative de Gauss Seidel. Notons que ces deux méthodes sont décrites dans l'annexe I. Le domaine étudié est un carré (1x1m) divisé selon le maillage (122 x 120) avec un nombre de sous-relaxation de 0.85.

Il est important de noter que l'étude a été effectuée sur un domaine assez large, volontairement choisi, pour nous permettre d'utiliser des conditions aux limites proches des conditions réelles de l'expérience. Par ailleurs, nous ne nous intéressons qu'aux résultats de la convection sur le substrat dans le domaine délimité, en haut, par la position du bec.

En se référant sur les conditions expérimentales utilisées dans la déposition de couches minces par spray pyrolyse [6], l'étude a été effectuée sur la variation de la température de substrat dans la gamme 200°C-350°C.

Sur la figure IV.5 nous représentons les distributions de la température et de la vitesse dans tout le domaine étudié, de dimensions $1\text{m} \times 1\text{m}$. Ceci étant justifié par les conditions aux limites de vitesse et de température choisies (voir chapitre II). Comme on peut le voir sur la figure (a), la partie chaude est localisée aux voisinages du substrat, située sur une hauteur de 0.2m environ. Dans ce domaine, la température décroît avec l'augmentation de Y . Pour la vitesse (Fig IV.5 (b)), bien qu'elle soit variable par zone, on remarque que son évolution est pratiquement parabolique au dessus du substrat.

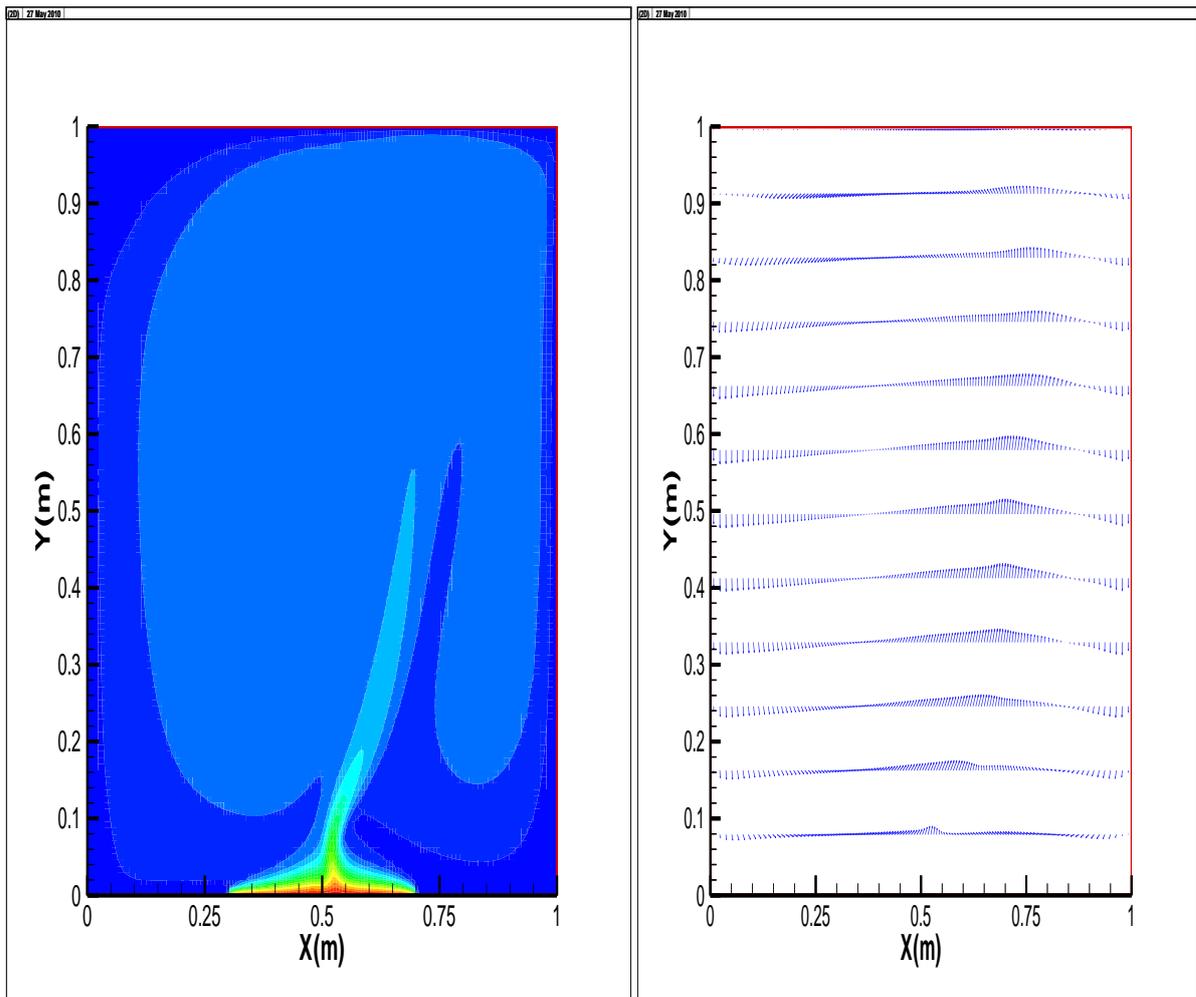


Fig.IV.5: Distribution de température (a) et de la vitesse (b) de l'air dans l'espace globale ($1\text{m} \times 1\text{m}$) avec $T_w = 473\text{K}$

Le but essentiel de cette simulation numérique de la convection naturelle qui est provoquée par le chauffage d'un porte substrat est d'étudier l'effet de la variation de la température de substrat sur les propriétés thermodynamiques de l'air, particulièrement sur la température et la vitesse dans chaque point de l'espace exploré, situé entre le substrat et le bec. Etant donné que l'intérêt de ce travail est pratiquement limité par la position du bec générateur du spray et du substrat sur lequel se forme la couche mince nous ne présenterons que les résultats dans ce domaine.

On délimite le domaine d'intérêt par : (substrat) $0 \leq Y \leq 5cm$ (bec)

IV.2.A) Résultats de la distribution de température et de vitesse

L'ensemble des figures IV.7-IV.10 représente les distributions de la température et de la vitesse de l'air dans un domaine assez large ($0 \leq Y \leq 5cm$ et $0.3 \leq X \leq 0.7m$), ce dernier représente la dimension du porte substrat, pour différentes températures de substrat situées dans le domaine : 200-400°C. Dans ce cas où le phénomène de la convection naturelle de l'air ascendant qui est causée par une plaque horizontale chauffée, les nombres adimensionnels Pr et Gr sont respectivement de l'ordre de 0.7 et $6 \cdot 10^8$ [10].

Les figures (IV.6-IV.9) **(a)** montrent qu'en général, les distributions de la température de l'air ont la même forme, sont presque symétriques par rapport à l'axe vertical passant par le centre du substrat. La variation de la température de l'air T_g est bidimensionnelle, verticale suivant Y et horizontale suivant X . Les distributions de la vitesse de l'air sont illustrées dans les figures (IV.6-IV.9) **(b)**, on remarque que la convection n'est pas répartie de manière homogène au dessus du substrat mais elle est variable par zone. La composante verticale de la vitesse selon Y est plus importante que celle selon X . on note aussi qu'à fortes température il y'a apparition de courant inverse.

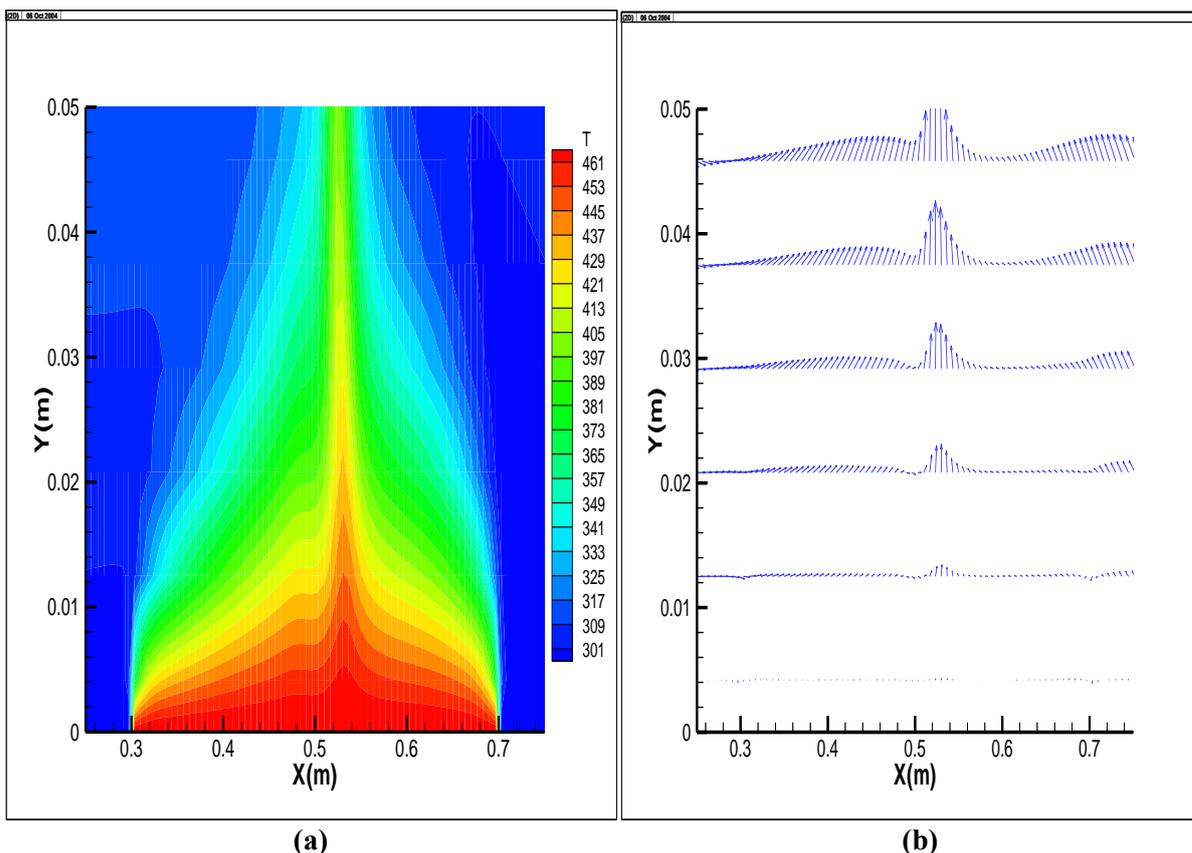


Fig.IV.6 : Distribution de température (a) et de la vitesse de l'air (b) dans l'espace bec- substrat (5cm) avec $T_w = 473k$.

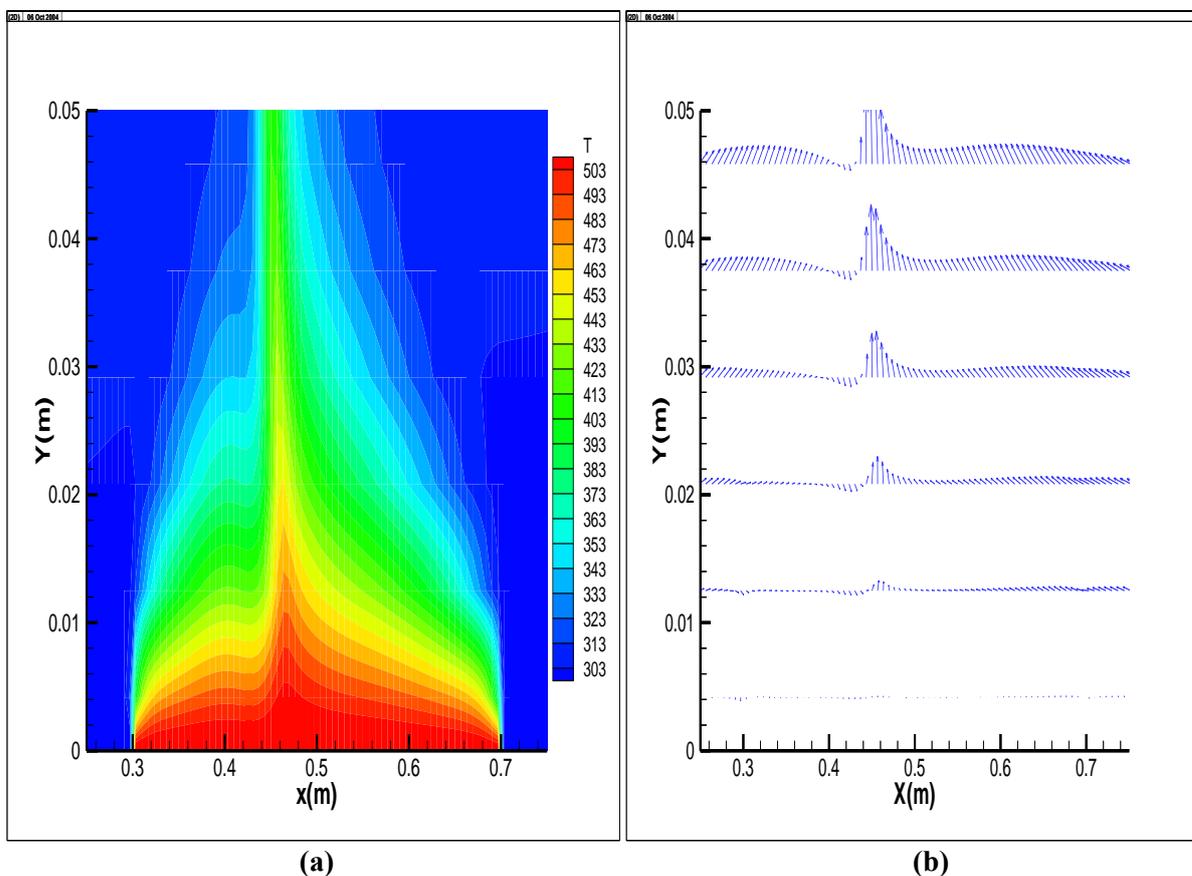


Fig.IV.7 : Distribution de température (a) et de la vitesse de l'air (b) dans l'espace bec- substrat (5cm) avec 523k.

