

Polytech Marseille
Université de Provence - CNRS - UMR 6595

Thèse présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE PROVENCE

Mention : Sciences Spécialité : Mécanique-Énergétique

par

Benoît MATHIEU

Titre

ÉTUDES PHYSIQUE, EXPÉRIMENTALE ET NUMÉRIQUE
DES MÉCANISMES DE BASE INTERVENANT DANS LES
ÉCOULEMENTS DIPHASIQUES EN MICRO-FLUIDIQUE.

Soutenance prévue le 12 novembre 2003
devant la commission d'examen :

M.	Caltagirone J.-P.	
Mme	Colin C.	Rapporteur
M.	Colinet P.	
M.	Lebaigue O.	
Mr.	Stephan P.	Rapporteur
M.	Tadrist L.	Directeur de thèse
Mr.	Ochterbeck J. M.	Invité

Exemplaire provisoire

Table des matières

Introduction	1
I Modélisation de la ligne de contact	5
1 Ingrédients physiques du modèle	7
1.1 La résistance thermique d'interface	7
1.1.1 Le modèle théorique	8
1.1.2 Interprétation de la résistance d'interface	10
1.1.3 Applications numériques	10
1.1.4 Comparaison avec les résultats expérimentaux	12
1.2 Les forces intermoléculaires	13
1.2.1 Les différents types d'interactions connus	14
1.2.2 Interprétation thermodynamique	17
1.3 Le modèle de fluide	21
1.3.1 Choix d'un modèle de fluide	21
1.3.2 Les équations du modèle et les relations de fermeture	25
2 Modélisation des lignes de contact	29
2.1 Angle de contact dynamique	29
2.1.1 Présentation du modèle de Dussan	30
2.1.2 Étude de quelques résultats expérimentaux sur le modèle de Dussan	35
2.1.3 Limitations du modèle	37
2.1.4 La micro-couche	39
2.2 Transfert de chaleur près des lignes de contact	40
2.2.1 Micro-région, domaine conductif et domaine convectif	41
2.2.2 Transfert de chaleur dans le domaine conductif	45
2.2.3 Domaine convectif	49
2.3 Hydrodynamique et transfert de chaleur dans la micro-région	53
2.3.1 Modélisation de la micro-région	54
2.3.2 Analyse des modèles de micro-région	56
2.4 Couplage entre la dynamique et le transfert de chaleur	59
2.4.1 Dynamique de la ligne de contact	59
2.4.2 Influence de la pression de recul	61
2.5 Résumé du modèle et conclusion	64
2.5.1 Profils des grandeurs physiques le long de l'interface	64
2.5.2 Résumé du modèle de ligne de contact	67
2.5.3 Conclusion	69
II Simulation numérique de l'ébullition en paroi	73
3 La méthode mixte front-tracking / VOF	75
3.1 Discussion sur les méthodes numériques	75
3.1.1 Revue de quelques méthodes numériques existantes	76
3.1.2 Critères de qualité de la méthode	77

3.1.3	Notre choix : une méthode de front-tracking	79
3.2	Définition des grandeurs discrètes	81
3.2.1	Le maillage de l'interface	81
3.2.2	Courbure des interfaces	82
3.2.3	Passage conservatif entre maillages	82
3.2.4	Indicatrice de phase et masse volumique	83
3.2.5	Discrétisation de la vitesse et de la pression	83
3.2.6	Discrétisation de l'énergie interne	85
3.2.7	Transfert de chaleur et de masse aux interfaces	85
3.2.8	Divergence discrète de la vitesse	88
3.2.9	Variation de volume	88
3.2.10	Bilan de masse des phases	89
3.3	Les forces interfaciales et les courants parasites	91
3.3.1	Discrétisation classique et interprétation des courants parasites	92
3.3.2	Existence de l'équilibre mécanique	93
3.3.3	Condition d'existence de la géométrie d'équilibre	95
3.3.4	Condition de convergence vers l'équilibre	99
3.3.5	Conclusion sur les courants parasites	101
3.4	Discrétisation des équations	101
3.4.1	Système d'équations discret sur le maillage eulérien	101
3.4.2	Opérateurs de diffusion et de convection	102
3.4.3	Transport des interfaces	102
3.4.4	Dynamique des lignes de contact	104
3.4.5	Transfert de masse et de chaleur à la ligne de contact	105
4	Calculs numériques	111
4.1	Validation de la méthode	111
4.1.1	Problèmes isothermes	111
4.1.2	Problèmes avec transfert de masse et de chaleur	115
4.2	Simulation de l'ébullition	118
4.2.1	Définition du problème résolu	118
4.2.2	Résultats numériques	120
4.2.3	Discussion	125
III	Validation expérimentale du modèle de ligne de contact	129
5	Validation expérimentale du modèle de ligne de contact	131
5.1	Présentation du concept	131
5.1.1	Choix d'une configuration	131
5.1.2	Méthode de mesure des différentes grandeurs	133
5.1.3	Schéma de principe	136
5.1.4	Calculs préliminaires et dimensionnement	137
5.2	Résultats expérimentaux	143
5.2.1	Mouillage d'une plaque chauffée : un effet inattendu	143
5.2.2	Validation du concept CESSIL	148
Conclusion		155
Annexes		161
A	Équation de Poisson	161
A.1	Solutions de l'équation de Poisson	161
A.1.1	Solutions élémentaires	161
A.1.2	Exemple de problème résolu	163

A.1.3	Interprétation, découplage des conditions aux limites	165
A.1.4	Orthogonalité des solutions élémentaires	165
A.1.5	Conclusion sur le problème de Poisson	167
A.2	Transfert de chaleur conductif près des lignes de contact	167
A.2.1	Modèle à deux phases : conductivité thermique de la vapeur négligeable	168
A.2.2	Modèle à trois phases : prise en compte de la conductivité de la vapeur	173
B	Écoulement près des lignes de contact	175
B.1	Étude des solutions de l'équation de Stokes stationnaire	175
B.1.1	Équation de la rotation	175
B.1.2	Solutions élémentaires de l'équation du bilaplacien	175
B.2	Application à la géométrie de ligne de contact	177
B.2.1	Solution élémentaire pour une source à l'origine	178
B.2.2	Autres solutions du problème	179
B.2.3	Solution élémentaire du problème de la paroi défilante	181
B.2.4	Approximation de lubrification	183
B.3	Sur les termes convectifs : écoulement de Jeffery-Hamel	185
B.4	Modèle de ligne de contact à deux fluides	189
B.4.1	Problème de la paroi défilante	189
B.4.2	Terme source singulier (changement de phase)	190
B.5	Approche numérique du problème	192
B.5.1	Validation de la méthode numérique	193
B.5.2	Application à une interface courbe	194
B.6	Modélisation du dépôt d'un film en régime visqueux	194
C	Propriétés et résolution de la micro-région	199
C.1	Le modèle de micro-région de Stephan	199
C.1.1	Établissement des équations du modèle	199
C.1.2	Conditions aux limites et méthode de résolution du système	201
C.1.3	Propriétés générales du modèle de Stephan	202
C.1.4	Résolution du système d'équations	204
C.2	Modèle de micro-région pour une ligne de contact dynamique	207
C.2.1	Modèle de fluide parfaitement mouillant	207
C.2.2	Modèle de fluide partiellement mouillant	212
C.2.3	Étude analytique du modèle de fluide partiellement mouillant	214
C.2.4	Solution approchée du modèle de micro-région	218
D	Calculs techniques relatifs à la méthode de front-tracking	223
D.1	Construction des opérateurs d'interpolation entre maillages	223
D.1.1	Relations de passage conservatives entre grandeur discrète sur les nœuds et grandeur continue sur les interfaces	223
D.1.2	Relations de passage conservatives entre grandeur continue sur les interfaces et grandeur sur le maillage fixe	224
D.1.3	Remarques sur la mise en œuvre de ces opérateurs	224
D.2	Démonstration de l'existence d'un «maillage d'équilibre»	225
E	Électronique de commande et de mesure du prototype CESSIL	227
E.1	Conditionnement des signaux thermocouples	227
E.1.1	Cahier des charges	227
E.1.2	Système de mesure et sources d'erreur	228
E.1.3	Conception de l'amplificateur	230
E.1.4	Plan d'ensemble	233
E.2	Alimentation de précision des résistances de chauffage	234
E.2.1	Schéma du montage	234
E.2.2	Limites d'utilisation	234
E.2.3	Validation	235

Nomenclature	237
Références	239

Introduction

Ce mémoire a pour objet l'étude de phénomènes microscopiques fondamentaux liés aux écoulements diphasiques avec changement de phase. Dans cette introduction, on présente d'abord les principales motivations de cette étude et les recherches qu'elles impliquent. Ce rappel sera suivi d'une description de la structure du mémoire.

