HAL
open science

Plan d'expériences numériques pour caractériser un écoulement de convection mixte et optimiser un procédé CVD

Xavier Nicolas, S. Mergui

To cite this version:

Xavier Nicolas, S. Mergui. Plan d'expériences numériques pour caractériser un écoulement de convection mixte et optimiser un procédé CVD. Congrès Français de Thermique 2013, SFT2013, Société Française de Thermique, May 2013, Gérardmer, France. pp.5902. hal-00831853

HAL Id: hal-00831853

https://hal.science/hal-00831853

Submitted on 7 Jun 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Plan d'expériences numériques pour caractériser un écoulement de convection mixte et optimiser un procédé CVD

Xavier NICOLAS[1*], Sophie MERGUI[2]

[1]Université Paris Est, MSME UMR CNRS 8208, 5 bd Descartes, 77454 Marne la Vallée, France
[2]Université Paris 6, FAST UMR CNRS 7608, Bat 502, Campus Universitaire, 91405 Orsay, France
[*](auteur correspondant : Xavier.Nicolas@univ-paris-est.fr)

Résumé - On étudie par simulations numériques le développement spatio-temporel des rouleaux thermoconvectifs sinueux des écoulements de Poiseuille-Rayleigh-Bénard dans un canal d'air soumis, à l'entrée, à une excitation mécanique harmonique entretenue d'amplitude A_{exc} et de fréquence f_{exc}. Un plan d'expériences de Doehlert est utilisé, puis étendu, pour caractériser ces écoulements et construire des surfaces de réponses cubiques des grandeurs mesurées en fonction des quatre paramètres de contrôle : A_{exc}, f_{exc}, Ra et Re. Les surfaces de réponse modélisant la longueur d'établissement des structures sinueuses jusqu'à saturation et l'amplitude de leurs oscillations transverses sont utilisées pour évaluer les conditions qui seraient les plus favorables à l'uniformisation des dépôts dans un réacteur CVD.

Nomenclature

A, A_a	rapports de forme longitudinaux du canal et de l'entrée adiabatique, L/H, L_a/H
A_{exc}	amplitude adim. de l'excitation, H
AI	absolument instable
B	rapport de forme transverse, l/H
CI	convectivement instable
CVD	Chemical Vapor Deposition
D	amplitude adim. du déplacement transverse selon y des $R_{\approx}$, H
f, f_{exc}	fréquences adim. des $R_{\approx}$ et de l'excitation, $U°/H$
H	hauteur du canal, m
$\vec{k}$	vecteur unitaire vertical ascendant
l, L, L_a	largeur et longueur du canal et longueur de l'entrée adiabatique, m
L_e	longueur d'établissement des $R_{\approx}$
$\overline{Nu}$	nombre de Nusselt moyen en temps
p	pression motrice adim., $\rho U°^2$
Pr	nombre de Prandtl, ν/α
$R_{\perp}$, $R_{//}$, $R_{\approx}$	rouleaux thermoconvectifs transverses, longitudinaux et sinueux
Ra	nombre de Rayleigh, $g\beta(T_c-T_f)H^3/(\nu\alpha)$
$Ra_{\perp}$*	Ra critique issu de l'analyse de stabilité linéaire temporelle de la transition entre écoulement de Poiseuille et $R_{\perp}$
$Ra_{\perp}^{c/a}$	Ra critique entre les régions d'instabilité convective et absolue pour les $R_{\perp}$ issu d'analyse de stabilité linéaire spatio-temporelle
$Ra_{//}$*	comme $Ra_{\perp}$* mais pour les $R_{//}$
$Ra_{\approx}$*	comme $Ra_{\perp}$* mais pour la transit° entre $R_{//}$ et $R_{\approx}$
Re	nombre de Reynolds, $U°H/\nu$
T_c, T_f	températures chaude et froide, K
$U°$	vitesse axiale moyenne, m/s
V_s	amplitude de la vitesse transverse v des rouleaux sinueux à saturation
u, v, w	composantes de vitesse adimensionnelles selon x, y et z, $U°$
x, y, z	coordonnées axiale, transversale et verticale adimensionnelles, H

Symboles grecs

α	diffusivité thermique, $m^2.s^{-1}$
ε	écart relatif $(Ra-Ra_{\approx}*)/Ra_{\approx}*$
ν	viscosité cinématique, $m^2.s^{-1}$
θ	température adimensionnelle, $(T-T_f)/(T_c-T_f)$

1. Introduction

Les écoulements de Poiseuille-Rayleigh-Bénard (PRB) sont des écoulements de convection mixte en canal rectangulaire horizontal, chauffé par le bas et refroidi par le haut. Depuis les travaux pionniers de P. Idrac en 1920 [1], ces écoulements ont fait l'objet de très nombreuses études car ils présentent un intérêt fondamental et un intérêt pratique. D'un point de vue fondamental, un grand nombre de régimes thermoconvectifs différents existent en

fonction des quatre paramètres de contrôle : les nombres de Reynolds, *Re*, de Rayleigh, *Ra*, et de Prandtl, *Pr*, et le rapport de forme transverse du canal, *B*. Par exemple, la Fig. 1 présente le diagramme de stabilité des écoulements PRB dans l'air (*Pr*=0,71) dans des canaux de grand rapport de forme transversal ($B \geq 10$) [2]. On y observe des régimes d'écoulement en forme de rouleaux thermoconvectifs transverses à l'axe du canal ($R_\perp$), des rouleaux longitudinaux parallèles à l'axe du canal ($R_{//}$), des rouleaux sinueux ($R_\approx$) et variqueux, des structures mixtes (R_{mixte}) superposition de $R_\perp$ et $R_{//}$, etc. Certains régimes sont stationnaires ($R_{//}$), d'autres instationnaires ($R_\perp$, $R_\approx$, R_{mixte}, …) ; certains sont absolument instables (AI) et d'autres convectivement instables (CI). Ainsi, les écoulements PRB ont été une configuration de référence pour des analyses de stabilité linéaire temporelle, spatio-temporelle et expérimentale.