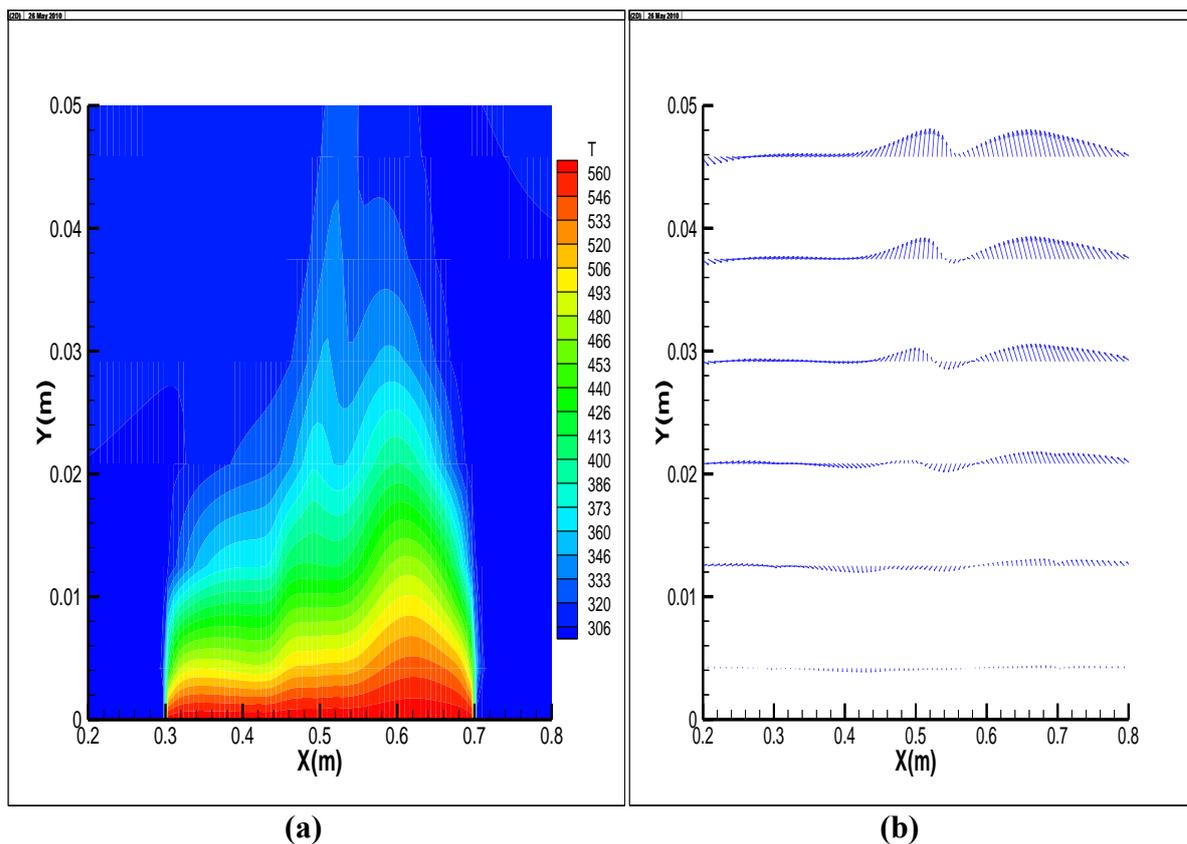


Fig.IV.8: Distribution de température (a) et de la vitesse de l'air (b) dans l'espace bec-substrat (5cm) avec $T_w = 573k$.

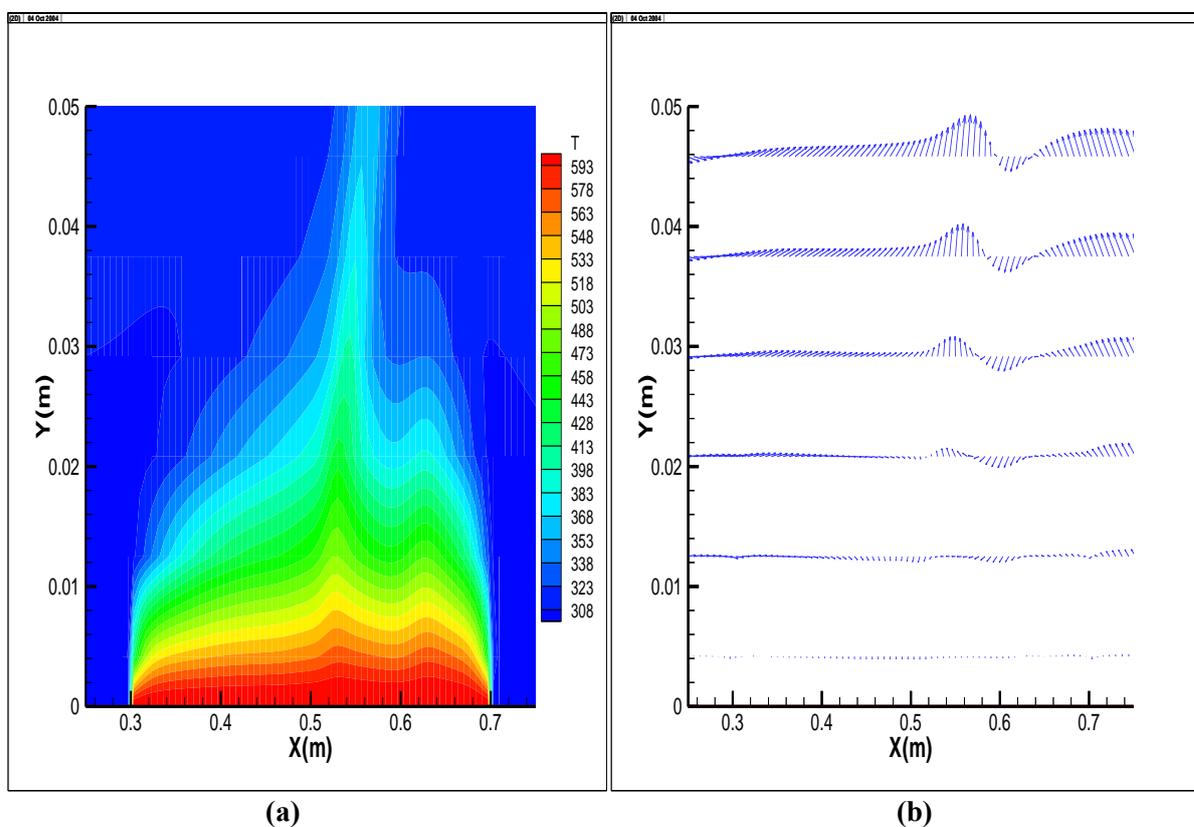


Fig.IV.9 : Distribution de température (a) et de la vitesse de l'air (b) dans l'espace bec-substrat (5cm) avec $T_w = 623k$.

IV.2.B) Résultats des évolutions de la température et de la vitesse de l'air :

Pour avoir une idée générale sur les variations de la température et de la vitesse de l'air dans le domaine choisie, nous avons représentés dans les figures IV.10 et IV.11 les évolutions de la température de l'air T_g et la composante verticale de la vitesse v_g (sans dimension) entre le porte substrat et le bec pour différents positions X (à partir le centre vers le sens positive). Les figures montrent qu'au niveau de la surface du substrat, la température et la vitesse de l'air prennent respectivement les valeurs T_w et 0 imposées par les conditions aux limites. Comme il est montré sur les figures (a), la température de l'air décroît dans les deux sens, vertical suivant Y et horizontal à partir du centre vers l'extérieur, Ce qui donne une température maximale située au voisinage de l'axe central du substrat ($X = 0.5m$). Les figures (b) montrent, de manière générale, que la vitesse évolue de manière inverse, c-à-d croît dans le sens Y . L'examen de ces évolutions montre que les gouttes du jet spray ne sont pas soumises aux mêmes conditions de température et de poussée d'air par convection, celles qui chutent sur l'axe Y se déplacent sur une zone plus chaude que les autres qui sont situées plus loin.

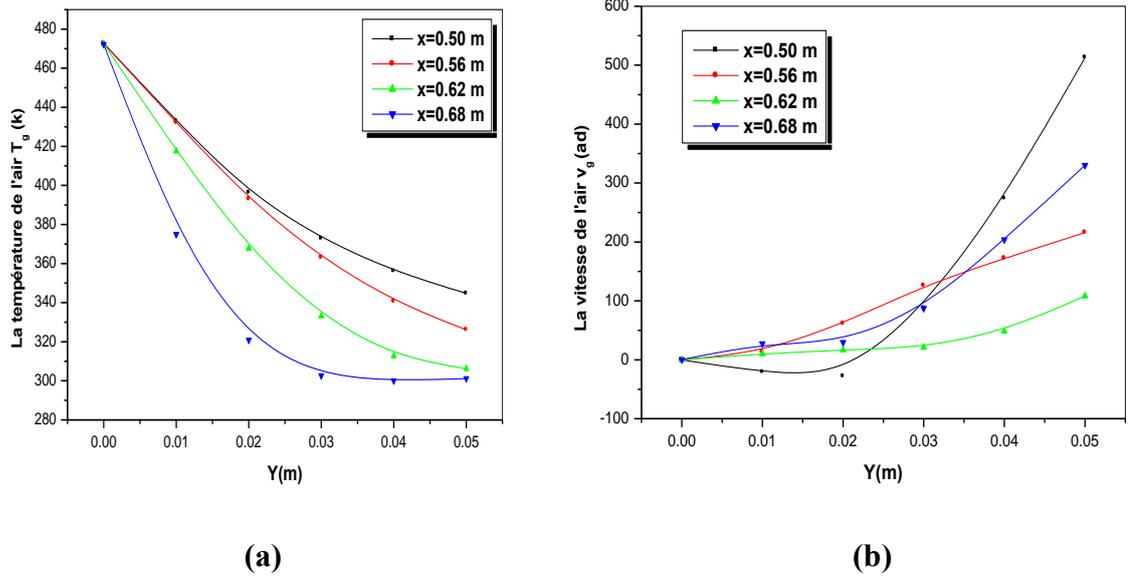


Fig.IV.10 : Evolutions de la température (a) et de la composante verticale v de la vitesse de l'air (b) dans l'espace bec-substrat pour différentes positions x avec $T_w = 473k$.

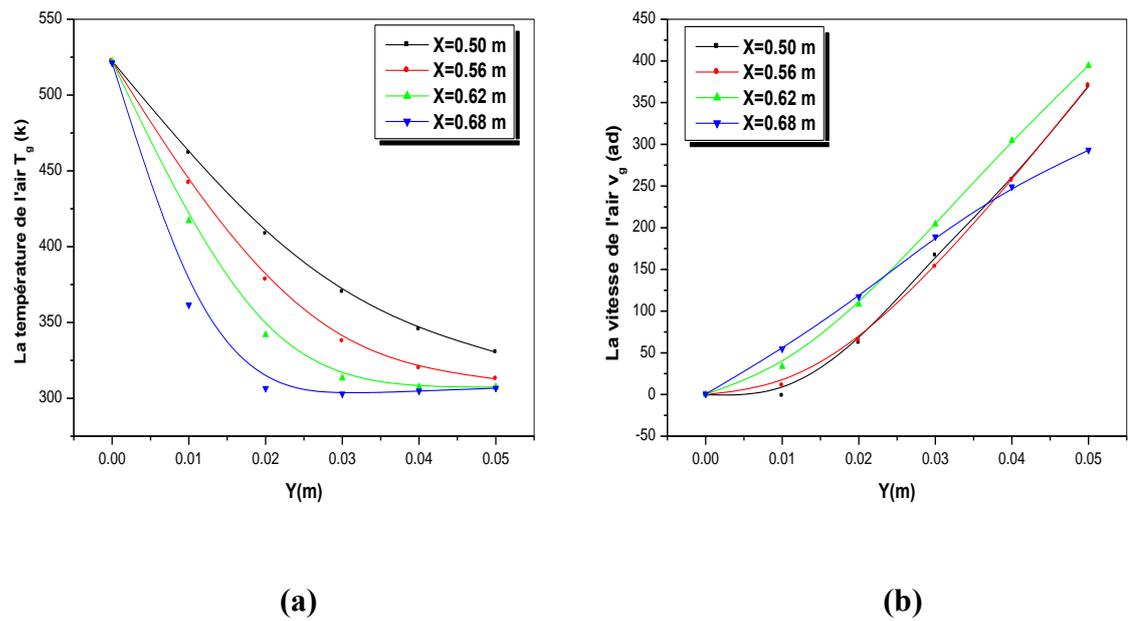


Fig.IV.11 : Evolutions de la température (a) et de la composante verticale v de la vitesse de l'air (b) dans l'espace bec-substrat pour différentes positions x avec $T_w = 523k$

IV.2.C) Les évolutions de T_g et v_g axiale au centre du substrat

Pour simplifier l'étude de la gouttelette de ($ZnCl_2 + Eau$) dans ce domaine, on suppose que sa chute s'effectue selon l'axe Y perpendiculaire au substrat et passant par le centre ($x = 0.5m$). Dans ce cas, l'ensemble des figures IV.12- IV.15 schématise les évolutions de la température et de la vitesse de l'air sur l'axe Y (substrat-bec) pour différentes température T_w (473 – 623k). Toutes les figures nous permettent de voir clairement que la température de l'air diminue tandis que sa vitesse augmente avec Y . Les variations montrent aussi que la gamme de diminution de T_g ou l'augmentation de la vitesse v_g dépendent spécialement de la température de substrat. Elles sont différentes l'une de l'autre, par exemple pour $T_w = 473k$, les valeurs de T_g et v_g sont comprises dans la gamme : (473 – 350k) et (0 – 0.35m/s) respectivement et pour $T_w = 573k$, ces valeurs sont situées dans la gamme: (573 – 325k) et (0 – 0.55m/s) respectivement. A la position du bec ($Y = 0.05m$) la valeur de la vitesse de l'air la plus grande (0.75m/s) correspond la température $T_w = 623k$, et à la même position $v_g = 0.22m/s$ pour $T_w = 523k$.