Motivations

Dans le contexte du laboratoire où ce travail a eu lieu, on a envisagé principalement deux types d'applications impliquant des écoulements diphasiques avec éventuellement transfert de masse et de chaleur :

- dans le domaine nucléaire, l'étude très détaillée des écoulements diphasiques dans les circuits de refroidissement des centrales,
- et dans le domaine de la microfluidique, l'étude des écoulements diphasiques dans des circuits de petites dimensions, des milieux confinés ou l'interaction de l'écoulement avec des structures de petite taille.

La problématique générale

Dans le domaine nucléaire, les écoulements diphasiques apparaissent dans le cœur du réacteur en situation accidentelle, lors d'une dépressurisation ou d'une excursion de puissance. Le flux de chaleur nominal aux parois des crayons de combustible est optimisé pour rester en dessous de la limite pour laquelle apparaît l'ébullition car la marge de puissance entre le début de l'ébullition et le flux critique est très réduite. Si le flux critique est atteint, le coefficient d'échange chute brusquement, les crayons de combustible s'échauffent en une fraction de seconde et se mettent à fondre : c'est l'accident nucléaire. C'est pourquoi la maîtrise du régime d'écoulement dans le cœur du réacteur est un enjeu colossal pour la sûreté des centrales.

Parmi les moyens mis en œuvre pour assurer cette maîtrise, le CEA consacre un effort de recherche important à la modélisation des écoulements diphasiques, dont la simulation numérique directe fait partie. La simulation directe consiste à modéliser un écoulement diphasique et les interfaces en tenant compte de la géométrie précise des interfaces. Cette méthode est donc bien plus fine qu'un modèle moyenné. Elle devrait permettre d'aborder des problèmes comme :

- l'obtention d'informations détaillées sur la dynamique des interfaces et le transfert de chaleur dans l'écoulement diphasique,
- la construction de relations de fermeture pour des modèles moyennés à partir de résultats de simulations fines à petite échelle,
- la mise en évidence du mécanisme physique qui détermine le flux critique,
- la vérification que les mesures intrusives mises en œuvre dans les expériences ne sont pas biaisées par des interactions inattendues entre les sondes et l'écoulement.

Dans le domaine de la microfluidique, le laboratoire est actuellement concerné par deux études d'écoulements diphasiques à petite échelle :

- la modélisation des micro-caloducs classiques et des caloducs pulsants,
- la modélisation des interactions entre l'écoulement diphasique et les sondes optiques utilisées pour la mesure du taux de vide.

Toutes les applications citées impliquent la simulation d'un écoulement instationnaire où la géométrie des interfaces liquide-vapeur, la tension de surface et éventuellement le changement de phase jouent un rôle prépondérant. C'est pourquoi la mise en œuvre d'une méthode de simulation numérique fondée sur un suivi des interfaces est au cœur de nos préoccupations.

«Les problèmes sont toujours au bord»

C'est un poncif de numériciens qui prend ici une dimension particulière, ou plutôt deux. Dans un écoulement diphasique, les interfaces liquide-vapeur sont en quelque sorte des bords. Les grandeurs physiques y sont discontinues et les forces qui prennent la forme de Dirac posent de sérieux problèmes numériques. Pour finir de se convaincre de la difficulté du problème, ajoutons que ces bords se déplacent au cours du temps et changent de topologie.

Devant une telle difficulté, de nombreuses solutions ont été proposées et il semble que l'on soit proche d'une solution satisfaisante. Pourtant, de plus grandes difficultés nous attendent : qu'y a-t-il en effet aux bords des interfaces ?

La réponse est : des lignes de contact. La ligne de contact constitue une singularité d'un ordre encore plus élevé que les interfaces : c'est une singularité linéique située au bord d'une singularité surfacique. Non seulement les grandeurs physiques n'y sont pas continues, ce qui pose des problèmes numériques, mais on ne dispose même pas toujours d'un modèle physique simple pour les décrire.

Les lignes de contact constituent une singularité à la fois pour le bilan de quantité de mouvement (la dissipation visqueuse y tend vers l'infini) et pour l'équation d'énergie (en présence d'une paroi de forte conductivité thermique, le flux de chaleur y est supérieur de plusieurs ordres de grandeurs au flux à l'intérieur de l'écoulement). L'expérience montre d'autre part que le comportement des lignes de contact dépend d'un grand nombre de facteurs parmi lesquels peu sont maîtrisés en pratique (rugosité des parois, état de surface et de contamination chimique, composition du fluide et contamination éventuelle par des surfactants, *etc.*).

Or ces lignes de contact jouent un rôle primordial dans les phénomènes à petite échelle que nous voulons étudier : l'angle de contact détermine en partie la géométrie des interfaces dans l'écoulement, et le flux de chaleur singulier peut représenter une part non négligeable du flux de chaleur total (en tous cas, ceci est prouvé pour les caloducs et on peut le penser aussi dans le cas de l'ébullition). Il paraît vraisemblable aussi que le flux critique puisse être lié à une instabilité des lignes de contact.

La difficulté de modélisation et le rôle important joué par les lignes de contact ont motivé cette étude.

Plan du mémoire

Nous avons tenté d'aborder le problème sous trois angles différents :

- une modélisation physique de la ligne de contact,
- une approche nettement orientée vers la simulation numérique,
- une validation expérimentale.

Modélisation physique de la ligne de contact

On trouve un grand nombre de publications sur les lignes de contact, soit sur la dynamique des lignes de contact (comment le comportement de l'écoulement et des interfaces est-il couplé à leur déplacement le long de la paroi ?), soit sur le transfert de masse et de chaleur aux lignes de contact. Peu d'auteurs se sont intéressés à la combinaison des deux, et le résultat n'est pas forcément une simple superposition des phénomènes observés séparément.

Dans la première partie du mémoire, on propose donc une modélisation physique de la ligne de contact dynamique avec transfert de masse (évaporation). Pour cela, nous aurons besoin d'ingrédients de modélisation physique fondamentaux, notamment pour modéliser les phases et le transfert de masse aux interfaces. La présentation de ces ingrédients fait l'objet du premier chapitre.

Dans le deuxième chapitre, nous présenterons un modèle de ligne de contact dynamique sur une paroi chauffée. Le modèle est limité à un fluide pur en contact avec une vapeur saturée, et s'intéresse à une solution stationnaire du problème (vitesse de déplacement constante de la ligne de contact) dans une géométrie bidimensionnelle.

Ce chapitre utilise un grand nombre de calculs techniques et d'éléments de démonstration dont les résultats sont importants mais que l'on a préféré reporter en annexe pour la clarté de l'exposé.