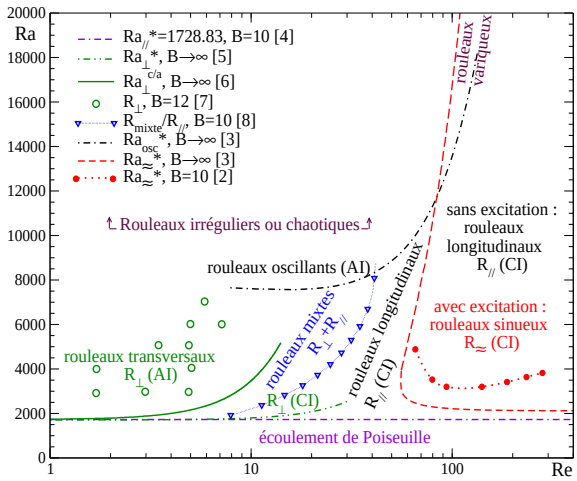

Figure 1 : *Diagramme de stabilité des écoulements PRB à Pr=0,71 et B≥10 incluant des résultats d' analyses de stabilité linéaire temporelle [2, 3, 4], spatio-temporelle [5, 6] et expérimentale [7, 8] (adapté de [2]).*

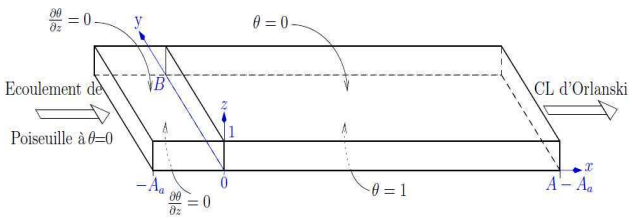

Figure 2 *: Géométrie et conditions aux limites*

D'un point de vue pratique, les écoulements PRB permettent de modéliser les écoulements gazeux dans les réacteurs CVD rectangulaires horizontaux. Ces réacteurs sont utilisés pour fabriquer des revêtements ou des films solides minces sur des substrats chauffés, placés sur le fond du réacteur, à partir de précurseurs chimiques transportés en phase gazeuse [9]. Ce type de réacteurs est utilisé dans l'industrie pour fabriquer, par exemple, des composants électroniques (dépôts de silicium) ou des verres plats à haute valeur ajoutée (dépôts d'oxydes d'étain ou de titane pour obtenir des verres de basse émissivité ou autonettoyants). Les industriels cherchent en général à fabriquer des revêtements les plus uniformes possibles. Cependant, la cinétique des réactions chimiques à la surface du substrat et la forme du dépôt obtenu sont fortement dépendants du régime d'écoulement dans la phase gazeuse [10]. En particulier, lorsque le régime d'écoulement prend la forme de rouleaux thermoconvectifs stationnaires longitudinaux, parallèles à l'axe du réacteur, ce qui est le cas pour une large gamme des paramètres de contrôle (pour $O(10)<Re<O(10^3)$ et $2000<Ra<O(10^4)$ à $O(10^5)$ lorsque *Pr*=0,7 ; cf. Fig. 1), les dépôts CVD prennent la forme de stries parallèles à l'axe du canal.

A *Pr*=0,7 et pour $B \to \infty$, Clever et Busse (1991) [3] ont montré par une analyse de stabilité linéaire temporelle que ces $R_{//}$ stationnaires sont instables vis-à-vis de $R_\approx$ instationnaires périodiques pour $Re \geq O(100)$ et $Ra>2200$ (cf. Fig. 1). Mais Nicolas et al. (2003) [11] et Pabiou et al. (2005) [12] ont montré numériquement et expérimentalement que les $R_\approx$ sont en fait une instabilité convective des $R_{//}$. C'est-à-dire que, pour voir apparaître les $R_\approx$, il est nécessaire d'imposer une excitation mécanique ou thermique entretenue dans un écoulement de $R_{//}$. Autrement dit, sans excitation permanente, un régime de $R_{//}$ se maintient sur une large gamme des nombres de Reynolds et de Rayleigh et les dépôts CVD associés sont non uniformes. Nous avons donc proposé dans [10] d'exciter les écoulements de rouleaux parallèles stationnaires de manière à les rendre instationnaires et sinueux afin d'obtenir des dépôts plus uniformes en moyenne temporelle. Cependant, l'uniformisation des dépôts ne sera effective que si la longueur de croissance et d'établissement, L_e, du régime de $R_\approx$ pleinement

développé est plus petite que la longueur du réacteur et si l'amplitude, D, du déplacement transverse des structures sinueuses est suffisamment grande pour éviter la formation des stries. A titre d'exemple, dans le cas des réacteurs CVD utilisés pour les dépôts sur le verre plat, comme le rapport de forme longitudinal du réacteur est de l'ordre de $A=L/H=100$ [10], il faudrait que L_e soit au moins inférieure à $60H$, où H est la hauteur du réacteur. D'autre part, on estime que l'amplitude, D, du déplacement transverse des structures sinueuses doit être supérieure à $1{,}5H$. Dans [2], en introduisant une excitation mécanique aléatoire artificielle à l'entrée du canal (superposition d'un bruit blanc au profil de Poiseuille), nous avons montré que ces conditions pouvaient être réalisées, au moins séparément.