Les résultats obtenus dans cette partie sont exploités pour être utilisés comme données dans notre étude ultérieure. Pour minimiser le nombre de données en température et en vitesse de l'air nous avons approximés (moindres carré) ces variations par des relations simples.

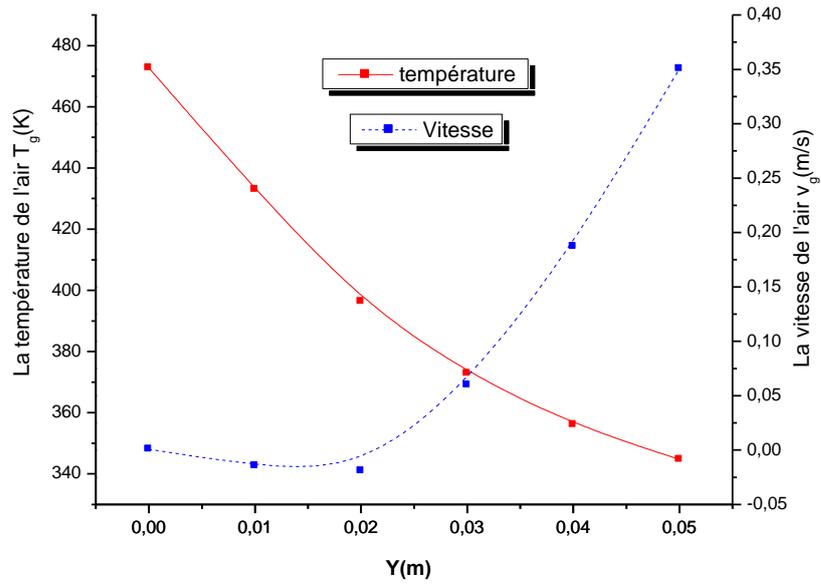


Fig.IV.12 : Evolutions de la température et de la composante verticale v de la vitesse de l'air dans l'espace bec-substrat au centre ($x = 0.5m$) pour $T_w = 473k$.

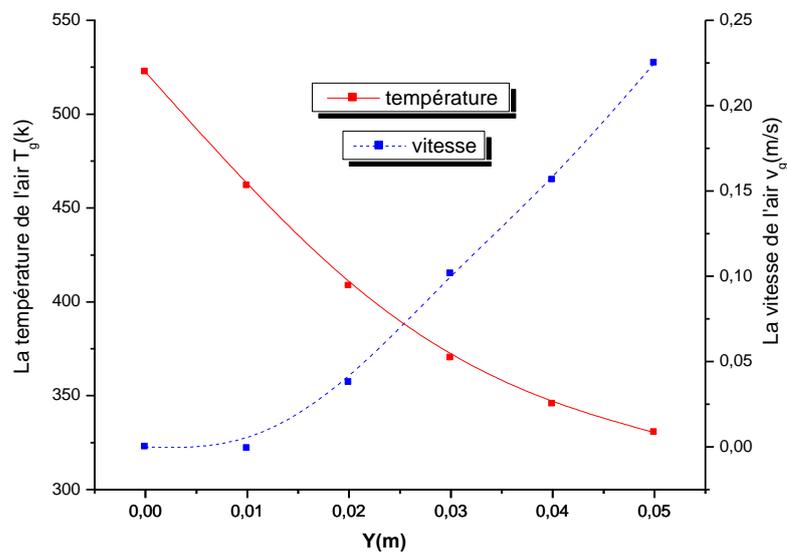


Fig.IV.13: Evolutions de la température et de la composante verticale v de la vitesse de l'air dans l'espace bec-substrat au centre ($x=0.5m$) pour $T_w = 523k$.

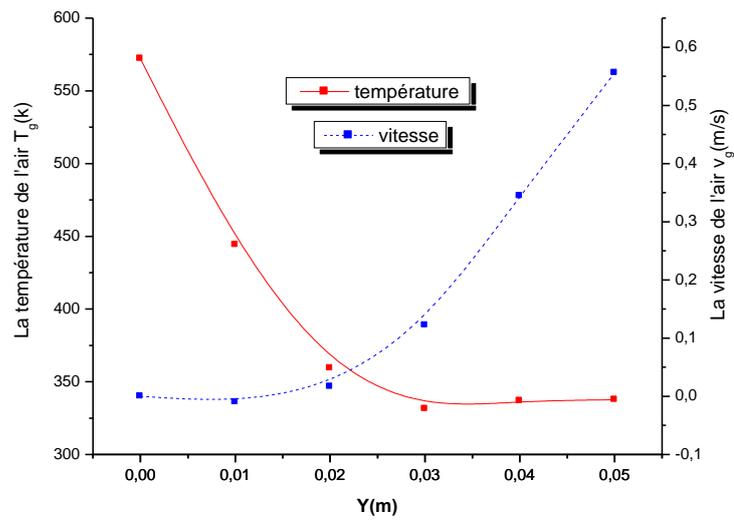


Fig.IV.14 : Evolutions de la température et de la composante verticale v de la vitesse de l'air dans l'espace bec-substrat au centre ($x = 0.5m$) pour $T_w = 573k$.

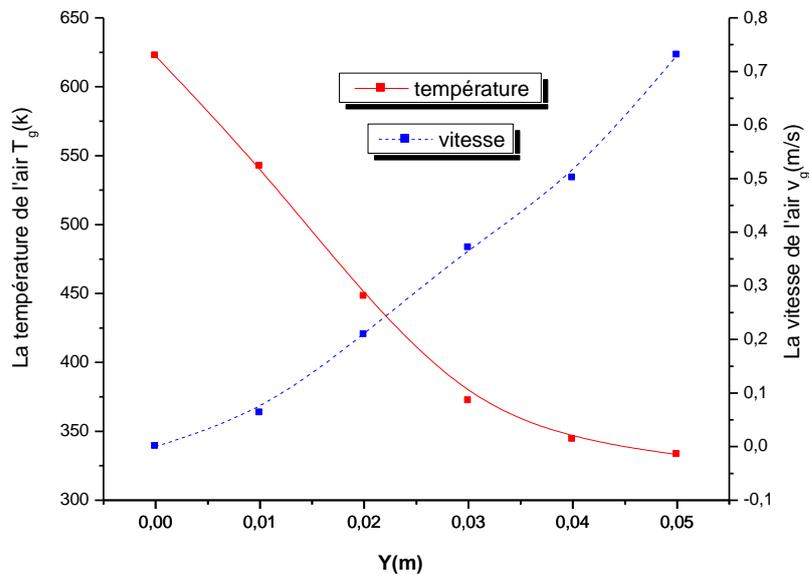


Fig.IV.15 : Evolutions de la température et de la composante verticale v de la vitesse de l'air dans l'espace bec-substrat au centre ($x = 0.5m$) pour $T_w = 623k$.

IV.2.D) Validation des résultats numériques avec ceux de la mesure

Dans le but de valider nos résultats obtenus par la simulation numérique nous avons effectués des mesures de la température sur l'espace bec-substrat. Pour cela, nous avons utilisé un enregistreur programmable et multivoies de température, de type PHILIPS PM 8237 A avec des thermocouples chromel-alumel (type K). Les thermocouples ont été disposés le long de l'axe vertical et distant de 1 cm l'un de l'autre. L'ensemble des résultats sont regroupés sur les figures IV.16 (a ; b ; c ; d). On remarque que les allures des variations de la température sont similaires avec de légères différences dans les valeurs.

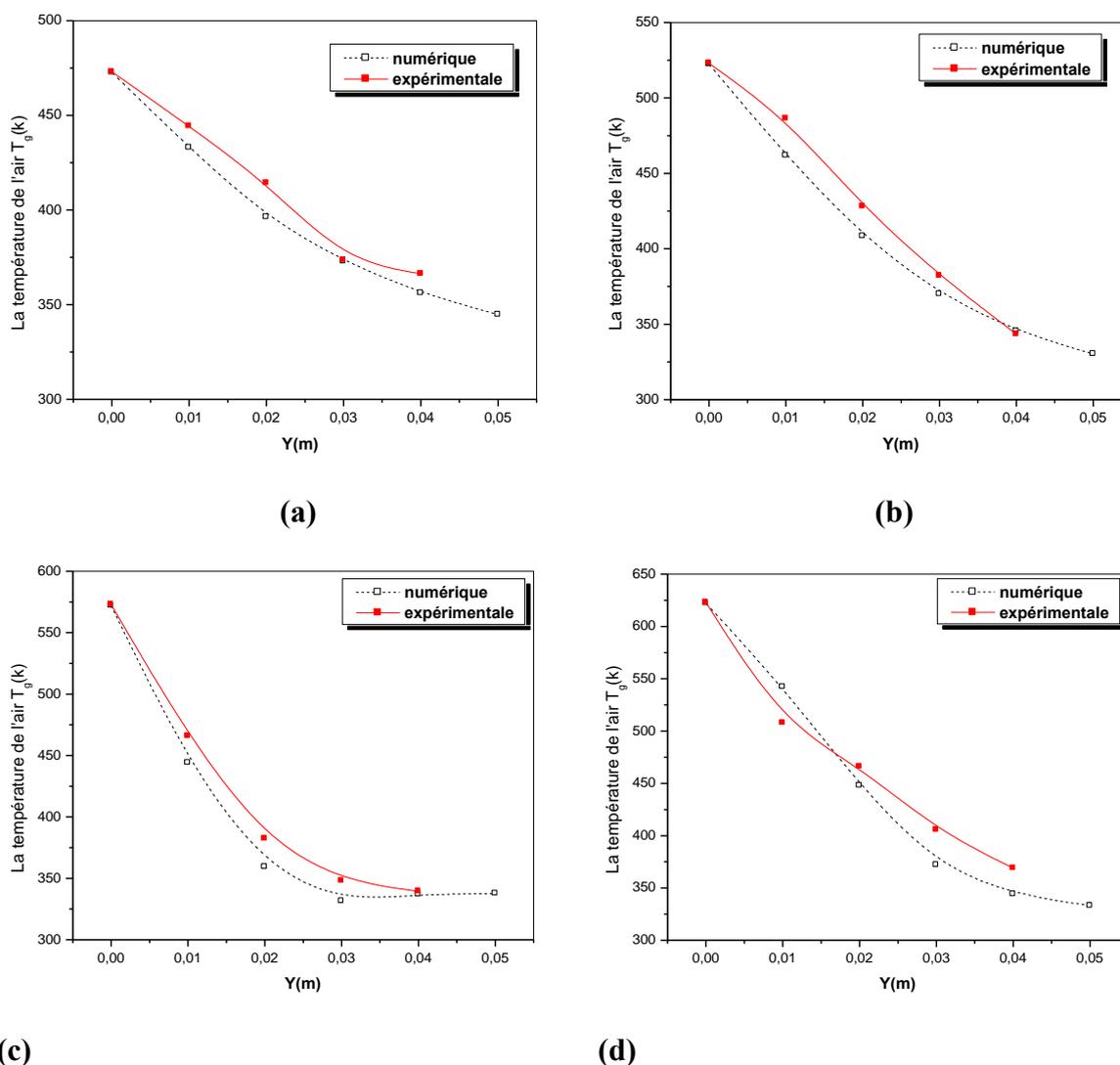


Fig.IV.16 : La comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux de l'évolution axiale de la température au centre ($x = 0.5m$) pour des températures T_w variant de 473-623k.