Simulation numérique des écoulements diphasiques avec transfert de masse

Si la première partie est nettement orientée vers la physique, le ton adopté dans la deuxième est très différent. Les difficultés liées à ce type de simulation nous ont conduit à nous plonger au cœur des méthodes numériques pour en concevoir une qui soit adaptée à nos problèmes. S'il est possible d'exprimer les qualités requises pour une simulation en termes physiques (conservation de la masse, bilan d'énergie correct, *etc.*), l'exposé de la méthode numérique fait appel à d'autres outils.

Dans le troisième chapitre, on propose une méthode numérique capable de simuler «raisonnablement» les problèmes qui nous intéressent. Nous sommes encore loin d'une méthode ayant toutes les qualités souhaitées, mais un certain nombre de problèmes deviennent abordables avec un bon niveau de confiance dans le résultat.

Le chapitre suivant présente les résultats numériques de validation fondamentaux et deux applications. Comme la méthode numérique est nouvelle, sa validation est un résultat essentiel. Les applications ne sont cependant pas encore tout à fait satisfaisantes. À l'heure où nous rédigeons ces lignes, il manque encore quelques lignes de code pour que les simulations soient réellement exploitables.

L'apport essentiel de cette partie est une méthode numérique capable de traiter des problèmes nettement dominés par la tension de surface, avec des rapports de masse volumique très élevés (supérieurs à 1000) en respectant exactement le bilan de masse des phases et avec une modélisation physiquement correcte des lignes de contact (angle de contact dynamique et transfert de masse singulier).

Validation expérimentale du modèle de ligne de contact

Cette partie apporte un peu d'air aux développements théoriques précédents. Il nous a paru nécessaire d'aborder le problème aussi par une voie expérimentale, et ce choix coûteux en temps nous a peut-être empêchés d'aller plus loin dans les deux premières parties. Néanmoins, cette approche est utile pour plusieurs

raisons.

La plus évidente est qu'il n'existe pas à l'heure actuelle de mesure quantitative du transfert de masse à la ligne de contact pour des fluides usuels sur des parois «normales». Une autre raison qui apparaît *a posteriori* est que cette approche expérimentale nous a guidés dans la démarche de modélisation. Ainsi, contrairement à de nombreuses publications théoriques sur la ligne de contact, nous n'avons pas cherché à obtenir des solutions analytiques exactes dans des configurations particulières. Au contraire, nous avons privilégié des approximations permettant d'obtenir une description raisonnable des lignes de contact dans les configurations les plus variées. Cette approche nous a été imposée par les résultats expérimentaux : ces résultats sont si éloignés des configurations analytiques qu'il fallait étendre le plus possible le domaine du modèle. Quand on annonce des précisions de quelques dizaines de pour-cent sur le modèle théorique, c'est parce qu'on s'est volontairement placé dans des configurations réalistes où le modèle ne décrit pas idéalement la réalité du phénomène.

Le chapitre 5 présente l'expérience que nous cherchons à mettre au point pour obtenir une validation quantitative du modèle de ligne de contact. Sa mise au point n'est pas facile et le temps imparti était largement insuffisant pour la mener à bien. Nous avons néanmoins réalisé quelques expériences préliminaires dont les résultats sont prometteurs, et rassemblé les outils de mesure requis pour réaliser l'expérience finale. On y présente ensuite les résultats expérimentaux préliminaires les plus pertinents. Bien que nous ne soyons pas parvenus à un résultat quantitatif sur la mesure de flux de chaleur singulier, nous avons pu obtenir des ordres de grandeurs et nous avons surtout pu mettre en évidence les problèmes techniques majeurs posés par cette expérience. Un sous-produit intéressant de cette expérience est la mise en évidence d'un phénomène inattendu. Ce phénomène ressemble à première vue au phénomène de Leidenfrost, mais il se manifeste à des températures bien plus faibles, voire en dessous de la température de saturation.

Première partie

Modélisation de la ligne de contact

Chapitre 1

Ingrédients physiques du modèle

Le but de ce chapitre est de rassembler les différents éléments de modélisation dont nous aurons besoin dans cette étude. Celle-ci repose entièrement sur des raisonnements de mécanique des milieux continus. Or, les équations qui régissent les écoulements diphasiques et les transferts de masse et de chaleur font déjà l'objet d'une modélisation à un niveau plus fin. Ces modèles permettent en quelque sorte de passer d'une description moléculaire des fluides à une description en termes de milieux continus et de discontinuités aux interfaces. La première étape consiste donc naturellement à poser les fondements de l'étude en décrivant les modèles de base.

Vu de loin et loin du point critique, un écoulement diphasique est très bien décrit par des volumes de fluides séparés par des interfaces. L'intérieur des volumes est décrit par des grandeurs physiques qui varient continûment (vitesse, pression, température, etc.). Les interfaces entre les volumes sont des surfaces de discontinuité de ces grandeurs. Les modèles de base décrivent ainsi le milieu diphasique par un ensemble d'équations aux dérivées partielles dans les volumes et des relations de saut aux interfaces.

Dans ce chapitre, nous rassemblons les différents éléments disponibles dans la littérature pour construire un modèle de milieu diphasique. Cette démarche nous permet de faire le point sur l'état actuel des modèles, leur validation expérimentale et leurs limites.

1.1 La résistance thermique d'interface

La résistance thermique d'interface est un phénomène difficile à observer, et dont la conséquence est qu'en présence de changement de phase, l'interface ne peut pas être supposée à l'équilibre thermodynamique local (hypothèse que l'on peut conserver partout ailleurs dans la plupart des cas). Ainsi, la température des phases à l'interface, que l'on suppose continue, varie en fonction du flux de masse. À l'équilibre thermodynamique, la température à l'interface est égale à la température de saturation. Or d'après le modèle que nous allons présenter, la température s'en écarte linéairement en fonction du flux de masse.

Ce modèle est un élément fondamental de cette étude. En effet, à petite échelle, la résistance d'interface freine considérablement le transfert de masse aux interfaces. Elle conduit à une échelle de longueur caractéristique en dessous de laquelle le transfert de masse et de chaleur n'est plus du tout dominé par la conduction dans les phases mais par ce phénomène localisé aux interfaces.

Après avoir rappelé les fondements du modèle proposé par Schrage, nous interpréterons ce phénomène comme une longueur caractéristique. Nous appliquerons le modèle à quelques exemples concrets et nous examinerons quelques résultats expérimentaux disponibles.

1.1.1 Le modèle théorique

Les explications qui suivent sont largement inspirées du livre de Carey [12]. L'article d'Ytrehus [93] constitue lui aussi une bonne référence mais la publication la plus souvent citée dans ce domaine semble être celle de Schrage [73].

L'agitation thermique des molécules produit un transfert de masse permanent à travers l'interface liquide-vapeur. À l'équilibre thermodynamique, le flux de masse \dot{m}_v du liquide vers la vapeur est exactement compensé par le flux de masse \dot{m}_l vers le liquide et le flux de masse global vers la vapeur $\dot{m} = \dot{m}_v - \dot{m}_l$ est nul.

Un modèle simple fondé sur la cinétique des gaz permet d'obtenir la valeur du flux \dot{m}_l . Dans un gaz à l'équilibre thermodynamique et à vitesse moyenne nulle, le flux de masse \dot{m}_i des particules traversant un plan dans une direction donnée est égal à

$$\dot{m}_i = \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \frac{P}{\sqrt{T}} \quad (1.1)$$

où M est la masse molaire du fluide, R la constante des gaz parfaits, P la pression du gaz et T sa température en amont du plan.