L'objectif de cette communication est d'analyser numériquement les variations de L_e et D dans le cas des écoulements de $R_{\approx}$ observés dans l'expérience développée au laboratoire FAST [12]. Dans cette expérience, le fluide est de l'air (Pr=0,71) et le canal a un rapport de forme B=10. Les rouleaux sinueux sont générés à l'aide d'un agitateur mécanique placé à l'entrée du canal, produisant des excitations sinusoïdales d'amplitude, A_{exc}, et de fréquence, f_{exc}, contrôlées. Dans les simulations, le même type d'excitation harmonique est reproduit. Puisque Pr et B sont fixés par les conditions expérimentales, les deux caractéristiques étudiées, L_e et D, ne vont plus dépendre que de quatre paramètres : Re, Ra, A_{exc} et f_{exc}. Pour étudier systématiquement leur influence, un plan d'expériences numériques a été réalisé. Initialement, un plan de Doehlert a été choisi car il permet de construire des surfaces de réponses polynomiales quadratiques à partir d'une répartition hexagonale des points d'expériences dans le domaine de paramètres, qui peut ainsi être étendu facilement [13]. Un plan de Doehlert a donc été utilisé, puis enrichi, pour finalement calculer des surfaces de réponses cubiques. Ces surfaces sont utilisées pour optimiser conjointement L_e et D afin d'évaluer les conditions qui pourraient être les plus favorables à l'uniformisation des transferts de chaleur et de masse dans un réacteur CVD, lorsque $Pr\approx 0{,}7$ et $B\geq 10$ pour $100\leq Re\leq 300$, $5000\leq Ra\leq 16000$, $0{,}125\leq f_{exc}\leq 0{,}3$ et $0{,}5\leq A_{exc}\leq 2$. Le plan de l'article est le suivant : la géométrie, le modèle mathématique et la méthode de résolution numérique sont présentés au §2. Le plan d'expérience et les écueils rencontrés lors de sa réalisation sont exposés au §3. Les résultats du plan d'expérience et une simulation d'un cas optimisé pour uniformiser le transfert thermique sont présentés au §5 et les conclusions et perspectives au §6.

2. Modèle mathématique et méthode de résolution

Dans les simulations numériques, on considère un canal horizontal, de section rectangulaire, similaire à celui des expériences. Un écoulement de Poiseuille pleinement développé, de vitesse moyenne $U°$, y pénètre à la température T_f. Cet écoulement passe par une entrée adiabatique de longueur L_a, puis dans une zone différentiellement chauffée où la plaque du haut est à la température T_f et celle du bas à $T_c>T_f$. Les parois verticales sont adiabatiques le long de tout le canal. L'origine du repère étant placée au début de la zone chauffée, le domaine de calcul est défini par $(x, y, z) \in [-A_a, A-A_a]\times[0, B]\times[0, 1]$ en coordonnées cartésiennes adimensionnelles, avec $A=L/H$, $B=l/H$ et $A_a=L_a/H$. Dans cette étude, $B = 10$, $A_a = 1$ et $A = 150$ à 300. La géométrie et les conditions aux limites thermiques pour $\theta=(T-T_f)/(T_c-T_f)$ sont présentées dans la Fig. 2.

Dans les expériences, la hauteur du canal d'air est H=1,5 cm, l'écart de température maximal est $T_c-T_f \approx 40$°C et le nombre de Rayleigh maximal est de l'ordre de 10^4. Ainsi, dans les simulations, on considère que le fluide est newtonien et que les écoulements sont gouvernés par les équations de Navier-Stokes incompressibles, sous l'hypothèse de Boussinesq. En prenant H, $U°$, $\rho U°^2$ et $H/U°$ pour grandeurs de références des longueurs, de la vitesse, de la pression et du temps, les équations de conservation adimensionnelles s'écrivent :

$$\nabla.\vec{v} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}.\nabla)\vec{v} = -\nabla p + \frac{1}{Re}\nabla^2\vec{v} + \frac{Ra}{Re^2\,Pr}\theta\vec{k} \tag{2}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \vec{v}.\nabla\theta = \frac{1}{Re\,Pr}\nabla^2\theta \tag{3}$$

Les conditions aux limites sont les suivantes : en x=-A_a, u=u_{Pois}(y,z) (profil de Poiseuille analytique [14]), v=0 ou v=excitation sinusoïdale à mi-hauteur du canal, w=0 et θ =0 ; en y=0 et B, $\vec{v} = \vec{0}$ et $\partial\theta/\partial y = 0$; en z=0 et 1, pour x∈[-A_a,0], $\vec{v} = \vec{0}$ et $\partial\theta/\partial z = 0$; en z=1, pour x∈[0, A-A_a], $\vec{v} = \vec{0}$ et θ=0 ; en z=0, pour x∈[0, A-A_a], $\vec{v} = \vec{0}$ et θ=1 ; en x=A-A_a, $\partial f/\partial t + \partial f/\partial x = 0$ pour f=u, v, w et θ (condition de sortie d'Orlanski [15]).