Pour l'estimation de la vitesse d'écoulement de l'air généré par la convection due au chauffage du substrat nous avons effectué des mesures le long de l'axe vertical au dessus et au dessous du substrat. Ces mesures ont été obtenues grâce à un anémomètre à fils chaud de type Airflow TA₂ dont la gamme de mesure varie de 0 – 15 m/s. Les résultats des mesures sont donnés dans le tableau IV.1 ci-dessous :

Température de substrat T_w (°C)		150	200	250	300	350
La vitesse de l'air au dessous du substrat v_g (ms^{-1})		0.15	0.15	0.2	0.15	0.35
La vitesse de l'air au dessus de substrat v_g (ms^{-1}) Pour différentes distances $h_{bec-substrat}$	20cm	0.15	0.15	0.15	0.15	0.4
	25cm	0.22	0.15	0.22	0.22	0.35
	30cm	0.3	0.22	0.3	0.3	0.3
	35cm	0.3	0.35	0.5	0.5	0.4
	40cm	0.35	0.4	0.4	0.55	0.5
	450cm	0.3	0.45	0.55	0.6	0.55
	50cm	0.45	0.5	0.6	0.7	0.55

Tableau IV.1 : les mesures de la vitesse de l'air au dessous et au dessus de la porte substrat pour différentes distances Y .

Les résultats présentés dans le tableau IV.1 montrent clairement que, pour toutes les températures de substrat T_w , la vitesse de l'air due à la convection augmente avec Y et justifie les variations croissantes des résultats numériques.

IV.3- COUPLAGE DES MODELES DE LA GOUTTE AVEC CELUI DU MILIEU CONVECTIF :

Pour décrire le phénomène de manière rigoureuse nous avons procédé à un couplage entre les deux modèles, d'une part, celui de la convection de l'air créé par le chauffage du substrat et, d'autre part, le modèle de l'évolution de la goutte. Pour être dans les conditions de l'expérience, nous avons étudié l'influence de quatre paramètres fondamentaux sur l'évolution de la goutte pendant sa chute entre le bec et le substrat. Ces paramètres sont la température de substrat (T_w), le diamètre de la goutte (D_d), la hauteur de la chute c-à-d la distance bec-substrat et la concentration du sel dans le liquide (fraction solide).

IV.3.1 Etude de l'effet de la température du substrat sur la goutte

La figure IV.17 illustre l'effet de la température du substrat sur la dynamique de la gouttelette et son évaporation dans un milieu d'air à température et vitesse variables comme il a été décrit dans la partie précédente (IV.2). Les conditions initiales de la gouttelette à la sortie du bec sont : position $y_d = 0$, diamètre de $40\mu m$, température égale à $20^\circ C$ et une vitesse nulle.

Les figures IV.17a et IV.17b représentent l'effet de la température T_w sur la variation de la masse liquide et du diamètre de la goutte (eau+ $ZnCl_2$) en fonction du temps et/ou de la position y_d . Le diamètre de la goutte diminue plus rapidement lorsque T_w est plus grande ($T_w = 350^\circ C$), ce résultat est la conséquence de l'absorption d'une quantité de chaleur plus importante lorsque le milieu dans lequel évolue la goutte est plus chaud, comme il est montré sur la figure IV.17c où le phénomène d'évaporation devient plus rapide IV.17a. Comme illustre la figure IV.17d, à T_w plus élevée, on obtient une vitesse v_d plus grande. D'après la figure IV.17e qui présente l'influence de la température de substrat sur la variation de la fraction solide de la goutte. On remarque que des gouttes identiques peuvent atteindre différentes positions qui dépendent des températures des milieux est ce avant d'avoir la valeur critique de la fraction $Sf = 1$.

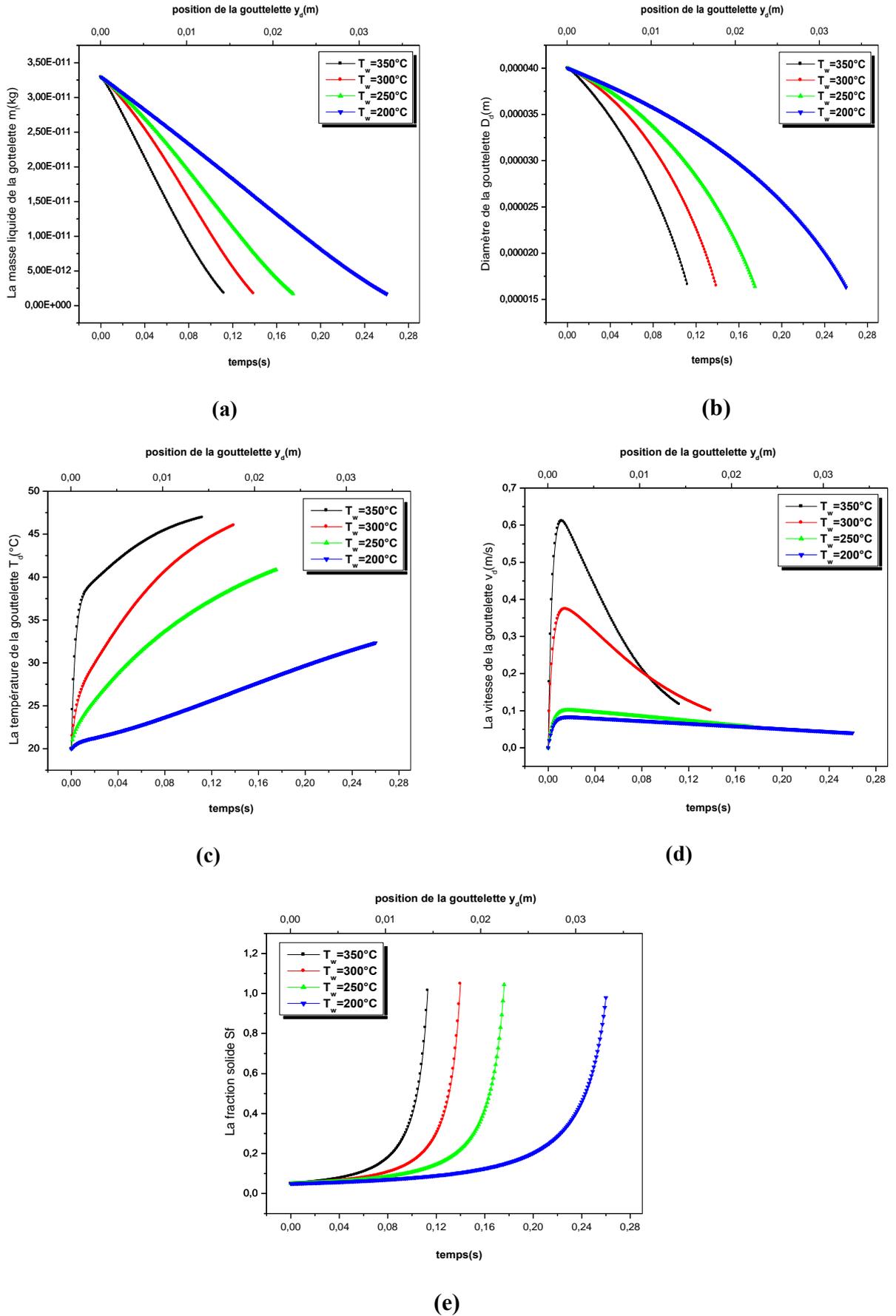


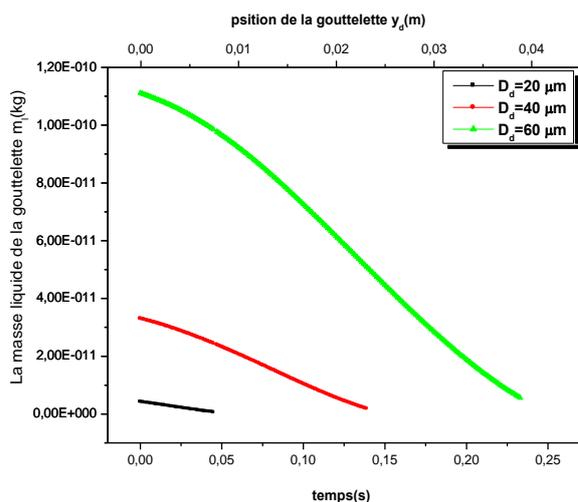
Fig.IV.17 : L'effet de la température du substrat T_w sur l'évaporation (a,b,c) et la dynamique (d,e) de la gouttelette : (a) masse liquide, (b) diamètre, (c) température, (d) vitesse et (e) fraction solide avec les conditions initiales: $h_{bec-substrat} = 0.05\text{ m}$, $D_d = 40\mu\text{m}$ et $Sf = 0.05$.

IV.3.2 Etude de l'effet du diamètre initial de la goutte

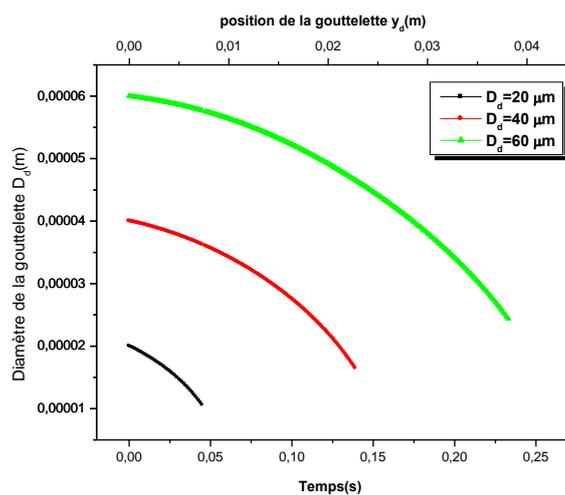
La figure IV.18 décrit l'effet du diamètre initial sur la dynamique de la gouttelette et son évaporation dans un milieu d'air à température et vitesse variables provoqué par la température de substrat $T_w = 300^\circ C$. Les tailles initiales choisies sont $20\mu m$, $40\mu m$ et $60\mu m$. Les conditions initiales de la gouttelette à la sortie du bec sont : position $y_d = 0$, température égale à $20^\circ C$ et une vitesse nulle.

La figure IV.18a montre que la masse liquide d'eau de la goutte de $20\mu m$ diminue plus rapide que de la goutte de $60\mu m$ mais cette quantité reste élevée par rapport la masse solide dans la petite goutte que les autres où les deux masses sont égales comme il est illustré dans Fig.IV.18e ($Sf = 0.4$ pour $D_d = 20\mu m$ et $Sf \cong 1$ pour $D_d = 40$ et $60\mu m$). En parallèle, au cours du processus d'évaporation, le diamètre devient plus petit quand la goutte de taille baisse, elle se prend la position de $0.005m$ dans un temps de $0.05s$ tandis que la goutte de diamètre initial $40\mu m$ atteint la position $0.02m$ dans un temps de $0.14s$ avec un nouveau diamètre de $\sim 17\mu m$ (Fig.IV.18b).

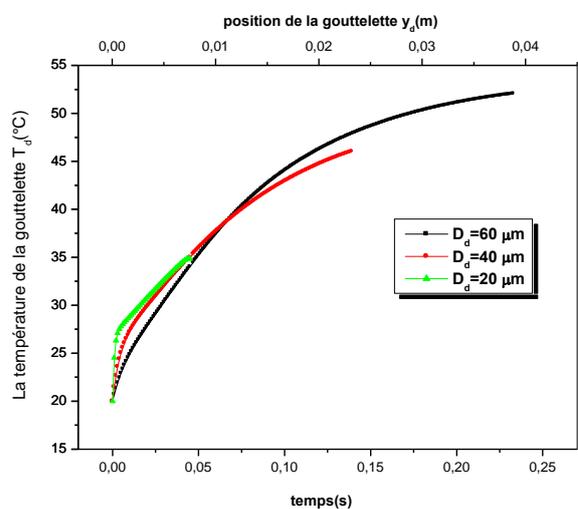
La figure IV.18c montre que, la température la plus élevée est de la goutte de taille grande, mais selon les figures IV.18a et IV.18b, chaque goutte a la valeur de température nécessaire pour atteindre son temps d'évaporation. La même remarque pour la vitesse dans la figure IV.18d, où la goutte du diamètre la plus grand, et non loin du bec, atteint une vitesse élevée par rapport aux autres, mais la vitesse de la petite goutte diminue plus vite pendant le processus d'évaporation. Tous ces changements peuvent être justifiés par le fait que le taux d'évaporation et le coefficient k_m de transfert de masse, les deux augmentent avec la vitesse et avec la température.