Si le gaz se déplace à une vitesse moyenne u dans la direction normale au plan, le flux de masse traversant le plan dans chaque direction s'écrit

$$\dot{m}_i^+ = \Gamma(a) \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \frac{P}{\sqrt{T}} \quad (1.2)$$

$$\dot{m}_i^- = \Gamma(-a) \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \frac{P}{\sqrt{T}} \quad (1.3)$$

où a est le rapport entre la vitesse moyenne u et une vitesse caractéristique des molécules. En utilisant la loi des gaz parfaits, on a

$$a = \frac{u}{\sqrt{2RT/M}} = \dot{m} \sqrt{\frac{RT}{2M}} \frac{1}{P} \quad (1.4)$$

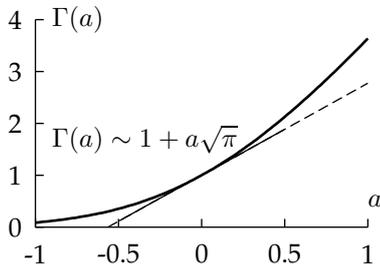
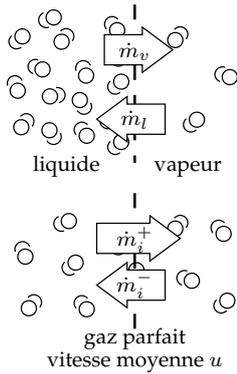
et la fonction Γ est définie comme suit :

$$\Gamma(a) \hat{=} \exp(-a^2) + a\sqrt{\pi} (1 + \operatorname{erf} a) \quad (1.5)$$

Le flux de masse \dot{m}_l traversant l'interface en direction du liquide est une fraction ϵ du flux \dot{m}_i^- . En effet, une partie des molécules qui atteignent l'interface peut rebondir sur l'interface sans la traverser. Le coefficient ϵ est appelé coefficient d'évaporation ou coefficient de condensation selon la direction du transfert de masse et ces deux coefficients ne sont pas forcément égaux. Le flux \dot{m}_l s'écrit donc :

$$\dot{m}_l = \epsilon \dot{m}_i^- = \epsilon \Gamma(-a) \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \frac{P_v}{\sqrt{T_v}} \quad (1.6)$$

Le flux de masse \dot{m}_v traversant l'interface en direction de la vapeur est évalué en utilisant l'hypothèse suivante : si l'interface se trouvait à l'équilibre thermodynamique (isotherme sans changement de phase), les flux seraient égaux (on aurait $\dot{m}_v = \dot{m}_l$). Cette hypothèse revient à supposer que l'état thermodynamique



du liquide vérifie $T_l = T_{sat}(P_l)$, ou encore $P_l = P_{sat}(T_l)$ (T_{sat} et P_{sat} sont les température et pression de saturation du liquide tenant compte de la courbure de l'interface). On évalue donc le flux de masse \dot{m}_v comme suit :

$$\dot{m}_v = \epsilon \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \frac{P_l}{\sqrt{T_l}} \quad (1.7)$$

L'équation suivante, due à Schrage [73], donne le flux de masse global à travers une interface plane :

$$\dot{m} = \epsilon \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \left(\Gamma(a) \frac{P_v}{\sqrt{T_v}} - \frac{P_l}{\sqrt{T_l}} \right) \quad (1.8)$$

Pour de faibles flux de masse (soit $|a| < 0.2$), le développement limité de la fonction Γ permet d'obtenir une expression facile à mettre en œuvre. On utilise $\Gamma(a) \sim 1 + a\sqrt{\pi}$:

$$\dot{m} = \epsilon \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \left((1 + a\sqrt{\pi}) \frac{P_v}{\sqrt{T_v}} - \frac{P_l}{\sqrt{T_l}} \right) \quad (1.9)$$

En utilisant l'expression 1.4, on obtient :

$$\dot{m} = \epsilon \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \left(\frac{P_v}{\sqrt{T_v}} - \frac{P_l}{\sqrt{T_l}} \right) + \epsilon \frac{\dot{m}}{2} \quad (1.10)$$

d'où l'on tire l'expression de \dot{m} :

$$\dot{m} = \frac{2\epsilon}{2 - \epsilon} \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \left(\frac{P_v}{\sqrt{T_v}} - \frac{P_l}{\sqrt{T_l}} \right) \quad (1.11)$$

Pour de faibles sauts de pression et de température autour des valeurs P et T , on a :

$$\dot{m} = \frac{2\epsilon}{2 - \epsilon} \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \frac{P}{\sqrt{T}} \left(\frac{P_v - P_l}{P} - \frac{T_v - T_l}{2T} \right) \quad (1.12)$$

En utilisant la relation de Clapeyron, on peut montrer que le terme impliquant le saut de température dans l'équation ci-dessus est négligeable devant le terme impliquant le saut de pression (il représenterait entre 10 et 30 % du terme en pression). La démonstration qui amène à ce résultat suppose qu'il existe une discontinuité de la température à l'interface liquide-vapeur. L'utilisation dans cette situation de déséquilibre de relations thermodynamiques relatives à l'équilibre local (la relation de Clapeyron) semble abusive mais conduit à un résultat qui a pu être vérifié expérimentalement (voir plus loin).

L'hypothèse qui conduit à la relation 1.7 permet de décrire l'état du liquide et de la vapeur dans l'interface hors équilibre : on a $P_l = P_{sat}(T_i)$. On introduit la relation de Clausius- Clapeyron :

$$\frac{\partial P_{sat}(T)}{\partial T} = \frac{\mathcal{L} \rho_l \rho_v}{T(\rho_l - \rho_v)} \quad (1.13)$$

Ainsi, pour un petit écart à l'équilibre, on a :

$$P_v - P_l = P_v - P_{sat}(T_i) = \frac{\partial P_{sat}(T)}{\partial T} (T_{sat}(P_v) - T_i) = \frac{\mathcal{L} \rho_l \rho_v}{T(\rho_l - \rho_v)} (T_{sat}(P_v) - T_i) \quad (1.14)$$

Cette relation permet d'exprimer le flux de masse en fonction de la différence entre la température de l'interface et la température de saturation correspondant à la pression de la vapeur et à la courbure de l'interface :

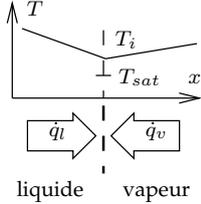
$$\dot{m} = \frac{2\epsilon}{2 - \epsilon} \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} \frac{\mathcal{L} \rho_l \rho_v}{T(\rho_l - \rho_v)} (T_{sat}(P_v) - T_i) \quad (1.15)$$

1.1.2 Interprétation de la résistance d'interface

Le flux de masse \dot{m} à travers l'interface résulte du changement de phase dû au flux de chaleur $\dot{q} = \dot{q}_l + \dot{q}_v$ arrivant à l'interface :

$$\dot{m} = \frac{\dot{q}}{\mathcal{L}} \quad (1.16)$$

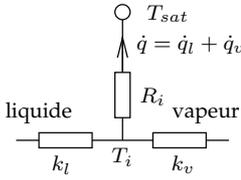
On définit la résistance d'interface R_i de la façon suivante



$$R_i \triangleq \frac{2 - \epsilon}{2\epsilon} \frac{T_{sat} \sqrt{2\pi RT_{sat}/M} (\rho_l - \rho_v)}{\mathcal{L}^2 \rho_v \rho_l} \quad (1.17)$$

où ϵ est le coefficient d'évaporation ou de condensation, M la masse molaire du fluide, T_{sat} la température de saturation locale (tenant compte de la courbure de l'interface), \mathcal{L} l'enthalpie massique de vaporisation et ρ_v la masse volumique de la vapeur à la température et la pression de saturation locales.

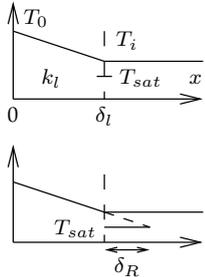
Avec cette définition, on a la relation simple suivante :



$$\dot{q} = \frac{T_i - T_{sat}(P_v)}{R_i} \quad (1.18)$$

Cette relation conduit à une interprétation très simple de la résistance d'interface. Le champ de température est gouverné par la conduction thermique dans les phases et un puits de chaleur situé à l'interface dont le flux est converti en changement de phase (voir schéma ci-contre).