Le système d'équations (1-3) avec les conditions aux limites ci-dessus est discrétisé en différences finies avec des schémas centrés et il est résolu avec un code de laboratoire vectorisé, basé sur une méthode de projection de Goda. Les équations d'Helmholtz sont résolues par une méthode ADI incrémentale et l'équation de Poisson par une méthode de factorisation basée sur la diagonalisation partielle de l'opérateur Laplacien. Les pas des discrétisations spatiale et temporelle utilisés sont : $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$=0,1×0,05×0,029 et Δt=0,01. Ce code, d'ordres 2 en temps et en espace, est décrit et validé dans [14, 2].

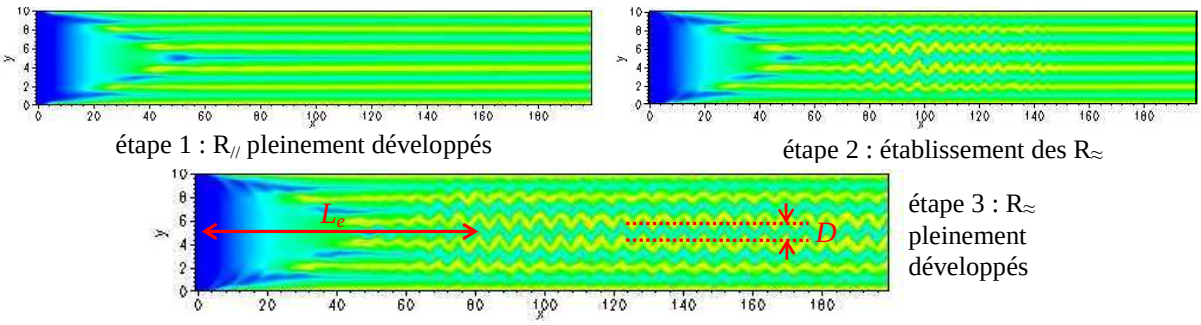

Figure 3 : *Champ de température dans le plan horizontal médian (z=0.5) lors des trois étapes du développement de dix rouleaux sinueux et visualisation de Le et D dans le cas : Re=200, Ra=10240 (ε=2), A_{exc}=1 et f_{exc}=0,2. Jaune/clair = fluide chaud ascendant ; bleu/foncé = fluide froid*

Chaque simulation est divisée en trois étapes représentées sur la Fig. 3 : tout d'abord, un écoulement de $R_{//}$ est simulé en partant, à t=0, d'un écoulement de Poiseuille froid (θ=0) et en imposant θ=1, pour t>0, en z=0, $\forall x \in [0, A\text{-}A_a]$. Dans la deuxième étape, une excitation sinusoïdale entretenue est introduite sur la composante transverse, v, de la vitesse à mi-hauteur du profil de Poiseuille à l'entrée du canal. Cette excitation reproduit approximativement les oscillations transverses de la tige horizontale qui est utilisée pour exciter l'écoulement d'air dans le canal expérimental. Numériquement on impose v=0 en x=-A_a, $\forall y \in [0, B]$ et $\forall z \in [0, 1]$, excepté en z=0,5 où $v = A_{exc} \times 2\pi f_{exc} \times \cos(2\pi f_{exc} t)$ avec f_{exc} la fréquence et A_{exc} l'amplitude adimensionnelles de l'excitation. La seconde étape se termine lorsqu'un écoulement pleinement développé de $R_{\approx}$ est établi dans tout le canal. Dans la troisième étape, on maintient l'excitation à l'entrée du canal et les $R_{\approx}$ pleinement développés continuent à s'y propager. Dans cette étape, pour caractériser les $R_{\approx}$ pleinement développés, on enregistre les signaux de v et θ, à chaque pas de temps, durant 30000 itérations, en tout point de l'axe du canal et le long d'une ligne transverse en aval du canal. L'enveloppe de v(x, t) en (y ; z)=(B/2 ; 0,5) permet de déterminer la longueur d'établissement des $R_{\approx}$: L_e est égale à la coordonnée x où l'amplitude à saturation de v est atteinte (cf. Fig. 3). Le déplacement transversal D des $R_{\approx}$ est donné par l'amplitude du déplacement du minimum de la température

θ entre les deux $R_{\approx}$ du centre du canal en (x; z)=(A-A_a-30; 0,5) (cf. [2] pour une définition plus précise de L_e et D, où ils sont notés L_{Vs} et $D\theta$ respectivement).

