

## Intégration d'une équation d'état de l'azote pour les hautes températures (5000K) et hautes pressions (25GPa) pour un modèle de cristallisation de la glace par une bulle de cavitation inertielle.

**Porteur :** Stéphane LABOURET

**Laboratoire :** LAGEPP

**Partenaires :** Claudia Cogné, Roman Peczalski (LAGEPP)

**Nature du financement demandé :** Stage de M1, 3 mois

**Montant de la demande de financement :** (si stage 600 euros\*3)

**Résumé :** (200 mots)

Le travail demandé est d'introduire dans un modèle prédictif du nombre cristaux de glace formés autour d'une bulle de cavitation qui se contracte de manière inertielle, une équation de la dynamique de la bulle modifiée par le remplacement de l'équation d'état du gaz, qui est actuellement de la forme Van der Waals, par une équation d'état fondée sur des expériences à plus hautes pressions et températures, et dont la corrélation est construite en utilisant les énergies de Helmholtz. Il y aura à remplacer également la loi de corrélation qui décrit la conductivité du gaz. Le modèle dynamique doit être transposé de Scilab à Matlab, puis inséré dans le modèle de cristallisation existant. On espère améliorer les prévisions, mais aussi pouvoir étendre son utilisation vers de plus fortes pression et fréquences acoustiques (actuellement 20-100kHz, 3 bars)

**Sujet développé :** La cristallisation de la glace de l'eau est initiée par des bulles de cavitation ultrasonore en raison des pressions et températures présentes près de la paroi de la bulle qui placent le liquide dans des conditions de fort sous-refroidissement pour les glaces IV et VII qui sont supposées être à l'origine de la formation ultérieure de la glace Ih par un processus qui n'est pas décrit pour le moment. Cette méthode de déclenchement de la cristallisation de la glace trouve de potentielles utilisations pour la lyophilisation, la climatisation par coulis de glace, la dépollution de l'eau par cristallisation autour de tubes froids ; cette méthode permet un contrôle sur la température de formation de la glace d'une part, et d'autres part sur le nombre de cristaux créés sur un court laps de temps ce qui influe sensiblement sur leurs tailles finales.

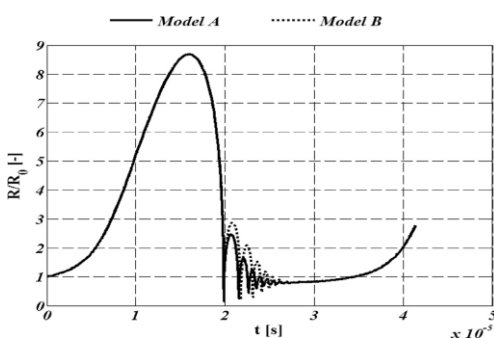


Figure 1 :  $R(t)/R_0$  [1]

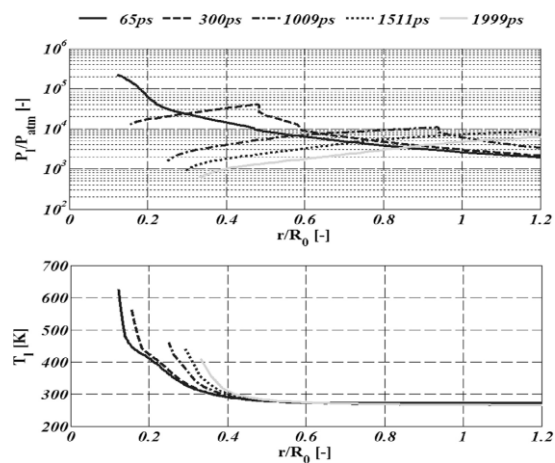


Figure 2 :  $P(t)/P_{atm}$  (haut) et  $T(t)$  (en K) [1]

Une modélisation pour déterminer le nombre de germes de cristaux de glace viables formés autour d'une bulle sphérique de cavitation inertielle en fin de sa contraction a été programmée lors d'un projet ANR (Sononuclice) qui a pris fin en 2014 [1,2]. Ce modèle utilise l'équation dynamique d'une bulle de cavitation de type Rayleigh-Plesset (figure 1 ; exemple d'évolution du rayon de la bulle comprenant sa contraction et les rebonds qui suivent,  $R_0=5$  micromètres, 29 KHz, 1,9 bar de pression acoustique) et la théorie de nucléation homogène. De plus, un modèle de transfert thermique entre le gaz et le liquide, a été mis en place par C. Cogné et R. Peczkalski, basé sur la diffusion de chaleur, d'abord à travers une couche de gaz adjacente à la paroi de la bulle, puis dans le liquide : ce modèle de transfert thermique permet d'obtenir le profil de température dans le liquide autour d'une bulle sphérique (figure 2, profil de pression et de température pour plusieurs instants après la fin de la contraction de la bulle). Le modèle de cristallisation homogène utilise la pression et température comme donnée de départ.

Dans ce transfert thermique, la température du gaz juste après l'implosion ainsi que le rayon de la bulle sont des paramètres importants qui dépendent de l'équation d'état introduite dans le modèle. Actuellement, c'est une équation de type Van der Waals qui est utilisée mais, elle tend à rigidifier le gaz prématurément lors de la contraction de la bulle, par rapport à d'autres équations d'états établies à partir d'expériences à des pressions plus fortes : équations d'états dites cubiques qui sont une extension de la forme du gaz de Van der Waals, ou corrélation construite à partir de l'énergie de Helmholtz qui est la forme utilisée dans ce travail [3]. En effet, la limite d'utilisation de l'équation de Van der Waals se situe un peu en-dessous de 1 GPa, et la pression de bulle atteint plusieurs GPa en fin de contraction.

L'an passé au cours de 2 stages M1 de deux mois, une équation d'état dont la corrélation est construite sur les énergies de Helmholtz a été intégrée à l'équation dynamique de la bulle comprenant le modèle de transfert thermique ; le code est écrit sous Scilab.

Le travail du stage consiste dans un premier temps traduire ce dernier modèle en Matlab, logiciel dans lequel est écrite la modélisation de la cristallisation de la glace autour d'une bulle de cavitation.

Dans un deuxième temps, il s'agira de changer la corrélation qui décrit de la conductivité du gaz de la bulle actuellement utilisée pour une corrélation construite par les auteurs de l'équation d'état.

Enfin, il s'agira d'intégrer ces modifications dans le modèle de cristallisation existant, d'en vérifier le fonctionnement, puis de comparer ses résultats avec ceux de l'ancienne version.

La motivation de la demande est d'étendre un stage de M1 à 3 mois avec plus de chance de terminer le travail de programmation.

#### Bibliographie :

[1] Theoretical model of ice nucleation induced by acoustic cavitation. Part 1: Pressure and temperature profiles around a single bubble ; C. Cogné, S. Labouret, R. Peczkalski, O. Louisnard, F. Baillon, F. Espitalier ; Ultrasonics Sonochemistry, 29, 447-454 (2016).

[2] Theoretical model of ice nucleation induced by inertial acoustic cavitation. Part 2: Number of ice nuclei generated by a single bubble ; C. Cogné, S. Labouret, R. Peczkalski, O. Louisnard, F. Baillon, F. Espitalier ; Ultrasonics Sonochemistry, 28, 185-192 (2016).

[3] A Reference Quality Equation of State for Nitrogen ; R. Span, E. W. Lemmon, R. T. Jacobsen and W. Wagner ; International Journal of Thermophysics, Vol. 19, No.41, (1998)