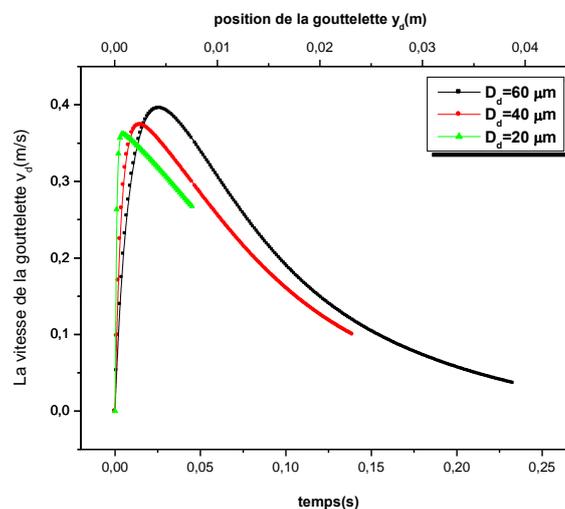
(a)



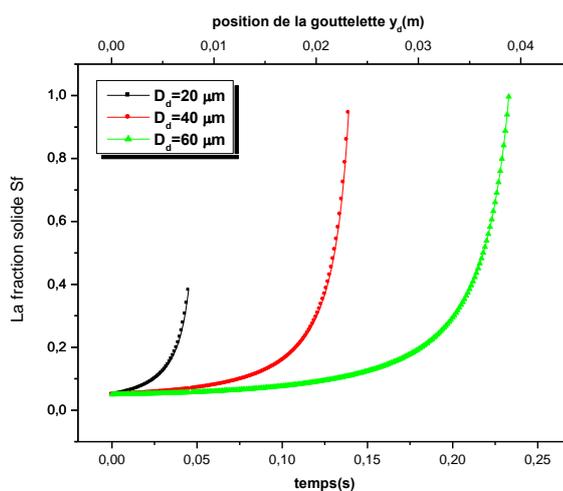
(b)



(c)



(d)



(e)

Fig.IV.18 :L'effet du diamètre initiale de la gouttelette ($\text{ZnCl}_2 + \text{Eau}$) sur l'évaporation (a,b,c) et la dynamique (d,e) de la gouttelette : (a) masse liquide, (b) diamètre, (c) température, (d) vitesse et (e) fraction solide avec les conditions initiales: $T_w = 300^\circ\text{C}$, $h_{bec-substrat} = 0.05 \text{ m}$ et $Sf = 0.05$.

IV.3.3 Etude de l'effet de la fraction solide initiale sur la goutte

Afin d'étudier l'effet de la quantité des particules solides sur la dynamique et le taux d'évaporation de la goutte, différentes fractions solides initiales $Sf = 5\%$, 10% et 15% ont été choisies. La figure IV.3 schématise les résultats obtenus pour une gouttelette dont les conditions initiales à la sortie du bec sont : position $y_d = 0$, $D_d = 40\mu m$, température égale à $20^\circ C$ et une vitesse nulle qui chute dans un milieu d'air à température et vitesse variables provoqué par la température de substrat $T_w = 300^\circ C$.

Les courbes dans la Fig. IV.19a qui présentent les évolutions des masses liquides des trois gouttelettes. Ces dernières ont le même profil car le taux d'évaporation est régi par les mêmes équations. Si la quantité de $ZnCl_2$ dans la goutte est grande, cette dernière elle s'évapore plus vite que celle de Sf petite. Pour un déplacement de $y_d = 2.1cm$ ($0.11s$), la masse liquide de celle de $Sf = 0.15$, diminue de $3.18 \cdot 10^{-11}$ à $0.5 \cdot 10^{-11} kg$ alors que la goutte ayant $Sf = 0.05$, elle atteint la position $2.6m$ ($0.14s$) avec une masse liquide égale $\sim 10^{-13} kg$.

La même remarque pour les variations de diamètre D_d (Fig. IV.19b), dans le même temps et la même distance, D_d ($Sf = 0.15$) décroît de la valeur initial à la valeur $23\mu m$ et D_d ($Sf = 0.05$) diminue jusqu'à $17\mu m$. La Fig. IV.19c montre des variations similaires des températures, indépendamment de la fraction solide initiale car elles régissent par la même équation sauf que à l'état finale elles ont des valeurs différentes selon les concentrations initiales ($T_d(Sf = 0.05) = 46^\circ c$ et $T_d(Sf = 0.15) = 44,6^\circ c$). La même remarque sur les variations de la vitesse v_d (Fig. IV.19d) sauf que cette dernière elle diminue de $\sim 0.37m/s$ jusqu'à $\sim 0.13m/s$ pour $Sf = 0.15$ et jusqu'à $\sim 0.10m/s$ pour $Sf = 0.05$.

La figure IV.19e montre les évolutions de la fraction solide de la gouttelette pour des trois valeurs initiales du même paramètre. Ce facteur augmente de la valeur initiale à la valeur critique qui est égale 1. La fraction de la goutte de Sf initiale élevée atteint cette valeur critique dans une distance et temps petits.

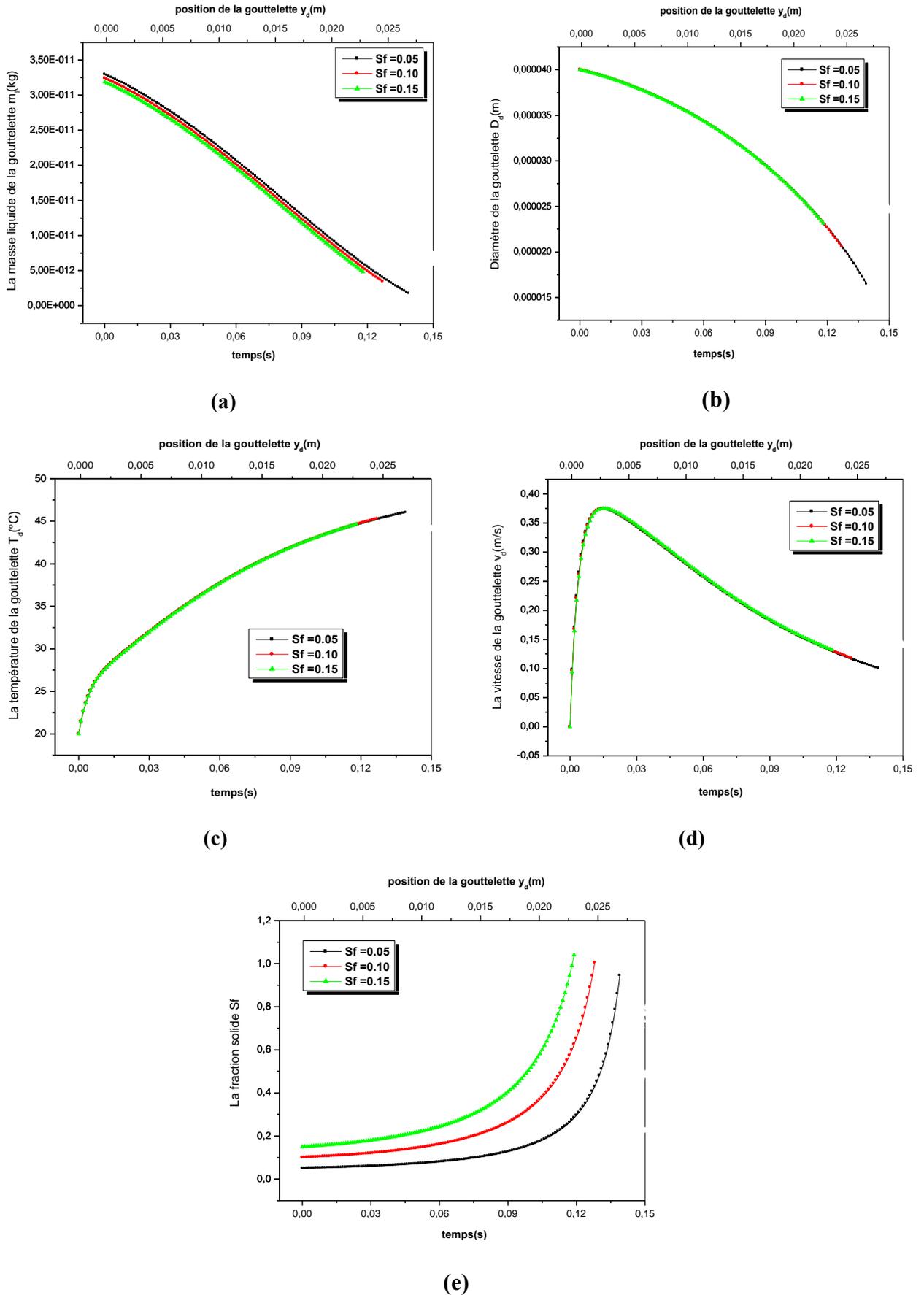
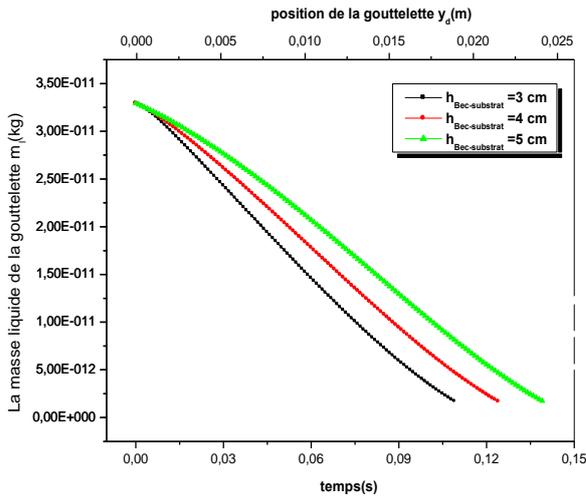


Fig.IV.19 :L’effet de la fraction solide initiale sur l’évaporation (a,b,c) et la dynamique (d,e) de la gouttelette : (a) masse liquide, (b) diamètre , (c) température, (d) vitesse et (e) fraction solide avec les conditions initiales : $D_d = 40\mu\text{m}$, $T_w = 300^{\circ}\text{C}$, et $h_{bec-substrat} = 0.05\text{ m}$.

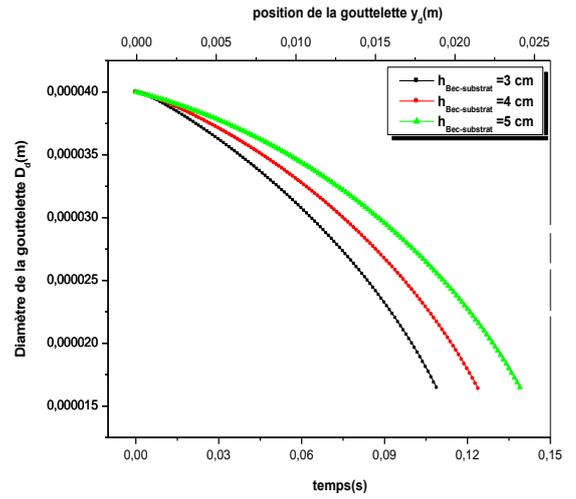
IV.3.4 Etude de l'effet de la distance bec-substrat sur la goutte

Les figures IV.20 illustre l'effet de changer la distance entre le bec et le porte substrat sur la dynamique de la gouttelette et son évaporation dans un milieu d'air à température et vitesse variables provoqué par la température de substrat $T_w = 300^\circ\text{C}$. La chute de la goutte limité par une hauteur de $h_{\text{bec-substrat}}$ égale (3,4 et 5 cm). Les conditions initiales de la gouttelette à la sortie du bec sont: position $y_d = 0$, diamètre de $40\mu\text{m}$, température égale à 20°C et une vitesse nulle.

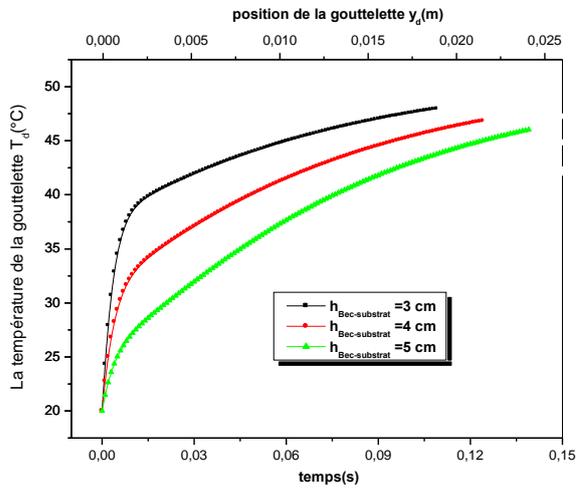
Les figures IV.20a et IV.20b représentent l'effet de distance $h_{\text{bec-substrat}}$ sur les variations de la masse liquide et du diamètre de la goutte en fonction du temps et/ou de la position y_d . Pour différentes valeurs de la distance (3,4 et 5 cm), le diamètre de la goutte ($\text{ZnCl}_2 + \text{eau}$) diminue plus rapide dans une distance très petite lorsque la position du bec plus proche de substrat (3 cm), cette résultat due à la température de la goutte qui croit pendant sa chute et devient plus élevé lorsque le milieu est plus chaud ce qui est montré dans la figure IV.20c, donc par conséquence l'évaporation aussi devient plus vite IV.20a. La figure IV.20d qui décrit l'effet de la variation de la distance sur la dynamique de la goutte pendant sa chute, montre que la vitesse v_d est plus grand quand la position du bec plus loin du substrat, ça est due à la force de drag qui très grande lorsque le bec plus proche du substrat (la vitesse de l'air grande). D'après la figure IV.20e qui présente la variation de la fraction solide de la goutte pour différentes position du bec, on remarque que, la goutte toujours atteint différentes positions avec la même valeur critique de la fraction S_f qui est égale 1, donc on note ici que, quelque soit $h_{\text{bec-substrat}}$, pendant le processus d'évaporation la goutte atteint avec la même masse et le même diamètre sauf que sa position et sa temps d'évaporation varient selon la distance bec-substrat.