3. Construction du plan d'expérience

La mise en place d'un plan d'expérience nécessite de bien choisir les facteurs (paramètres) et leur domaine de variation en fonction des réponses (grandeurs) étudiées. Ici seul le comportement des deux réponses L_e et D (cf. Fig. 3) est étudié. De part l'expérience acquise dans [2, 10, 14], le domaine d'étude initial a été le suivant : $100 \leq Re \leq 300$, $0{,}5 \leq \varepsilon \leq 3{,}5$, $0{,}1 \leq f_{exc} \leq 0{,}3$ et $0{,}5 \leq A_{exc} \leq 2$. Le domaine de variation de Re a été choisi pour éviter de se rapprocher de la transition entre les $R_{//}$ et $R_{\approx}$ à Re*≈70 (cf. Fig. 1) et pour éviter des valeurs de L_e trop grandes lorsque Re>300. De plus, cette gamme de Re couvre en partie celle des réacteurs CVD envisagés pour lesquels O(10)<Re<O(1000) [10]. Pour caractériser les écoulements de convection naturelle ou mixte, le paramètre pertinent n'est pas, en général, Ra mais l'écart relatif au nombre de Rayleigh critique correspondant à l'apparition de la structure étudiée [3, 5, 6]. Ainsi, le facteur $\varepsilon=(Ra-Ra_{\approx}^*)/Ra_{\approx}^*$ a été choisi, où $Ra_{\approx}^*(Re)$ est calculé pour Pr=0,71 et B=10 dans [2, 4] (cf. Fig. 1). Comme $3100<Ra_{\approx}^*(Re)<3900$ lorsque $100 \leq Re \leq 300$, la gamme de Ra couverte par le plan d'expérience est environ $5000 \leq Ra \leq 17000$. Cela couvre la totalité du domaine étudié dans les expériences du FAST et une partie de celui couvert en CVD. En effet, comme la hauteur H des réacteurs CVD varie de 1 à 10 cm et que les gaz porteurs sont de type N_2, H_2 ou simplement de l'air, Ra varie de O(10^3) à O(10^6) en fonction des niveaux de température et de pression employés dans les réacteurs [10]. La gamme de fréquence $0{,}1 \leq f_{exc} \leq 0{,}3$ a été choisie car il a été observé que les modes $f°$ des $R_{\approx}$ dont le taux de croissance linéaire est le plus grand ou qui sont les plus amplifiés lorsque l'excitation à l'entrée du canal est un bruit blanc sont $0{,}18 \leq f° \leq 0{,}28$ [10, 2]. Le domaine $0{,}5 \leq A_{exc} \leq 2$ correspond à une amplitude de déplacement transversal de la tige de l'agitateur qui varie entre H et 4H. Dans les faits, le facteur pris en compte n'est pas A_{exc} mais Log(A_{exc}) car il a été montré dans [2, 5] que la longueur d'établissement des $R_{\approx}$ et des $R_{\perp}$ décroît linéairement en fonction du Log(A_{exc}). Ainsi le domaine d'étude du facteur Log(A_{exc}) est -0,301<Log(A_{exc})<0,301.

Pour optimiser conjointement L_e et D sur le domaine d'étude, leurs surfaces de réponses ont été recherchées dans un premier temps sous la forme de polynômes quadratiques puis, dans un second temps, sous forme cubique :

$$\begin{aligned} y=&a_0+a_1x_1+a_2x_2+a_3x_3+a_4x_4+a_{12}x_1x_2+a_{13}x_1x_3+a_{14}x_1x_4+a_{23}x_2x_3+a_{24}x_2x_4+a_{34}x_3x_4 \\ &+a_{11}x_1^2+a_{22}x_2^2+a_{33}x_3^2+a_{44}x_4^2 \quad (+a_{111}x_1^3+a_{222}x_2^3+a_{333}x_3^3+a_{444}x_4^3) \end{aligned} \tag{4}$$

où les x_i (i=1 à 4) sont, respectivement, les quatre paramètres Re, ε, f_{exc} et Log(A_{exc}) écrits en variables centrées réduites (de telle sorte que, $\forall i$=1 à 4, $-1 \leq x_i \leq 1$). Les quinze coefficients inconnus a_i (i=0 à 4) et a_{ij} (i, j=1 à 4) de la surface quadratique ont tout d'abord été déterminés par une méthode de moindres carrés sur la base d'un plan de Doehlert à 4 facteurs [13]. Ce plan d'expérience est composé de 21 mesures (ici 21 simulations) réparties uniformément dans le domaine d'étude sur une structure hexagonale. Cependant, les 21 simulations ayant été effectuées, il est apparu que le domaine d'étude choisi a priori était trop étendu. En effet, pour toutes les fréquences d'excitation, le mode le plus amplifié des $R_{\approx}$ est $f°=f_{exc}$, sauf pour les trois points de simulation à la fréquence la plus basse f_{exc}=0,1 pour laquelle c'est le mode $f°=3f_{exc}$ qui est le plus amplifié. Les résultats étant fortement influencés par ce changement de mode, nous avons réduit le domaine d'étude de f_{exc} à $0{,}125 \leq f_{exc} \leq 0{,}3$. De même, pour trois points de simulation, il est apparu que l'amplitude de l'excitation A_{exc} était trop élevée : elle générait le passage de 10 à 12 $R_{\approx}$ dans le canal de rapport de forme B=10. Ce type de comportement n'est pas exceptionnel : il a été analysé dans le cas des $R_{//}$ [16].

