Sujet de thèse :

Simulation numérique d'augmentation de diffusion de CO_2 par les vagues maritimes

Laurette Tuckerman, PMMH (CNRS, ESPCI, UPMC, UPD)
avec Damir Juric, Jalel Chergui (LIMSI-CNRS)
et Edgar Knobloch (University of California at Berkeley)

Nous souhaitons étudier l'augmentation de la diffusion d'un gaz par les vagues. Une telle augmentation aurait des conséquences importantes pour l'absorption de CO_2 dû aux vagues maritimes [1]. Plus particulièrement, nous proposons d'étudier l'augmentation de la diffusion dans un écoulement engendré par des ondes gravito-capillaires qui, à leur tour, seraient engendrées une oscillation verticale imposée, autrement dit, l'instabilité de Faraday [2]. Notre équipe a effectué les premières simulations numériques de cette instabilité [3]. Nous proposons maintenant d'utiliser un nouveau code parallèle simulant les ecoulements à surface libre écrit par notre group [4], qui est capable de tourner sur 1000 à 10 000 processeurs.

Quels sont les effets de l'oscillation d'une interface ?

i) Les ondes déplacent des concentrations élevées aux régions ayant une concentration plus faible et inversement, augmentant l'effet de la diffusion.

ii) Les ondes augmentent l'aire de la surface entre des régions ayant des concentrations fortes et faibles, augmentant ainsi la diffusion.

iii) La diffusion usuelle serait augmentée par un mécanism découvert par G.I. Taylor pendant les années 1950s [5, 6, 7]. Par moyen de la *dispersion de Taylor* un cisaillement dans une direction augmente la diffusion dans la direction principal de l'écoulement, perpendiculaire au cisaillement. Nous décrivons ce mécanisme ci-dessous pour le cas le plus simple, celui de l'écoulement de Poiseuille dans un tuyeau

$$\mathbf{u} = U\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)\mathbf{e_z}$$

et un champ de concentration qui evolue selon

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla c = \kappa\nabla^2 c$$

Il est possible de demontrer que, avec certaines hypothèses, la moyenne sur une section du tuyeau

$$\bar{c}(z,t) \equiv \frac{1}{\pi R^2}\int_0^R r\,dr\,c(r,z,t)$$

evolue dans la direction axiale selon

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + U\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \left(\kappa + \frac{R^2U^2}{48\kappa}\right)\frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} = \kappa\left(1 + \frac{Pe^2}{48}\right)\frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} \tag{1}$$

où le nombre de Péclet est

$$Pe \equiv \frac{RU}{\kappa} \tag{2}$$

Nous proposons d'étudier l'augmentation de diffusion par les mécanismes (i), (ii), et (iii), dans l'écoulement engendré par les ondes de Faraday, eventuellement d'amplitude importante et ayant un comportement temporel chaotique. Les paramètres qui sont facilement variables sont la fréquence ω et l'amplitude a de l'oscillation verticale imposée. Nous fixerions les autres paramètres aux valeurs qu'ont le CO_2, l'air et l'eau.

La vitesse typique des ondes de Faraday est

$$U = [(a - a_c)\lambda]^{1/2} \tag{3}$$

où λ est la longueur d'onde (qui est la longueur typique si les frontières en haut et en bas de la cavité sont loins). $U\lambda$ est alors le taux de cisaillement. La quantité a_c est l'amplitude critique de forccage verticale pour l'instabilité de Faraday, à laquelle des ondes stationnaires apparaissent.

Les paramètres critiques sans dimension sont

le nombre de Reynolds	$Re = \dfrac{U\lambda}{\nu}$
le nombre de Péclet	$Pe = \dfrac{U\lambda}{\kappa}$
le nombre de Strouhal	$\dfrac{U}{\lambda\omega}$

Le nombre de Reynolds détermine la plage d'échelles qui sont présentes dans l'écoulement et donc la résolution numérique nécéssaire.