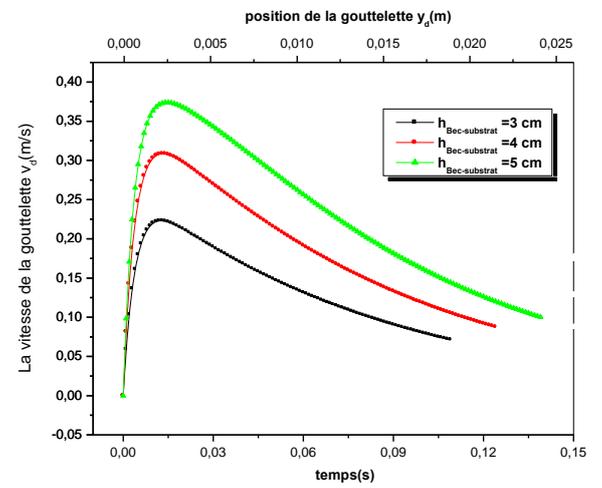
(a)



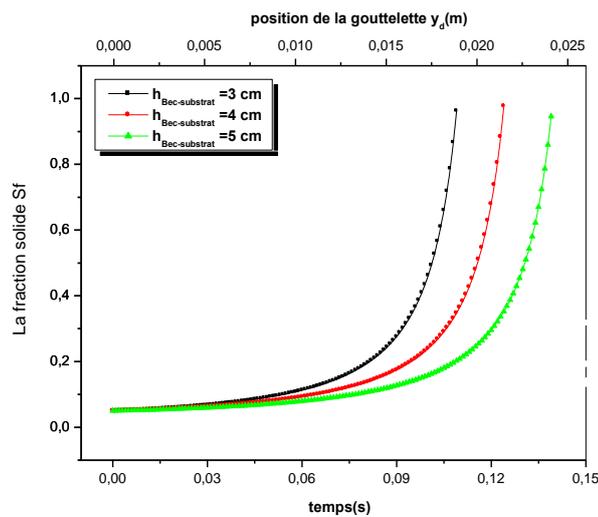
(b)



(c)



(d)



(e)

Fig.IV.20: L'effet de la distance $h_{bec-substrat}$ sur l'évaporation (a,b,c) et la dynamique (d,e) de la gouttelette : (a) masse liquide, (b) diamètre, (c) température, (d) vitesse et (e) fraction solide avec les conditions initiales : $T_w = 300^\circ C$, $D_d = 40\mu m$ et $Sf = 0.05$.

Conclusion générale

L'étude que nous avons effectuée a porté sur un jet en spray d'une solution chimique de chlorure de zinc avec l'eau [$ZnCl_2$:Eau] dans un milieu convectif d'air au dessus d'un porte substrat chauffé de température uniforme et constante varie de $200 - 400^\circ C$.

Dans la première partie de notre travail nous avons effectué une simulation numérique de la convection naturelle de l'air qui est provoqué par le chauffage d'un porte substrat, et nous avons étudié l'influence de la température de substrat sur les propriétés thermodynamiques de l'air, particulièrement sur la température et la vitesse dans chaque point de l'espace exploré, situé entre le substrat et le bec ($(\text{substrat}) 0 \leq Y \leq 5\text{cm} (\text{bec})$).

Les résultats obtenus montrent que la température et la vitesse de l'air varient à partir des valeurs maximales imposées au niveau de la surface du substrat vers l'extérieur, sauf que la température décroît tandis que la vitesse croît. Selon l'axe vertical passant au centre du porte substrat vers le bec, et pour une température de substrat $T_w = 473 - 623\text{k}$, elles comprennent respectivement dans le domaine: [T_w imposée, 320k] et [0 imposée, 0.7m/s].

Ces résultats obtenus par la simulation numériques sont en bon accord avec ceux des mesures effectuées au laboratoire, elles sont exploitées pour être utilisés comme données du milieu dans lequel on fait l'étude d'un modèle de chute d'une gouttelette spray dans le but de voir ces influences sur les propriétés thermodynamiques et géométrique de la gouttelette .

Dans la deuxième partie de notre travail nous avons fait une modélisation numérique de la chute d'une gouttelette spray [$ZnCl_2$:Eau] dans un milieu gazeux d'air chauffé, et nous avons étudié l'influence de quelques paramètres fondamentaux sur le taux d'évaporation et la dynamique de la gouttelette. Ces paramètres sont les propriétés thermodynamiques du milieu ambiante (air), le diamètre de la goutte, la fraction solide, la hauteur de la chute entre le bec et le substrat.

Dans cette dernière partie, nous avons noté que la goutte spray pendant le processus d'évaporation, sa masse liquide et son diamètre décroît tandis que sa température et sa vitesse croît. Le processus d'évaporation limité par deux conditions nécessaires proches aux conditions expérimentales de formation les couches minces, ces conditions sont la distance bec-substrat et la valeur 1 de la fraction solide. Selon les résultats, cette dernière est toujours augmente pendant l'évaporation de la valeur initial jusqu'à une valeur inférieur ou égale à 1.

La synthèse des résultats de cette partie nous permet de dégager les points suivants :

- ✓ La gouttelette [$ZnCl_2$: *Eau*] s'évapore plus vite quand le milieu est plus chaud.
- ✓ La goutte spray la plus petite s'évapore plus vite que celle grand.
- ✓ La gouttelette d'une quantité de sel important s'évapore rapidement.
- ✓ Si les propriétés thermodynamiques de l'air variables, la distance bec-substrat faire diminue le temps d'évaporation lorsqu'elle est petite et n'ont aucun effet si des propriétés du milieu en chaque point entre le bec et le substrat sont constantes.

Références Bibliographiques

- [1] **N. Bremond**, *Stabilité et atomisation des nappes liquides*, Thèse de doctorat, l'Université de Provence - Aix-Marseille I, (2003).
- [2] **M. Deluca**, *Contribution à la modélisation de la pulvérisation d'un liquide phytosanitaire en vue de réduire les pollutions*, Thèse de doctorat, l'Université de la méditerranée, Aix-Marseille II, (2007).
- [3] **A. Frohn, N. Roth**, *Dynamics of Droplets*, Germany, (2000).
- [4] **H. Labidi**, *Elaboration par pulvérisation pyrolytique et caractérisation de couches minces semi-conductrices et transparentes d'oxyde de zinc : perfectionnement du système de dépôt*. Thèse de magistère, Université d'Oum El-Bouaghi, (2007).
- [5] **F. Greuter, G. Blatter**, *Electrical properties of grain boundaries in polycrystalline compound semiconductors*, *Semicond. Technol.* 5 111 (1990).
- [6] **A. Hafdallah**, *Étude du dopage des couches minces de ZnO élaborées par spray ultrasonique*, Thèse de magistère, Université de Constantine (2007).
- [7] **M. Khalid Fataoui**, *Développement de modèles thermomécaniques de construction de dépôts obtenus par projection thermique.-Modèle mécano thermique de l'étalement de la gouttelette*, Thèse de doctorat, l'Université de Limoges-France, L'université de Chouaib Doukali Eljadida-Maroc, (2007).
- [8] **A. Bouhezza**, *Etude d'une couche limite laminaire en convection mixte: effet de la température*, Thèse de magister, université de Skikda (2007).
- [9] **J.H. Lienhard IV, J.H. Lienhard V**, *A heat transfer textbook third edition*, Published by Phlogiston Press Cambridge, Massachusetts, U.S.A (2003).
- [10] **J.F. Sacadura**, *Initiation aux transferts thermiques*, 4^e tirage Paris (1993).
- [11] **M. Massoud**, *Engineering Thermofluids, Thermodynamics: Fluid Mechanics, and Heat Transfer*, University of Maryland USA (2005).

- [12] **R.W. Fox, A.T. McDonald**, *Introduction to fluid mechanics*, third edition USA (1985).
- [13] **Suhas V. Patankar**, *Numerical heat transfer and fluid flow*, series in computational methods in mechanics and thermal sciences (1980).
- [14] **T. Boufendi**, Cours des volumes finis, 1^{ère} année post graduation physique énergétique et mécanique des fluides (2008).
- [15] **N.H. Pryds, J.H. Hattel, T.B. Pedersen, J. Thorborg**, *An integrated numerical model of the spray forming process*, Acta Materialia 50 4075-4091 (2002).
- [16] **M. Kadja, G. Bergles**, *Modelling of slurry droplet drying*, Applied Thermal Engineering 23 829-844 (2003).
- [17] **N. Reuge, B. Caussat**, *A dimensionless study of the evaporation and drying stages in spray pyrolysis*, Computers and Chemical Engineering 31 1088-1099 (2007).
- [18] **E. E. Michaelides**, *Particales, Bubbles & Drops - Their Motion, Heat and Mass Transfer*, USA (2006).
- [19] **Robert, H. Perru Don Green**, *Perry's chemical engineers handbook*, sixth Edition. pp3-135 (1980-1981).
- [20] **A. Missenard**, *conductivité thermique des solides, liquides, gaz et de leurs mélange*, 2^{ème} édition (1955).
- [21] **F. Mesbah**, Cours des méthodes numériques, 4^{ème} année physique énergétique et mécanique des fluides (2007).
- [22] **J.P. Naugier**, *Méthodes de calcul numérique, volume 2 fonctions des équations au dérivées*, Paries (2001).
- [23] **M. Aïn**, *savez vous parler FORTRAN ?*, Bruxelles (1993).
- [24] **Y. Ladam**, *Atomisation et évaporation dans un jet mixte hélium liquide/ hélium gazeux*, thèse de doctorat, université Joseph Fourier, Grenoble I, p15 (2000).

Annexes

Dans le chapitre II les équations (II.48) et (II.54) ne pourront être résolues que si la pression P est connue ou estimée. Si la pression correcte est connue, le champ de vitesse obtenu après la résolution du système algébrique satisfera l'équation de continuité. Comme la pression n'est pas connue, il est nécessaire une procédure pour calculer la pression.

I.1. L'algorithme SIMPLE

L'algorithme SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation) a été créé par Patankar et Spalding [13], et il est une procédure itérative commence par l'estimation de la pression. Soit P^* le champ de pression estimé. Les équations (II.48) et (II.54) sont résolues pour obtenir le champ de vitesse associé U^* et V^* :

$$a_p(i, j).U^*(i, j) = \sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb}U_{nb}^* + b_U(i, j) + [P^*(i, j) - P^*(i + 1, j)].\Delta Y(j) \quad (A.1)$$

$$a_p(i, j).V^*(i, j) = \sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb}V_{nb}^* + b_V(i, j) + [P^*(i, j) - P^*(i, j + 1)].\Delta X(i) \quad (A.2)$$

Où

b_U et b_V sont les termes de source ne contenant pas le terme de pression.

On définit la correction de la pression P' comme la différence entre la pression correcte P et la pression estimée P^* :

$$P = P^* + P' \quad (A.3)$$

De façon similaire on définit la correction des vitesses U' et V' comme la différence entre les vitesses correctes U, V et les vitesses U^* et V^* :

$$U = U^* + U' \quad (A.4)$$

$$V = V^* + V' \quad (A.5)$$

La substitution du champ de pression correct P dans les équations de conservation de la quantité de mouvement donne le champ de vitesse correct (U, V). Les équations discrétisées (II.48) et (II.54) lient le champ de vitesse correct avec le champ de pression correct.

La soustraction des équations (A.1) et (A.2) des équations (II.48) et (II.54) respectivement, donne :

$$\begin{aligned} a_p(i, j). [U(i, j) - U^*(i, j)] \\ = \sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb} [U_{nb} - U_{nb}^*] + b_U(i, j) + [P(i, j) - P^*(i, j)] \\ - (P(i + 1, j) - P^*(i + 1, j)). \Delta Y(j) \end{aligned} \quad (A. 6)$$

$$\begin{aligned} a_p(i, j). [V(i, j) - V^*(i, j)] \\ = \sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb} [V_{nb} - V_{nb}^*] + b_U(i, j) + [P(i, j) - P^*(i, j)] \\ - (P(i, j + 1) - P^*(i, j + 1)). \Delta X(i) \end{aligned} \quad (A. 7)$$

En utilisant les formules de correction (A.3)-(A.5) les équations (A.6) et (A.7) peuvent être réécrites ainsi :

$$a_p(i, j). U'(i, j) = \sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb} U'_{nb} + [P'(i, j) - P'(i + 1, j)]. \Delta Y(j) \quad (A. 8)$$

$$a_p(i, j). V'(i, j) = \sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb} V'_{nb} + [P'(i, j) - P'(i, j + 1)]. \Delta X(i) \quad (A. 9)$$

A ce moment une approximation est introduite :

Les termes

$$\sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb} U'_{nb} \text{ et } \sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb} V'_{nb}$$

Sont négligés pour simplifier (A.8) et (A.9). L'omission de ces termes est la principale approximation de l'algorithme SIMPLE. On obtient :

$$a_p(i, j). U'(i, j) = [P'(i, j) - P'(i + 1, j)]. \Delta Y(j) \quad (A. 10)$$

$$a_p(i, j). V'(i, j) = [P'(i, j) - P'(i, j + 1)]. \Delta X(j) \quad (A. 11)$$

Les équations (A.10) et (A.11) décrivent les corrections qui doivent être appliquées aux vitesses à travers les formules (A.4) et (A.5), ce qui donne les vitesses aux niveaux des faces du volume de contrôle :

$$U(i, j) = U^*(i, j) + \frac{(P'_P - P'_E) \cdot \Delta Y(j)}{a_p(i, j)} \quad (\text{A. 12})$$

$$U(i - 1, j) = U^*(i - 1, j) + \frac{(P'_W - P'_P) \cdot \Delta Y(j)}{a_p(i - 1, j)} \quad (\text{A. 13})$$

$$V(i, j) = V^*(i, j) + \frac{(P'_P - P'_N) \cdot \Delta X(i)}{a_p(i, j)} \quad (\text{A. 14})$$

$$V(i, j - 1) = V^*(i, j - 1) + \frac{(P'_S - P'_P) \cdot \Delta X(i)}{a_p(i, j - 1)} \quad (\text{A. 15})$$

Jusqu'à maintenant on a considéré les équations de conservation de la quantité de mouvement, mais le champ de vitesse, en même temps doit satisfaire l'équation de continuité (II.8).