Cependant, il n'est pas acceptable lorsqu'on réalise un plan d'expérience car on considère alors des populations différentes sur le domaine d'étude, ce qui génère des comportements fortement non linéaires des réponses, impossibles à interpoler avec des polynômes quadratiques. Pour ces points de simulation, l'amplitude d'excitation a été réduite de A_{exc}=1 à A_{exc}=0,9 et de A_{exc}=2 à A_{exc}=1,5. Enfin, pour le point de coordonnées (Re=250 ; ε=0,5 ; f_{exc}=0,2 ; A_{exc}=1), la longueur d'établissement étant très longue (L_e≈240), elle ne permettait pas d'exploiter les $R_{\approx}$ pleinement établis. Ce point a donc été déplacé en (Re=250 ; ε=1 ; f_{exc}=0,2 ; A_{exc}=1) de manière à raccourcir L_e. A ces 21 points du plan de Doehlert modifié, nous avons ajouté 6 points de simulation correspondant à des calculs menés pour d'autres études. Ainsi, le plan d'expérience s'est trouvé composé de 27 points de simulation dont la répartition est présentée dans la Fig. 4. Le nombre de points et le nombre de niveaux pris par chaque facteur étant suffisants, nous avons finalement décidé de construire des surfaces de réponse cubiques du type de l'équation (4) complète pour L_e et D.

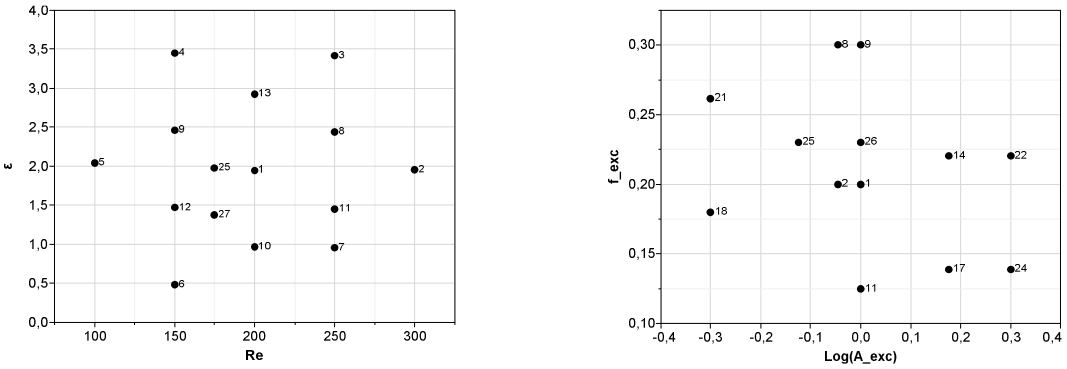

Figure 4 : *Répartition des points de simulation dans les plans de facteurs (ε, Re) et (Log(A_{exc}), f_{exc})*

4. Analyse des résultats

On présente dans la Fig. 5 les équations des surfaces de réponse simplifiées, ne tenant compte que des termes influents, les tests statistiques associés issus de l'analyse des variances [13] (coefficients de corrélation R^2 et R_a^2 ; racine carrée du carré moyen des résidus : RMSE ; F de Fisher) et le graphe des isovaleurs des réponses L_e et D dans le plan (Re, ε) pour f_{exc}=0,16 et A_{exc}=2. Les tests statistiques indiquent que les deux interpolations sont de très bonne qualité. Les plus grandes valeurs absolues des coefficients des surfaces de réponse indiquent les termes les plus influents. L_e décroît principalement quand ε augmente mais croît avec ε^2 et Re^2. D croît principalement quand f_{exc}, Re et ε^2 diminuent mais croît avec ε^3. Dans le graphe des isoréponses de la Fig. 5, les lignes bleues dont les étiquettes varient de 60 à 190 par pas de 10 correspondent aux isovaleurs de L_e et les lignes rouges, dont les étiquettes varient de 0,5 à 1,5 par pas de 1, correspondent aux isovaleurs de D. Dans ce graphe, une petite zone triangulaire blanche apparaît pour Re≈150 et ε≈3,5, là où les deux objectifs recherchés a priori (L_e<60 et D>1,5) sont satisfaits simultanément. Au centre de cette zone, les surfaces de réponse donnent L_e=57 et D=1,55.

Pour vérifier ces valeurs de L_e et D et évaluer si elles pourraient permettre une meilleure uniformisation des transferts de chaleur et de masse sur le substrat d'un réacteur CVD, deux simulations d'écoulement PRB ont été réalisées à Re=150 et ε=3,5. La première est effectuée sans excitation pour que des $R_{//}$ se développent. L'autre est effectuée pour f_{exc}=0,16 et A_{exc}=2, c'est-à-dire dans le cas "optimum" de la Fig. 5 (et du domaine d'étude complet). Ce cas est présenté dans la Fig. 6. Comme attendu, des $R_{\approx}$ avec une longueur d'établissement L_e=57,5 et une amplitude d'oscillation moyenne D≈1,5 sont obtenus. Cependant, contrairement au cas de

la Fig. 3, on peut voir sur la Fig. 6 une légère modulation axiale de l'amplitude des oscillations des $R_{\approx}$: D a tendance à diminuer entre x=70 et 80 et à raugmenter pour x>100.