Considérons la situation où le liquide de conductivité thermique k_l s'évapore sous l'effet d'un flux de chaleur arrivant à travers un film de liquide d'épaisseur δ_l . On appelle T_0 la température du liquide à l'opposé de l'interface. On suppose que le flux de chaleur dans la vapeur est négligeable. Le flux de chaleur à travers le film de liquide est donné par :



$$\dot{q} = \frac{T_0 - T_{sat}}{\frac{\delta_l}{k_l} + R_i} = k_l \frac{T_0 - T_{sat}}{\delta_l + \delta_R}, \quad \text{avec } \boxed{\delta_R \triangleq R_i k_l} \quad (1.19)$$

La longueur $\delta_R = R_i k_l$ représente l'épaisseur du film de liquide qui a la même résistance thermique que l'interface liquide-vapeur. Si l'épaisseur du film de liquide est inférieure à δ_R , la résistance d'interface est dominante et détermine le flux de chaleur. Au contraire, si l'épaisseur du film est très supérieure à δ_R , la résistance thermique est négligeable et le flux de chaleur est limité par la conductivité thermique du film de liquide.

1.1.3 Applications numériques

La figure 1.1 montre la variation de la résistance d'interface et de l'épaisseur de film liquide équivalente pour différents fluides en fonction de la pression de la vapeur. Les données utilisées proviennent de différentes sources et on a parfois utilisé des approximations (loi des gaz parfaits, interpolations) lorsqu'elles n'étaient pas disponibles. Ces approximations suffisent cependant à donner l'allure générale des courbes pour les comparer. Les courbes sont tracées en utilisant l'expression 1.17, avec un coefficient d'évaporation $\epsilon = 1$.

Les valeurs généralement rencontrées sont très faibles. On remarque qu'en dehors des pressions très basses, l'épaisseur de liquide équivalente δ_R est faible, souvent inférieure au micromètre. C'est pourquoi la résistance d'interface ne se

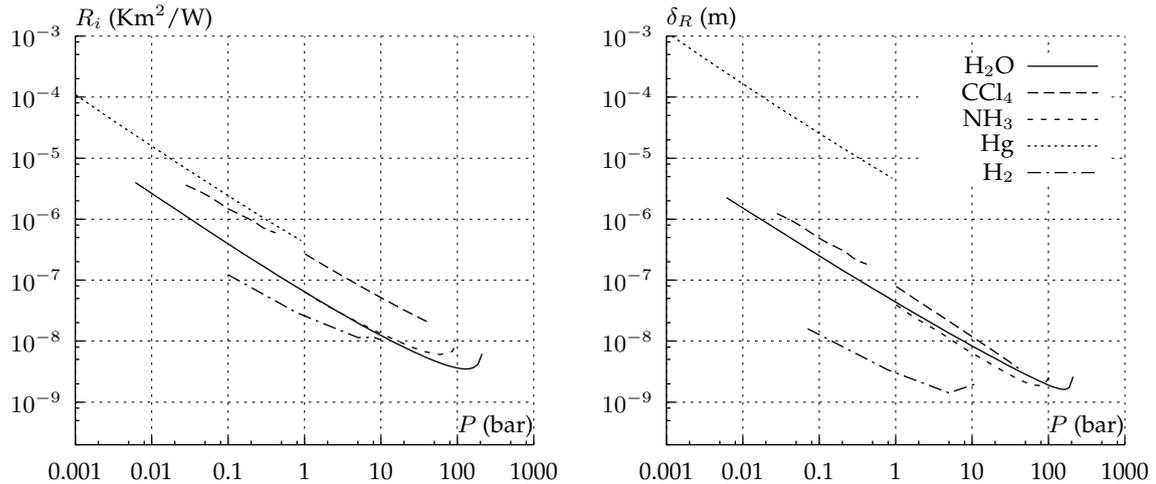
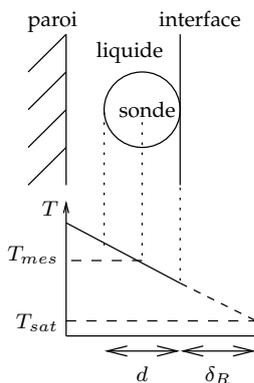


Figure 1.1 – Résistance d’interface et épaisseur de film équivalente de différents fluides en fonction de la pression. En règle générale, la résistance d’interface R_i et l’épaisseur équivalente δ_R varient comme l’inverse de la pression. L’ordre de grandeur est à peu près toujours le même, à l’exception des fluides très conducteurs tels que les métaux liquides.

manifeste que dans des configurations très particulières où la dimension caractéristique des domaines liquides ou l’épaisseur des couches limites thermiques est inférieure à δ_R (notamment à proximité des lignes de contact, dans des systèmes de taille microscopique, lors de phénomènes transitoires très rapides ou encore pour certains liquides particulièrement bons conducteurs de la chaleur —le mercure et l’hélium par exemple).

La figure 1.1 montre qu’en général la résistance d’interface augmente avec la masse molaire des molécules et varie comme l’inverse de la pression. Sauf pour des fluides spéciaux (comme le mercure ou l’hydrogène par exemple), l’épaisseur équivalente δ_R ne dépend pratiquement pas du fluide et varie comme l’inverse de la pression.

Exemple : mesure de la température d’interface



Pour illustrer l’effet de la résistance d’interface, considérons par exemple le cas d’une mesure de température à la surface d’un liquide. Cet exemple correspond à une méthode expérimentale utilisée pour déterminer la résistance d’interface. Considérons le système représenté ci-contre, constitué d’un film de liquide chauffé par la gauche et d’un ciel de vapeur. Le flux de chaleur \dot{q} à travers le film de liquide est uniforme. Un fil de diamètre d tangent à l’interface fournit une mesure de la température moyenne du liquide à sa surface. Supposons pour simplifier que la conductivité thermique du fil est égale à celle du liquide, de sorte que sa présence ne modifie pas le champ de température.

La température du liquide varie linéairement avec la distance à l’interface comme illustré sur le graphique ci-contre. Le fil mesure une température égale à $T_{mes} = T_{sat} + \dot{q}/k_l (\delta_R + d/2)$. Si la profondeur d’immersion du fil est inconnue mais inférieure à son diamètre, la température mesurée est comprise entre $T_{sat} + \dot{q}/k_l \delta_R$ et $T_{sat} + \dot{q}/k_l (\delta_R + d/2)$. Il n’est en général pas possible d’évaluer précisément cette profondeur d’immersion. Même si on y parvenait, il faudrait aussi tenir compte de la perturbation du champ de température par la présence du fil, qui engendre des variations du même ordre de grandeur. L’erreur de mesure due au diamètre du fil est donc inévitable. L’expérience permet d’obtenir une approximation par excès de l’épaisseur équivalente $\delta_R < k_l(T_{mes} - T_{sat})/\dot{q}$

et l'incertitude est égale à $d/2$.

À une pression de 10 mbar, l'épaisseur équivalente δ_R pour de l'eau est de 1 μm . Le fil utilisé pour la mesure de la résistance d'interface doit donc avoir un diamètre inférieur à un micromètre pour obtenir un ordre de grandeur fiable de la résistance d'interface. À une pression de 1 bar, la mesure semble hors de portée puisque la dimension caractéristique du fil doit être inférieure à 50 nm. Même les techniques d'interférométrie optique risquent d'être inopérantes à ces échelles.

Au contraire, si l'on cherche à mesurer la résistance d'interface du mercure à 1 mbar, l'épaisseur d'interface est de 1 mm environ, dimension très facilement accessible.