L'équation de continuité discrétisée, obtenue par l'intégration de l'équation (II.8) sur le volume de contrôle présenté à la (Fig. II.3), est :

$$[U(i, j) - U(i - 1, j)] \cdot \Delta Y(j) + [V(i, j) - V(i, j - 1)] \cdot \Delta X(i) = 0 \quad (\text{A. 16})$$

La substitution des équations corrigées (A. 12) – (A. 15) dans l'équation de continuité discrétisée (A. 16) donne :

$$\left[U^*(i, j) + \frac{(P'_P - P'_E) \cdot \Delta Y(j)}{a_p(i, j)} - U^*(i - 1, j) - \frac{(P'_W - P'_P) \cdot \Delta Y(j)}{a_p(i - 1, j)} \right] \cdot \Delta Y(j) +$$

$$\left[V^*(i, j) + \frac{(P'_P - P'_N) \cdot \Delta X(i)}{a_p(i, j)} - V^*(i, j - 1) - \frac{(P'_S - P'_P) \cdot \Delta X(i)}{a_p(i, j - 1)} \right] \cdot \Delta X(i) = 0 \quad (\text{A. 17})$$

En regroupant les termes, on obtient l'équation de la correction de pression P' sous la forme générale suivante :

$$a_p P'_p = a_W P'_W + a_E P'_E + a_N P'_N + a_S P'_S + \overline{S'_p} \quad (\text{A. 18})$$

Où

$$a_E = \frac{\Delta Y(j)}{a_p(i, j)} \cdot \Delta Y(j) \quad (\text{A. 19})$$

$$a_W = \frac{\Delta Y(j)}{a_p(i - 1, j)} \cdot \Delta Y(j) \quad (\text{A. 20})$$

$$a_N = \frac{\Delta X(i)}{a_p(i,j)} \cdot \Delta X(i) \quad (\text{A. 21})$$

$$a_S = \frac{\Delta X(i)}{a_p(i,j-1)} \cdot \Delta X(i) \quad (\text{A. 22})$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S \quad (\text{A. 23})$$

$$\overline{S}_p' = [U^*(i,j) - U^*(i-1,j)] \cdot \Delta Y(j) + [V^*(i,j) - V^*(i,j-1)] \cdot \Delta X(i) \quad (\text{A. 24})$$

L'équation (A.18) représente l'équation de continuité discrétisée comme une équation de correction de pression P' . Le terme source \overline{S}_p' apparaît à cause du fait qu'on utilise un champ de vitesse incorrect U^* et V^* . Si $\overline{S}_p' = 0$ celui-ci implique plus de correction de pression nécessaire. Par la résolution de l'équation (A.18) on obtient la correction de pression pour tous les points du maillage et alors la pression correcte peut être calculée à l'aide de la formule (A.3) et les composantes de la vitesse avec les formules de correction (A.4) et (A.5). L'omission du terme

$$\sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb} U'_{nb} \text{ et } \sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb} V'_{nb}$$

ne doit pas affecter la solution finale parce que les corrections de pression et de vitesse seront nulles à la convergence.

Il est possible que le processus itératif soit divergent. Pour remédier cet inconvénient, pendant le processus itératif on peut utiliser la sous-relaxation :

$$P^{nouv} = P^* + \alpha_p P' \quad (\text{A. 25})$$

Où $0 < \alpha_p < 1$ est facteur de sous-relaxation.

Les composantes de la vitesse doivent aussi être sous-relaxées en utilisant les relations :

$$U^{nouv} = \alpha_U U + (1 - \alpha_U) U^{(n-1)} \quad (\text{A. 26})$$

$$V^{nouv} = \alpha_V V + (1 - \alpha_V) V^{(n-1)} \quad (\text{A. 27})$$

Où :

α_U et α_V sont les facteurs de sous-relaxation pour les composantes de la vitesse, U et V sont les composantes corrigées sans relaxation tandis que $U^{(n-1)}$ et $V^{(n-1)}$ représentent leurs valeurs à l'itération précédente.

La solution numérique dans nos calculs est obtenue avec l'algorithme SIMPLE.

Les séquences de calcul sont les suivantes :

1. On commence par l'estimation (choix Initial) du champ de pression P^*
2. Calcul des coefficients de discrétisation d'équation de conservation de quantité de mouvement pour obtenir les vitesses estimées U^* et V^* Eqs. (A.1) et (A.2).
3. Calculer les coefficients et le terme-source $\overline{S'_p}$ et puis résoudre l'équation de correction de pression P' Eq. (A.18).
4. Calcul de la pression correcte P par Eq.(A.3) en s'ajoutant P' à P^* .
5. Calcul des vitesses U et V (A.12)-(A.15) par l'utilisation des équations de correction des vitesses.
6. La résolution des autres équations discrétisées (comme la température,...)
7. Répéter les étapes 2 à 6 jusqu'à l'obtention de la convergence.

I.2. Critère de Convergence

Le critère de la convergence mentionné à l'étape 7 est basé sur le terme source dans l'équation de correction de pression. Il est donné par :

$$\sum_i \sum_j \overline{S'_p(i,j)} \leq 10^{-5} \quad (A.28)$$

I.3. Méthode itérative de résolution

Il existe plusieurs méthodes de résolution des systèmes d'équations algébriques, essentiellement les méthodes directes (par exemple Gauss-Jordan) et les méthodes itératives (par exemple Gauss-Seidel).

La résolution directe du système d'équations algébriques est compliquée, pour cela, on utilise la technique de balayage qui est une méthode de résolution semi-itérative. Elle consiste à déterminer les valeurs de la variable ϕ sur chaque ligne du domaine d'étude indépendamment des autres lignes, donc le système se transforme d'un système d'équations algébriques multidimensionnelles en un système dimensionnel, en ajoutant à la source de la

dimension choisie des termes des autres dimensions. Le système d'équations obtenu est représenté par une matrice tridiagonale et peut être résolu par l'algorithme de Thomas [13].

- **Développement de la méthode (TDMA)**

L'équation algébrique s'écrit pour le nœud P du maillage comme suit :

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_N \phi_N + a_S \phi_S + \overline{S_\phi} \quad (A.29)$$

Le système d'équations obtenu peut se mettre sous la forme :

$$[A] \cdot [\phi] = [\overline{S_\phi}] \quad (A.30)$$

Où :

$[A]$ est une matrice de $(IL - 2) \times (JL - 2)$ d'éléments.

$[\phi]$ vecteur des inconnues $\phi(i, j)$

$$i = 2, IL - 1$$

$$j = 2, JL - 1$$

Pour déterminer les valeurs de ϕ sur une colonne (i) on suppose que les valeurs de cette dernière sont connues sur les colonnes ($i - 1$) et ($i + 1$). L'équation algébrique (A.29) écrite pour chaque nœud de la colonne (i) est alors réduite à une équation qui contient seulement trois inconnues (ϕ_P, ϕ_N, ϕ_S).

Pour le nœud (i, j) du maillage, l'équation peut être écrite sous la forme d'une équation unidimensionnelle :

$$a_P(i, j) \cdot \phi_P(i, j) - a_N(i, j) \cdot \phi_N(i, j + 1) - a_S(i, j) \cdot \phi_S(i, j + 1) = a_W(i, j) \cdot \phi_W(i - 1, j) + a_E(i, j) \cdot \phi_E(i + 1, j) + \overline{S_\phi}(i, j) \quad (A.31)$$

Et en posant :

$$a_j = a_P(i, j)$$

$$b_j = a_N(i, j)$$

$$c_j = a_S(i, j)$$

$$d_j = a_W(i, j) \cdot \phi_W(i - 1, j) + a_E(i, j) \cdot \phi_E(i + 1, j) + \overline{S_\phi}(i, j)$$

On obtient l'équation (A.32) sous la forme suivante :

$$-c_j\phi_{j-1} + a_j\phi_j - b_j\phi_{j+1} = d_j \quad (\text{A. 32})$$

Avec :

$$c_1 = 0 \quad \text{et} \quad b_{JL} = 0$$

Pour tous les nœuds ($j = 2, JL - 1$) de la colonne(i), l'équation(A. 32) donne un système de la forme :

$$\begin{aligned} -c_2\phi_1 + a_2\phi_2 - b_2\phi_3 &= d_2 \\ -c_j\phi_{j-1} + a_j\phi_j - b_j\phi_{j+1} &= d_j \\ -c_{JL}\phi_{JL-1} + a_{JL}\phi_{JL} - b_{JL}\phi_{JL+1} &= d_{JL} \end{aligned} \quad (\text{A. 33})$$

Les valeurs de ϕ_1 et ϕ_{JL} sont connues (conditions aux limites).

La matrice associée au système est tridiagonale. On utilisera l'algorithme TDMA (algorithme de Thomas) [13] pour la résolution en réarrangeant toutes les équations du système(A. 33) sous la forme :

$$\phi_j = \frac{c_j}{a_j}\phi_{j-1} + \frac{b_j}{a_j}\phi_{j+1} + \frac{d_j}{a_j} \quad (\text{A. 34})$$

$$\phi_2 = \frac{c_2}{a_2}\phi_1 + \frac{b_2}{a_2}\phi_3 + \frac{d_2}{a_2} \quad (\text{A. 35})$$

On obtient ce qui suit :

$$\phi_3 = \frac{c_3}{a_3}\phi_2 + \frac{b_3}{a_3}\phi_4 + \frac{d_3}{a_3} \quad (\text{A. 36})$$

$$\phi_{JL} = \frac{c_{JL}}{a_{JL}}\phi_{JL-1} + \frac{b_{JL}}{a_{JL}}\phi_{JL+1} + \frac{d_{JL}}{a_{JL}} \quad (\text{A. 37})$$

Et puisque ϕ_1 est connue, on élimine ϕ_2 de l'équation (A. 36) puis ϕ_3 de l'équation (A. 37) et ainsi de suite, on obtient une relation de récurrence pour ϕ_j telle que :

$$\phi_j = P_j\phi_{j+1} + Q_j \quad (\text{A. 38})$$

Détermination de P_j et Q_j :

Pour le nœud $(i, j - 1)$, on a :

$$\phi_{j-1} = P_{j-1}\phi_j + Q_{j-1} \quad (A.39)$$

En remplaçant (A.39) dans (A.33) on trouve :

$$-c_j(P_{j-1}\phi_j + Q_{j-1}) + a_j\phi_j - b_j\phi_{j+1} = d_j \quad (A.40)$$

D'où on a :

$$(a_j - c_jP_{j-1})\phi_j = d_j + c_jQ_{j-1} + b_j\phi_{j+1} \quad (A.41)$$

$$\phi_j = \frac{b_j}{a_j - c_jP_{j-1}}\phi_{j+1} + \frac{d_j - c_jQ_{j-1}}{a_j - c_jP_{j-1}} \quad (A.42)$$

De (A.38) et (A.42) on a :

$$P_j = \frac{b_j}{a_j - c_jP_{j-1}} \quad (A.43)$$

$$Q_{j-1} = \frac{d_j - c_jQ_{j-1}}{a_j - c_jP_{j-1}} \quad (A.44)$$

Pour $j = 1$ on a :

$$c_1 = 0$$

Donc l'équation (A.42) pour $j = 1$ se réduit à :

$$\phi_1 = \frac{b_1}{a_1}\phi_2 + \frac{d_1}{a_1} \quad (A.45)$$

Ce qui correspond à la forme de l'équation (A.34).