La Fig. 7 compare des profils selon y des nombres de Nusselt moyens en temps, $\overline{Nu}$, sur la plaque inférieure chauffée, pour différentes coordonnées axiales, obtenus dans les cas des $R_{//}$ et $R_{\approx}$ annoncés ci-dessus. Par raison de symétrie, comme B=10, seuls des profils pour $0 \leq y \leq 5$ sont présentés. Pour x<50, il y a peu de différences entres les profils de $\overline{Nu}$ des $R_{//}$ et $R_{\approx}$. Dans le cas des $R_{\approx}$, pour x>50, mais surtout pour x>100, l'amplitude de variation selon y de $\overline{Nu}$ décroît sensiblement dans la zone centrale du canal (pour $3 \leq y \leq 7$), c'est-à-dire là où les oscillations transverses sont les plus importantes. Près des parois verticales, les oscillations des $R_{\approx}$ sont amorties et aucune uniformisation des transferts thermiques n'est observée.

5. Conclusion et perspectives

Ce plan d'expérience a permis de montrer qu'une meilleure uniformisation des transferts thermiques est effectivement possible dans la configuration des écoulements PRB dans l'air si on se place dans des conditions où se développent des rouleaux sinueux de courte longueur d'établissement et de grande amplitude d'oscillation. Dans le domaine d'étude choisi, ces conditions sont obtenues à Re faible ($Re \approx 150$), à Ra élevé ($Ra \approx 15000$), à basse fréquence ($f_{exc} \approx 0{,}16$) et à grande amplitude d'excitation ($A_{exc} \approx 2$).

La modélisation proposée dans ce travail est très simplifiée par rapport aux conditions réelles d'un réacteur CVD. Cependant des études antérieures ont montré que les transferts massiques au niveau des parois des réacteurs CVD sont directement corrélés aux transferts thermiques et que l'adoption de l'hypothèse de Boussinesq ne modifie pas fondamentalement la nature des transferts pariétaux par rapport à une modélisation hors-Boussinesq (lire la discussion dans [10]). Dans cette étude, le confinement latéral est important (B=10) et empêche l'uniformisation des transferts thermiques près des parois latérales. Cependant, dans le cas des réacteurs réels, ceux utilisés pour les dépôts sur le verre plat par exemple, le rapport de forme B est très grand ($100 \leq B \leq 400$) et l'effet des parois latérales devient négligeable. Il se pose dans ces cas le problème de la longueur d'établissement des $R_{//}$ et $R_{\approx}$. Cependant, comme l'écart de température entre les parois haute et basse des réacteurs est très grand, les $R_{//}$ naissent à partir de panaches thermiques qui envahissent toute la largeur du canal à une même coordonnée axiale [17]. Le développement des $R_{\approx}$ et l'uniformisation des transferts pariétaux n'ont jamais été étudiés dans ce cas et offrent donc une perspective à ce travail.

Equation de la surface de réponse de L_e :

$$y=70{,}56+10{,}04x_1+30{,}46x_1^2-12{,}97x_1^3-32{,}75x_2+43{,}30x_2^2-24{,}36x_2^3-10{,}39x_3+13{,}05x_3^2-19{,}16x_4+13{,}325x_4^3+11{,}91x_1x_2-21{,}36x_2x_3-8{,}94x_1x_4$$

R^2=0,987 ; R_a^2=0,971 ; RMSE=4,84 ; F=64,19

Equation de la surface de réponse de D :

$$y=0{,}8354-0{,}3135x_1-0{,}0646x_1^2+0{,}1993x_1^3-0{,}2359x_2^2+0{,}2587x_2^3-0{,}6926x_3+0{,}1627x_3^2-0{,}2495x_3^3+0{,}0949x_4^2+0{,}1438x_1x_3-0{,}1268x_1x_4$$

R^2=0,991 ; R_a^2=0,984 ; RMSE=0,0423 ; F=144,23

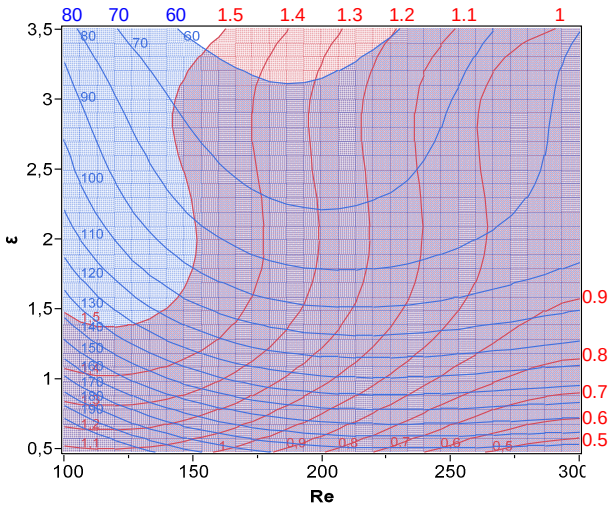

Figure 5 : *A gauche : équations des surfaces de réponse et tests statistiques associés. A droite : graphe des isovaleurs des réponses Le (en bleu) et D (en rouge) dans le plan (Re, ε) pour f_{exc}=0,16 et A_{exc}=2*