1.1.4 Comparaison avec les résultats expérimentaux

La bibliographie des études expérimentales de la résistance d'interface représente un très grand nombre de publications. La mesure précise de la résistance d'interface constitue un enjeu important pour évaluer la performance des évaporateurs. C'est pourquoi de nombreuses méthodes expérimentales ont été utilisées pour vérifier la validité de l'expression 1.17 sur des fluides très différents.

D'après la théorie, le flux de masse ne peut pas excéder la valeur donnée par l'équation 1.15. Le maximum est atteint avec un coefficient d'évaporation ϵ unitaire. L'expérience consiste donc à comparer le flux de masse mesuré expérimentalement à ce flux théorique. On en déduit une estimation du coefficient d'évaporation expérimental.

En général, une expérience de meilleure qualité fournit un coefficient d'évaporation expérimental plus élevé (nous avons vu précédemment qu'une erreur de mesure sur la température conduit généralement à surestimer la résistance d'interface, donc à sous-estimer le coefficient d'évaporation). Le but de la plupart des études expérimentales est d'obtenir la valeur la plus élevée possible du coefficient d'évaporation, voire l'unité. Les valeurs du coefficient d'évaporation ou de condensation mesurées expérimentalement, jamais supérieures et souvent de l'ordre de l'unité, constituent de bons arguments en faveur de l'expression de la résistance d'interface proposée par Schrage.

Résultats expérimentaux disponibles

Le premier fluide sur lequel la résistance d'interface a été mise en évidence est le mercure (pour les raisons évoquées plus haut). Les expériences menées sur d'autres fluides ont donné des résultats très variés. L'eau a naturellement fait l'objet d'un grand nombre d'études (les références les plus anciennes datent des années 1930 et encore aujourd'hui les conclusions ne sont pas très claires). Nous avons trouvé de nombreuses références dans la revue de Marek et Straub [51] sur le coefficient d'évaporation et de condensation de l'eau. La figure 1.2, issue de leur article, reprend l'ensemble des expériences depuis 1930.

Marek et Straub ont en particulier classé les expériences selon que le fluide à l'interface liquide-vapeur est continuellement renouvelé ou non. Si le liquide n'est pas renouvelé, la région proche de l'interface se trouve dans un état stationnaire de transfert thermique similaire à l'exemple étudié dans la section précédente. Comme nous l'avons montré, la mesure directe de la température à l'interface dans un état stationnaire est inaccessible aux techniques intrusives traditionnelles. Si le fluide est renouvelé, il n'a pas le temps de se refroidir sous l'effet de l'évaporation, et il suffit de mesurer la température d'injection du liquide. Ceci peut expliquer en partie pourquoi toutes les expériences utilisant un régime stationnaire de transfert thermique ont conduit à des valeurs extrêmement basses

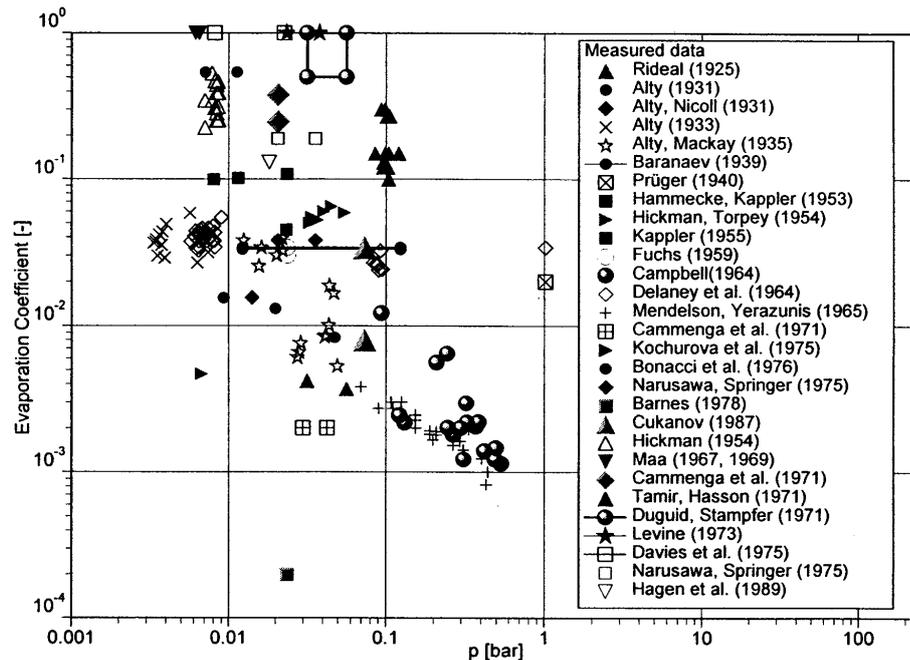


Figure 1.2 – Compilation de résultats expérimentaux réalisée par Marek et Straub [51] pour le coefficient d'évaporation de l'eau (figure reproduite à partir de leur publication).

du coefficient d'évaporation (elles sont généralement inférieures à 0.05). Toujours d'après Marek, les expériences faisant appel à une surface continuellement renouvelée donnent des résultats souvent plus proches de l'unité (les valeurs vont de 0.1 à 1, et on peut noter que plus la température et la pression sont élevées, plus les résultats s'éloignent de l'unité). De nombreux auteurs invoquent ainsi la mesure de température comme source d'erreur majoritaire (voir [51], [26] ou encore [48]).

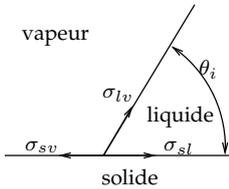
On trouve des résultats expérimentaux pour d'autres fluides. Les premiers résultats incitaient à penser que l'eau se comporte différemment des fluides non polaires comme la glycérine. Certains auteurs ont alors proposé des modèles particuliers adaptés aux fluides polaires. Des résultats plus récents ont invalidé ces modèles en montrant que l'eau pouvait s'évaporer avec des coefficients proches de l'unité. Les travaux de Lednovich et Fenn [48] montrent finalement qu'il n'existe pas de différence fondamentale entre les fluides polaires et non polaires et les coefficients d'évaporation obtenus sont supérieurs à 0.9. Le foisonnement d'expériences qui a eu lieu jusqu'en 1980 s'est tari avant d'avoir convergé vers une valeur certaine. Il n'est toujours pas exclu que le coefficient d'évaporation réel de l'eau puisse être égal à 1 en toutes circonstances, et certaines expériences ont d'ailleurs fourni des valeurs très proches. C'est la conclusion de l'étude de Marek et Straub [51] et nous retiendrons la même idée pour la suite de cette étude.

1.2 Les forces intermoléculaires

Les équations de Navier-Stokes comportent déjà certains aspects des forces intermoléculaires. La viscosité, les relations de fermeture thermodynamique $P(T, \rho)$, la température de saturation ou la tension de surface sont autant de grandeurs qui résultent directement des interactions entre les molécules du fluide. Or, si on est habitué à voir apparaître les effets de ces interactions sous

ces formes classiques, les interactions entre le fluide et les parois sont tout aussi importantes.

Si la brusque variation de masse volumique aux interfaces liquide-vapeur produit la tension de surface, le changement de nature chimique entre le fluide et les parois doit avoir un effet tout aussi important sur l'écoulement. Cette idée conduit très naturellement à l'énergie de surface de la relation de Young-Dupré



$$\sigma_{lv} \cos \theta_i = \sigma_{sv} - \sigma_{sl} \quad (1.20)$$

et le lien avec l'angle de contact est évident. Malheureusement, l'angle de contact ne répond pas à un modèle aussi simple. En effet, le dessin ci-contre n'est pertinent que pour une ligne de contact statique et sans changement de phase. En présence de changement de phase, non seulement l'angle de contact est modifié, mais l'équilibre thermodynamique et la température de saturation sont modifiés par la présence de la paroi. C'est pourquoi nous consacrons une partie de ce chapitre à quelques rappels sur les forces intermoléculaires entre les parois et le fluide.