Donc, on a :

$$P_1 = \frac{b_1}{a_1}, \quad Q_1 = \frac{d_1}{a_1} \quad (A.46)$$

Aussi, pour $j = JL$ on a : $b_{JL} = 0$ donc $P_{JL} = 0$

Et de l'équation (A.39) on a :

$$\phi_{JL} = Q_{JL} \quad (A.47)$$

- **Résumé de l'algorithme de Thomas**

1. Calculer P_1 et Q_1 de l'équation (A. 48).
2. Calculer à partir de la relation (A. 43) et la relation (A. 44) les coefficients P_j et Q_j avec $j = 2, 3, \dots, JL$.
3. On pose $\phi_{JL} = Q_{JL}$.
4. On utilise l'équation (A. 38) pour $j = JL - 1, JL - 2, \dots, 3, 2, 1$ afin d'obtenir les valeurs $\phi_{JL-1}, \phi_{JL-2}, \dots, \phi_3, \phi_2, \phi_1$

I.4. Algorithme de calcul

Pour résoudre le problème de la présente étude, on suit les étapes de l'algorithme suivant :

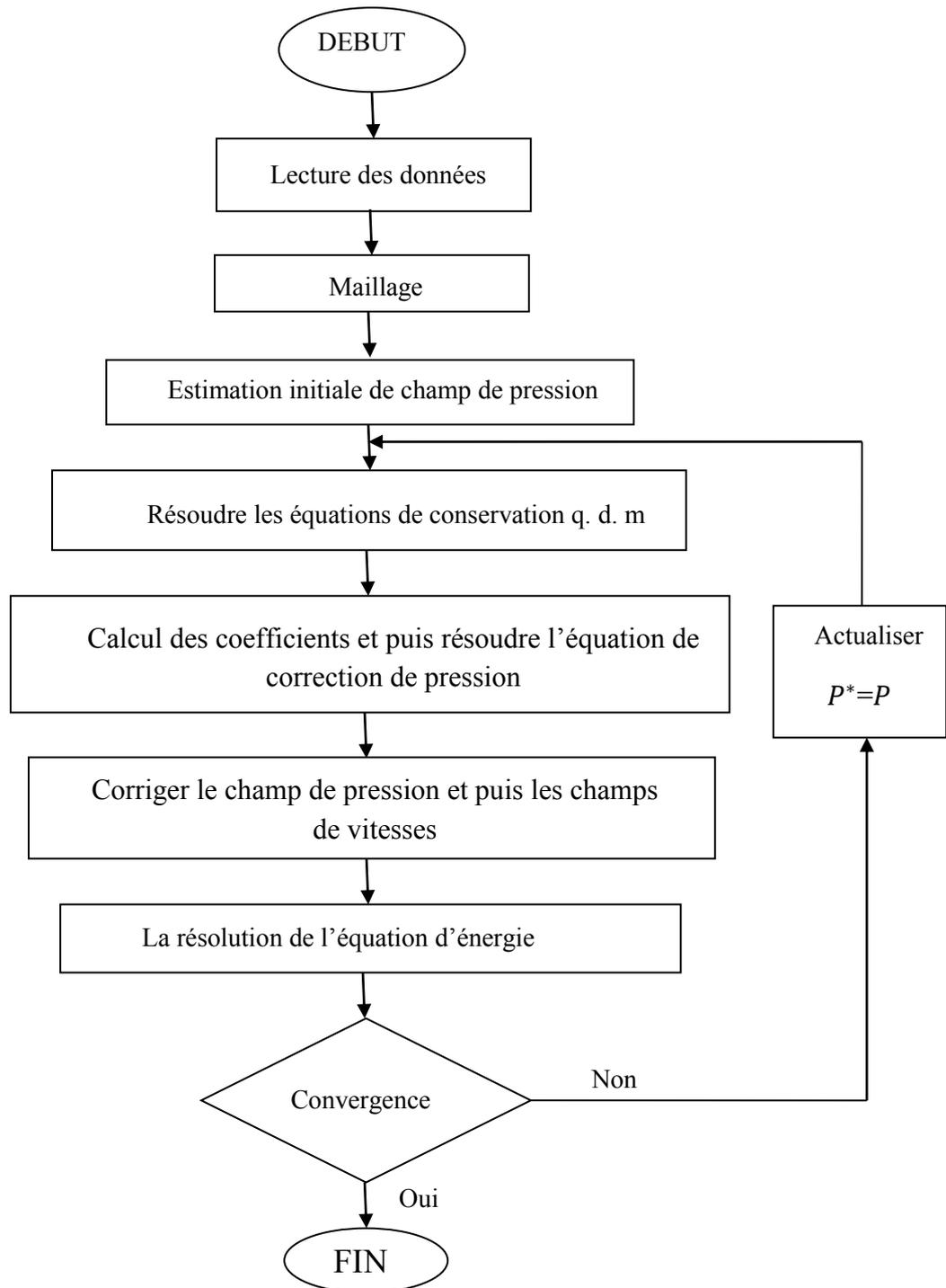


Fig. AI : Algorithme de calcul.

Dans le cadre de cette étude, la méthode RK4 est choisie pour la résolution du système d'équations établi. Nous exposerons dans ce qui suit succinctement cette méthode.

AII.1 Le problème avec une seule équation différentielle

Considérons l'équation différentielle suivante [19]:

$$\begin{cases} \frac{dy(t)}{dt} = f(y, t) \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

La méthode RK4 utilise plusieurs points intermédiaires sur un intervalle de temps pour calculer la valeur de y_{i+1} à partir de la valeur de y_i . Elle définit deux suites, Δt étant le pas de discrétisation en t :

1. Une première qui permet de définir les valeurs de t

Terme initiale : t_0

Relation de récurrence : $t_{i+1} = t_i + \Delta t$

2. Une deuxième qui permet d'évaluer les valeurs de y

Terme initiale : y_0

Relation de récurrence : $y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$

Avec : $k_1 = f(y_i, t_i)$

$$k_2 = f\left(y_i + \frac{\Delta t}{2} k_1, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$k_3 = f\left(y_i + \frac{\Delta t}{2} k_2, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$k_4 = f(y_i + \Delta t k_3, t_i + \Delta t)$$

La somme $(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) / 6$ peut être interprétée comme une pente moyenne. La pente au milieu de l'intervalle (donc en $\frac{\Delta t}{2}$), est calculée par k_2 comme une première approximation ensuite la pente au milieu de l'intervalle mais calculée cette fois-ci avec k_3 comme une deuxième approximation, enfin la pente de fin d'intervalle (donc en Δt) calculée avec k_4 .

AII.2 Le problème est un système d'équations différentielles

Considérons le système d'équations différentielles suivantes [19] :

$$\begin{cases} \frac{dy(t)}{dt} = f(y, z, t) \\ \frac{dz(t)}{dt} = f(y, z, t) \\ y(0) = y_0, z(0) = z_0 \end{cases}$$

Dans ce cas, la relation de récurrence de la deuxième suite exprimée par :

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta t}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$z_{i+1} = z_i + \frac{\Delta t}{6} (l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4)$$

Avec : $k_1 = f(y_i, z_i, t_i)$

$$l_1 = f(y_i, z_i, t_i)$$

$$k_2 = f\left(y_i + \frac{\Delta t}{2} k_1, z_i + \frac{\Delta t}{2} l_1, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$l_2 = f\left(y_i + \frac{\Delta t}{2} k_1, z_i + \frac{\Delta t}{2} l_1, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$k_3 = f\left(y_i + \frac{\Delta t}{2} k_2, z_i + \frac{\Delta t}{2} l_2, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$l_3 = f\left(y_i + \frac{\Delta t}{2} k_2, z_i + \frac{\Delta t}{2} l_2, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$k_4 = f(y_i + \Delta t k_3, z_i + \Delta t l_3, t_i + \Delta t)$$

$$l_4 = f(y_i + \Delta t k_3, z_i + \Delta t l_3, t_i + \Delta t)$$

دراسة شمولية لخواص فوق صوتية في حقل خزن لتخصيص رش رائق في قبة

ملخص

في هذا العمل قمنا بدراسة عددية لرش محلول كيميائي كلوريد الزنك مع الماء $[ZnCl_2:H_2O]$ في وسط هوائي ذو حمل حراري ناجم عن تسخين حامل صفيحة في درجة حرارة تتغير في المجال: 200 – 400°م و هذا من أجل تحضير شرائح رقيقة باستخدام طريقة الرش فوق الصوتي.

في القسم الأول لهذه المذكرة، قمنا بإنجاز، محاكاة عددية للحمل الطبيعي للهواء في وسط قريب من الوسط التجريبي. يتم حل نظام المعادلات ذات المشتقات الجزئية التي تصف الحمل الطبيعي عددياً باستخدام طريقة الحجوم المنتهية. في هذه الحالة درسنا تأثير درجة حرارة حامل الصفيحة على الخصائص الحرارية و الدينامية للهواء ضمن المجال فوهة- صفيحة. في القسم الثاني، قمنا بوضع الحوصلة الطاقوية لقطرات الرش $[ZnCl_2:H_2O]$ في إتجاه معاكس للحمل الحراري للهواء. وحققتنا المحاكاة العددية باستخدام طريقة Runge-Kutta. في الحالة الأولى اعتبرنا أن وسط الحمل الحراري للهواء ذو حرارة و سرعة ثابتين لكن في الحالة الثانية جمعنا ما بين برنامج الحمل الحراري ونظيره للقطرة. في كلتا الحالتين المذكورتين، درسنا تأثير الخصائص الحرارية و الدينامية (T_g, v_g) للوسط الغازي، الخصائص الهندسية (قطر القطرة، ارتفاع السقوط) والكيميائية للقطرات على التطورات الدينامية و تبخر هذه الأخيرة. نتائج هذه التطورات ممثلة بدلالة الزمن و/ أو الوضعية. لاحظنا من خلال النتائج المحصل عليها أن هذه الوسائط $(T_g, D_a, S_f, h_{bec-substrat})$ تؤثر على ديناميكية و تبخر قطرات $[ZnCl_2:H_2O]$ ، إذ تسمح لنا باستخلاص مختلف الشروط التجريبية لتحضير شرائح رقيقة ذات نوعية جيدة.

الكلمات الدالة: الرش فوق الصوتي، الحمل الطبيعي، القطرات، التبخر، الحجوم المنتهية، Runge-Kutta، الشرائح الرقيقة.

***Study of spray jet of a chemical solution on a hot substrate used
for thin films deposition***

Abstract

The work consists of a numerical study of a droplet of a chemical solution of zinc chloride with water [$ZnCl_2:H_2O$] which is sprayed in a medium of air convection caused by the heating of a substrate holder subjected to a temperature in the range: $200 - 400^\circ C$. The process is used for the deposition of thin films by ultrasonic spray technique.

In the first part of this thesis, we did a numerical simulation of the natural convection of air in a medium close to the experimental system of thin film deposition. The system of partial differential equations which describes the natural convection is solved numerically by the finite volume method. In this case we have studied the influence of the substrate holder temperature on the thermodynamic properties of air in the nozzle-substrate space. In the second part, we established the energy balance of [$ZnCl_2:H_2O$] droplet sprayed in a medium of air convection with opposite current. Its numerical simulation is carried out by the Runge-Kutta method. In the first case, we have considered a constant temperature and speed of the convective medium but in the second case we have coupled the convection and droplet programs. In the two cases we have studied the influence of thermodynamic properties (T_g, v_g) of the medium gaseous, geometrical (diameter of droplet, drop height) and chemical properties of the droplet on the evolutions of its dynamics and its evaporation. The results of these evolutions as a function of time and/or position are presented. We found that these parameters ($T_g, D_d, Sf, h_{bec-substrat}$), affect the dynamics and evaporation of the droplets [$ZnCl_2:H_2O$], consequently, this work enables us to optimize the different experimental conditions to deposit a thin films with good quality.

Key words: Ultrasonic spray, Natural convection, Droplet, Evaporation, Finite volume, Runge-Kutta, Thin films.

Etude d'un jet en spray d'une solution chimique sur un substrat chaud destiné à l'élaboration des couches minces

Résumé

Le travail consiste en une étude numérique de la goutte d'un jet en spray d'une solution chimique de chlorure de zinc avec l'eau [$ZnCl_2:H_2O$] dans un milieu d'air convectif provoqué par le chauffage d'un porte substrat soumis à une température dans la gamme : 200 – 400 C destiné à l'élaboration des couches minces par la technique de spray ultrasonique.

Dans la première partie de cette thèse, nous avons fait, une simulation numérique de la convection naturelle d'air dans un milieu proche à celui expérimental. Le système d'équations aux dérivées partielles qui décrit la convection naturelle est résolu numériquement par la méthode des volumes finis. Dans ce cas, nous avons étudié l'influence de la température du porte substrat sur les propriétés thermodynamiques de l'air dans l'espace bec-substrat. Dans la deuxième partie, nous avons établi le bilan énergétique d'une gouttelette spray [$ZnCl_2:H_2O$] en chute dans un milieu d'air convectif à contre courant et avons effectué sa simulation numérique par la méthode de Runge-Kutta. Dans un premier cas, nous avons considéré un milieu convectif à température et vitesse d'air constants et dans le second cas nous avons effectué un couplage entre le programme de la convection avec celui de la gouttelette. Dans les deux cas cités, nous avons étudié l'influence des propriétés thermodynamiques (T_g, v_g) du milieu gazeux, propriétés géométriques (diamètre de goutte, hauteur de chute) et chimiques de la gouttelette sur les évolutions de sa dynamique et son évaporation. Les résultats de ces évolutions en fonction du temps et/ou la position sont présentés. Nous avons trouvé que ces paramètres ($T_g, D_d, Sf, h_{bec-substrat}$), influent sur l'évaporation et la dynamique des gouttelettes [$ZnCl_2:H_2O$], ce qui nous permet d'optimiser les différentes conditions expérimentales pour élaborer une bonne qualité des couches minces.

Mots clés : Spray ultrasonique, Convection naturelle, Gouttelette, Evaporation, Volumes finis, Runge-Kutta, Couches minces.