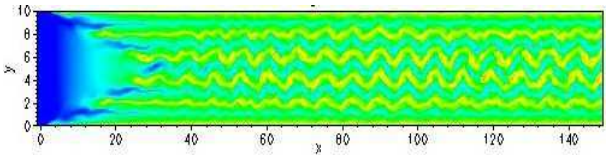

Figure 6 : *(au dessus) Champ de température en z=0.5 dans l'écoulement de dix $R_{\approx}$ à Re=150, Ra=14575 (ε=3,5), A_{exc}=2 et f_{exc}=0,16.*

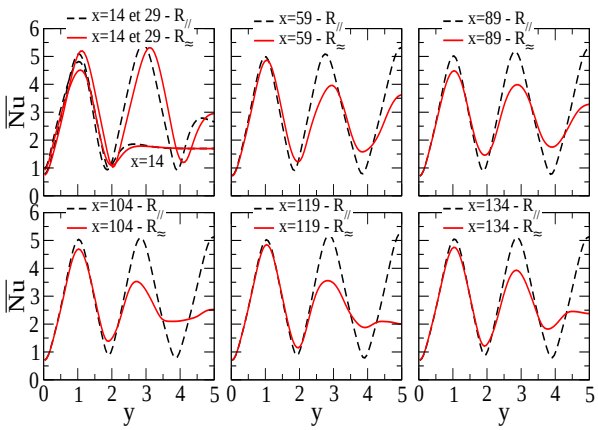

Figure 7 : *(à droite) Comparaison des profils transversaux de $\overline{Nu}$, dans des écoulements de 10 $R_{//}$ et $R_{\approx}$ pour les mêmes paramètres que dans la Fig. 6.*

Références

[1] P. Idrac, Sur les courants de convection atmosphérique et leur rapport avec le vol à voile et la formation des bandes nuageuses, *CRAS*, 171 (1920) 42-44.

[2] X. Nicolas, N. Zoueidi, S. Xin, Influence of a white noise at channel inlet on the parallel and wavy convective instabilities of Poiseuille-Rayleigh-Bénard flows, *Phys. Fluids*, 24, n°8 (2012) 084101.

[3] R. M. Clever, F. H. Busse, Instabilities of longitudinal rolls in the presence of Poiseuille flow, *J. Fluid Mech.*, 229 (1991) 517-529.

[4] S. Xin, X. Nicolas, P. Le Quéré, Stability analyses of longitudinal rolls of Poiseuille-Rayleigh-Bénard flows in air-filled channels of finite transversal extension, *Num. Heat Transf. A*, 50 (2006) 467-490.

[5] H. W. Müller, M. Lücke, M. Kamps, Transversal convection patterns in horizontal shear flow, *Phys. Rev. A*, 45 (1992) 3714-3725.

[6] P. Carrière, P. A. Monkewitz, Convective versus absolute instability in mixed Rayleigh-Bénard-Poiseuille convection, *J. Fluid Mech.*, 384 (1999) 243-262.

[7] C. H. Yu, M. Y. Chang, T. F. Lin, Structures of moving transverse and mixed rolls in mixed convection of air in a horizontal plane channel, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 40 (1997) 333-346.

[8] K. C. Chiu, F. Rosenberger, Mixed convection between horizontal plates—I. Entrance effects, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 30, (1987) 1645-1654.

[9] A. Galerie, *Traitements de Surfaces en Phase Vapeur*, Hermès, Lavoisier, Cachan, France, 2002.

[10] X. Nicolas, A. Benzaoui, S. Xin, Numerical simulation of thermoconvective flows and more uniform depositions in a cold wall rectangular APCVD reactor, *J. Crystal Growth*, 310 (2008) 174-186.

[11] X. Nicolas, H. Pabiou, S. Xin, A. Benzaoui, S. Mergui, D. Gobin, P. Le Quéré, Mise en évidence du caractère convectivement instable des rouleaux thermoconvectifs sinueux dans les écoulements de Poiseuille-Rayleigh-Bénard, *Proc. congrès SFT2003* (Grenoble, juin 2003) 273-278.

[12] H. Pabiou, S. Mergui, C. Bénard, Wavy secondary instability of longitudinal rolls in Rayleigh-Bénard-Poiseuille flows, *J. Fluid Mech.*, 542 (2005) 175-194.

[13] J. Goupy, *Plans d'expériences pour surfaces de réponses*, Dunod (1999).

[14] A. Benzaoui, X. Nicolas, S. Xin, Efficient vectorized finite difference method to solve the incompressible Navier-Stokes equations for 3D mixed convection flows, *Num. Heat Transf. B*, 48 (2005) 277-302.

[15] I. Orlanski, A simple boundary condition for unbounded hyperbolic fows, *J. Comp. Phys.*, 21, (1976) 251-269.

[16] S. Mergui, X. Nicolas, S. Hirata, Sidewall and thermal boundary condition effect on the evolution of longitudinal rolls in Rayleigh-Bénard-Poiseuille convection, *Phys. Fluids*, 23 (2011) 084101.

[17] A. Benderradji, A. Haddad, R. Taher, M. Medale, C. Abid, F. Papini, Characterization of fluid flow patterns and heat transfer in horizontal channel mixed convection, *Heat Mass Transf.*, 44 (2008) 1465-1476.

Remerciements

Ce travail a bénéficié d'un accès au centre de calcul de l'IDRIS attribué par GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif) sous les numéros de projet 111474 et 121474.