Après avoir cité quelques expressions classiques utilisées pour décrire les interactions moléculaires, nous étudierons avec une forme générique de ces interactions leurs effets sur l'équilibre thermodynamique des interfaces. Nous en déduirons des relations de fermeture pour le modèle continu.

1.2.1 Les différents types d'interactions connus

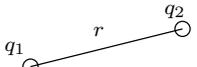
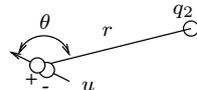
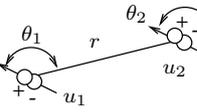
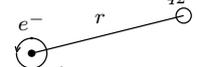
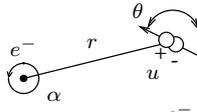
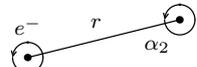
Cette introduction aux forces intermoléculaires est largement inspirée de l'ouvrage d'Israelachvili [39], considéré comme une référence dans ce domaine. La plupart des phénomènes connus y sont décrits et quantifiés sur des exemples concrets. Nous avons repris ici la classification des forces selon le type d'interaction. On trouvera aussi une bonne introduction à ce type de modèles dans le livre de Rocard [71].

Les expressions classiques

Les interactions qui nous intéressent agissent à des distances comprises entre la taille des molécules et quelques dizaines de nanomètres. À ces échelles, les forces électrostatiques sont dominantes. Elles agissent à plusieurs niveaux, selon que les atomes ou les molécules sont polaires ou non, et chargés électriquement ou pas.

On distingue plusieurs types d'interactions, que l'on peut classer selon le taux de décroissance du potentiel des forces en fonction de la distance. Celles-ci sont résumées dans le tableau 1.1. Les ions en solution interagissent comme des particules chargées. La force est alors simplement de nature électrostatique. L'eau et les molécules polaires en général sont des dipôles qui interagissent fortement avec les ions et les autres molécules polaires. À courte distance, la force instantanée entre deux molécules est la somme des forces entre chaque couple d'atomes. Cette force donne lieu au *potentiel instantané*. Comme les dipôles sont en rotation permanente en raison de l'agitation thermique, le *potentiel moyen* résultant est faible (il décroît comme r^{-4} ou r^{-6}). Néanmoins, la polarité des molécules est souvent une caractéristique des bons solvants (l'eau en est un parfait exemple). Les atomes neutres interagissent aussi entre eux, avec les dipôles et avec les ions. Dans ce cas, le noyau atomique et les électrons se comportent ensemble comme un dipôle en rotation très rapide, ce qui explique que le potentiel de ces forces ressemble à celui des dipôles (tout comme les dipôles, il décroît en r^{-6}).

Les trois interactions dont la décroissance est en r^{-6} ont un rôle particulier

	Interaction	Potentiel instantané	Potentiel moyen	Décroissance
	deux charges électriques (Coulomb)	$\frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$		$\frac{1}{r}$
	charge – dipôle	$-\frac{q u \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^2}$	$-\frac{q^2 u^2}{6(4\pi\epsilon_0)^2 k T r^4}$	$\frac{1}{r^4}$
	dipôle – dipôle (Keesom)	$-\frac{u_1 u_2 (2 \cos \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos \phi)}{4\pi\epsilon_0 r^3}$	$-\frac{u_1^2 u_2^2}{3(4\pi\epsilon_0)^2 k T r^6}$	$\frac{1}{r^6}$
	charge – atome neutre (forces d'induction)	$-\frac{q^2 \alpha}{2(4\pi\epsilon_0)^2 r^4}$		$\frac{1}{r^4}$
	dipôle – atome neutre (Debye)	$-\frac{u^2 \alpha (1 + 3 \cos^2 \theta)}{2(4\pi\epsilon_0)^2 r^4}$	$-\frac{u^2 \alpha}{(4\pi\epsilon_0)^2 r^6}$	$\frac{1}{r^6}$
	deux atomes neutres (forces de London)	$-\frac{3}{4} \frac{h \nu \alpha^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 r^6}$		$\frac{1}{r^6}$

TAB. 1.1 – Quelques types d'interactions moléculaires et les expressions des potentiels correspondants (extrait de [39]), où q est la charge électrique (C), u le moment dipolaire (C m), α la polarisabilité électrique ($\text{C}^2 \text{m}^2 \text{J}^{-1}$), k la constante de Boltzmann ($1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$), h la constante de Planck ($6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$), ν la fréquence d'ionisation électronique (s^{-1}) et ϵ_0 la permittivité du vide ($8.854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{J}^{-1} \text{m}^{-1}$).

très important, et sont regroupées sous le nom de *forces de van der Waals*. À elles seules, elles permettent en effet de retrouver la loi d'état des fluides dans certaines conditions idéales, d'expliquer le changement de phase et la tension de surface. On trouve une introduction à ces concepts dans [71], et Jamet [40] montre comment les utiliser pour construire un modèle continu pour les écoulements diphasiques (la théorie du second gradient). Ce modèle a l'avantage de produire naturellement certaines propriétés thermodynamiques des interfaces (tension de surface, température de saturation, chaleur latente, etc.), alors qu'une approche discontinue telle que la nôtre exige d'ajouter ces grandeurs dans des relations de fermeture ou des conditions de saut aux interfaces.

Limites de la théorie

Les formules données dans le tableau 1.1 —du moins celles où interviennent des dipôles— sont valables pour de faibles distances. Lorsque le temps de propagation de l'interaction électromagnétique est très inférieur à la période de rotation des dipôles, la force qui s'exerce entre les dipôles à un instant donné est la même que si le dipôle était fixe. La force moyenne est donc la moyenne sur toutes les orientations possibles. Aux grandes distances, le temps de propagation de l'interaction électromagnétique n'est plus négligeable, et la force moyenne diminue très rapidement. Le potentiel d'interaction est alors appelé *potentiel retardé*, et sa décroissance est très rapide. Dans un milieu dilué et pour les forces de London par exemple, la portée des potentiels non retardés est de l'ordre de 50 nm.

Cette théorie ne s'applique pas bien non plus dans la matière condensée, où les énergies d'interaction s'écartent notablement des expressions présentées plus haut. En particulier, les potentiels d'interactions ne sont plus additifs et l'interaction entre deux molécules est perturbée par la présence des molécules voisines.

D'autre part, le potentiel d'interaction n'est pas toujours isotrope comme décrit dans les modèles présentés ici.

Au vu de ces restrictions, on doit admettre que les modèles d'interactions moléculaires sont intéressants en théorie et permettent de construire une description cohérente des interactions fluides–parois, mais qu'ils ne permettront pas d'obtenir des prédictions très précises.

Des théories bien plus élaborées permettent de décrire avec précision le comportement de la matière condensée. Citons par exemple la théorie de Lifshitz ou encore la «théorie DLVO» pour Derjaguin Landau Verwey Overbeek, pour lesquelles on trouve quelques entrées dans [39]. Ces théories sont cependant largement plus compliquées à mettre en œuvre. Le modèle de ligne de contact que nous développons se contentera de la forme générale du potentiel total d'interaction avec les parois. Comme ces théories ont globalement le même comportement que les modèles simples exposés plus haut, leur subtilité ne conduiraient pas à des résultats qualitativement différents. Tout juste obtiendrait-on des différences quantitatives qui semblent *a priori* hors de portée d'une vérification expérimentale. D'autres paramètres –comme les rugosités de parois– ont en effet une influence bien plus sensible sur le comportement des lignes de contact. C'est pourquoi nous utiliserons dans cette introduction une modélisation assez fruste des forces intermoléculaires, dans le but d'illustrer de façon simple leur effet sur les lignes de contact.