Comme le montre l'équation (1), la dispersion de Taylor est contrôlée par le nombre de Péclet, qui doit être plus grand que le nombre de Reynolds, $Pe \gg Re$ pour obtenir des interactions interessantes entre le champ de concentration et les ondes. Si la fréquence des ondes est faible mais l'amplitude est importante, l'écoulement ressemble à un reseau de cellules stationnaires. De tels écoulements expulsent des gradients de concentration de l'intérieurs des cellules vers les couches limites d'épaisseur $\lambda Pe^{-1/2}$. Cette expulsion des gradients mène à une augmentation de la diffusivité moleculaire κ à $\kappa_{\text{eff}} = \kappa Pe^{1/2}$. Cette augmentation peut être importante si $Pe \gg 1$. Par contre, si $Pe \ll 1$, nous nous attendons pas à une intéraction importante avec les vagues.

Le nombre de Strouhal mesure le rapport entre le taux de cisaillement et la fréquence. Il peut aussi être considéré comme le rapport entre le temps caracteristique des structures de l'écoulement et le temps de cisaillement. Si $St \gg 1$, alors le temps de vie des tourbillons ou d'autres structures est long comparé à la période de renversement et le cisaillement persiste. C'est dans ce cas que la dispersion de Taylor aurait une influence, surtout le long de l'interface. Par contre, si $St \ll 1$ alors les renversements sont rapides. L'écoulement pendant une demi-période est le contrare de celui de la demi-période précedente et l'effet de de la dispersion de Taylor est alors annullé d'une demi-période à la suivante. Un système cellulaire semblable a été étudié par Merryfield & Knobloch [8].

Les arguments ci-dessus montrent que les conditions $St \gg 1$ et $Pe \gg 1$ sont nécéssaires pour une augmentation importante de la diffusivité. mouvement vertical de particules généré par le mouvement horizontal. Si le nombre de Strouhal est grand, l'écoulement est loin des approximations faiblement nonlinéaires, nécéssitant des calculs numériques. Nous comparerons aussi nos résultats numériques avec l'analyse théorique de Roberts & Chang [9].

Le code, BLUE, a déjà été validé en reproduisant les motifs, seuils et scenarios observés dans les ondes de Faraday [3]. La parallelisation de BLUE reste efficace sur au moins 8192 coeurs. Cette étude sera menée en collaboration avec D. Juric et J. Chergui, du LIMSI-CNRS (Orsay), et E. Knobloch, professeur de physique à l'Université de Californie (Berkeley).

References

[1] Komori, Shimada, Murakami, Laboratory estimation of CO_2 transfer velocity across the air-sea interface, Biogeochemical Processes and Ocean Flux in the Western Pacific, Eds. Sakai, Nozaki, Terra Scientific, Tokyo, 1995.

[2] M. Faraday, On a peculiar class of acoustical figures; and on certain forms assumed by groups of particles upon vibrating elastic surfaces,Philos. Trans. R. Soc. London **121**, 299–340 (1831).

[3] N. Périnet, D. Juric, L.S. Tuckerman, Numerical simulation of Faraday waves, J. Fluid Mech. 635, 1 (2009)

[4] S. Shin, J. Chergui, D. Juric, A. Farhaoui, L. Kahouadji, L.S. Tuckerman, N. Périnet, Parallel direct numerical simulation of three-dimensional two-phase flows, 8th Int. Conf. on Multiphase Flow, Jeju, Korea, May 26-31, 2013.

[5] G. I. Taylor, Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube, Proc. Roy. Soc. London A. **219**, 186–203 (1953).

[6] G. I. Taylor, The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe, Proc. Roy. Soc. London A. **223**, 446–468 (1954).

[7] G. I. Taylor, Conditions under which dispersion of a solute in a stream of solvent can be used to measure molecular diffusion, Proc. Roy. Soc. London A. **225**, 473–477 (1954).

[8] E. Knobloch, W.J. Merryfield, Enhancement of diffusive transport in oscillatory flows, Astrophys. J. **401**, 196–205 (1992).

[9] R.M. Roberts, H.-C. Chang, Wave-enhanced interfacial transfer, Chem. Eng. Sci. **55** 1127–1141 (2000).