Pression de disjonction et constante de Hamaker

Dans certaines conditions, un liquide peut avoir une forte affinité pour certains matériaux. Dans ce cas, on observe la formation d'un film de liquide de très faible épaisseur qui s'étend sur toute la surface des parois. Ce film subsiste lorsque la paroi est chauffée à une température T supérieure à la température de saturation $T_{sat}(P_v)$ correspondant à la pression de la vapeur. L'épaisseur du film de liquide se stabilise à une valeur qui dépend de la température de la paroi. Le même film de liquide remonte le long des parois verticales, son épaisseur diminuant avec la hauteur. Ces deux phénomènes peuvent être expliqués très simplement en introduisant une pression caractéristique du film de liquide, appelée *pression de disjonction*, que nous noterons $P_d(\delta)$ et qui dépend de l'épaisseur δ du film. La température d'équilibre thermodynamique du film de liquide est liée à la pression de vapeur par une relation du type :

$$T_{eq}(\delta) = T_{sat}(P_v, P_d) \quad (1.21)$$

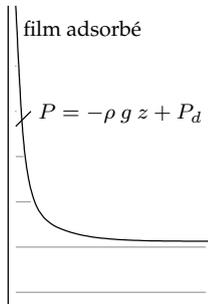
On explique de même la montée du liquide le long de la paroi en écrivant que la pression qui règne dans le film est égale à la pression hydrostatique $P_h(z)$, à laquelle on ajoute la pression de disjonction. Le long de la paroi, là où la courbure de l'interface liquide-vapeur est faible, la pression de la vapeur est égale à la somme de ces deux pressions :

$$P_v = P_h(z) + P_d(\delta) = -\rho g (z - z_0) + P_d(\delta) \quad (1.22)$$

On obtient ainsi une épaisseur de film fonction de la hauteur z . Expérimentalement, la mesure de cette épaisseur est accessible, et conduit à une pression de disjonction de la forme

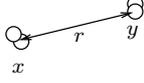
$$P_d(\delta) = \frac{A}{\delta^3} \quad (1.23)$$

où A est la *constante de Hamaker*. L'hélium liquide est ainsi connu pour s'échapper des vases qui le contiennent. À un centimètre de hauteur, le film a une épaisseur de 21.5 nm, et de 2.8 nm à 1 m [72].



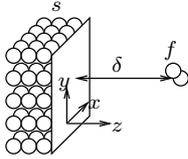
Constante de Hamaker et forces de van der Waals

Les phénomènes décrits ci-dessus trouvent leur origine dans les forces de van der Waals. Elles permettent de retrouver la forme de la pression de disjonction. On écrit pour cela l'expression générale du potentiel w des forces de van der Waals entre deux molécules x et y , en fonction de leur distance r :



$$w_{xy}(r) = -\frac{a_{xy}}{r^6} \quad (1.24)$$

Calculons le potentiel d'interaction d'une molécule de fluide avec toutes les molécules de la paroi. On suppose ici que les potentiels sont additifs (ce qui n'est pas le cas en réalité, cette hypothèse conduit à des erreurs pouvant aller jusqu'à un facteur deux sur l'évaluation des forces [39]). En intégrant le potentiel w_{fs} sur le demi-espace occupé par la paroi, on obtient un potentiel W_{fs} entre une molécule de fluide et la paroi solide de la forme suivante, avec δ la distance à la paroi, ρ_s la masse volumique du solide, \mathcal{N} le nombre d'Avogadro, M_s la masse molaire ($\rho_s \mathcal{N}/M_s$ est le nombre de molécules par unité de volume) :



$$W_{fs}(\delta) = -\int_{-\infty}^{-\delta} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{a_{fs} \rho_s \mathcal{N}/M_s}{(x^2 + y^2 + z^2)^3} dx dy dz = -\frac{3\pi}{2} \frac{a_{fs} \rho_s \mathcal{N}/M_s}{\delta^3} \quad (1.25)$$

Si une molécule se déplace d'une position éloignée de la paroi vers celle-ci, la variation de potentiel due à la proximité de la paroi est égale à $W_{fs} - W_{fl}$ où W_{fl} est le potentiel d'interaction entre une molécule de fluide et un demi-espace de liquide. Ce potentiel d'adhésion, calculé pour une molécule de fluide, se traduit pour un milieu continu par une contribution g_{adh} à l'enthalpie libre massique du fluide (M_f est la masse molaire du fluide)

$$g_{adh}(\delta) = -\frac{\tilde{a}_{fs} - \tilde{a}_{ff}}{\delta^3}, \quad \tilde{a}_{xy} = a_{xy} \frac{3\pi \rho_y \mathcal{N}}{2 M_y} \quad \text{pour } y = f, s \quad (1.26)$$

On en déduit que le fluide subit une force volumique dirigée dans la direction normale à la paroi, appelée force d'adhésion, et dont l'intensité décroît comme δ^{-4} à mesure que l'on s'éloigne. Une forte affinité du liquide pour la paroi se traduit par la relation suivante : $\tilde{a}_{fp} \gg \tilde{a}_{ff}$. Dans le liquide, la force volumique s'écrit

$$\mathbf{F}(\delta) = -\rho_l \nabla g_{adh}(\delta) = -\frac{\rho_l (\tilde{a}_{fs} - \tilde{a}_{fl})}{\delta^4} \mathbf{n} \quad (1.27)$$

À cette force correspond un champ de pression statique qui vient l'équilibrer, de la même façon que la pression hydrostatique équilibre la force de gravité. Si l'on suppose ensuite la masse volumique constante dans le liquide, on retrouve facilement le profil de pression correspondant par intégration :

$$P_a(\delta) = \frac{\rho_l (\tilde{a}_{fs} - \tilde{a}_{fl})}{\delta^3} \quad (1.28)$$

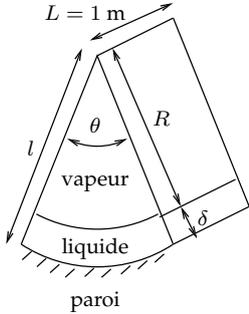
Le lien entre la constante de Hamaker A et le paramètre \tilde{a} est maintenant évident. On a :

$$A = \rho_l (\tilde{a}_{fs} - \tilde{a}_{fl}) \quad (1.29)$$

1.2.2 Interprétation thermodynamique

La démonstration qui suit repose sur des concepts de thermodynamique pour montrer l'effet des forces intermoléculaires sur l'état d'équilibre d'une interface liquide-vapeur. Le même raisonnement est généralement utilisé pour obtenir l'état d'équilibre de l'interface en présence d'une courbure d'interface (à savoir les pressions de part et d'autre de l'interface en fonction de la température à

l'équilibre). Nous allons donc introduire dès maintenant la tension de surface σ et la courbure c de l'interface. Dans cet exercice, nous cherchons l'état d'équilibre thermodynamique d'un volume de fluide comprenant un film de liquide courbé à proximité d'une paroi solide.



Le problème étudié est représenté sur la figure ci-contre. On considère un volume axisymétrique de longueur unité contenant une masse fixée de fluide sous forme liquide et vapeur à une température T imposée. On suppose que l'interface liquide-vapeur est elle aussi axisymétrique et qu'elle divise le volume en deux domaines. Le volume est plongé dans un champ de force volumique qui dérive du potentiel suivant :

$$g_{adh} \hat{=} - \frac{\tilde{a}}{(r-l)^3} \quad (1.30)$$

On utilise la propriété suivante : l'état d'équilibre d'un système isotherme dont la masse et le volume sont constants est celui qui minimise l'énergie libre \mathcal{F} du système. L'énergie libre du fluide s'écrit comme la somme des énergies libres volumiques des phases et de l'énergie libre surfacique de l'interface. La première s'écrit

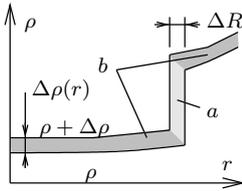
$$F(\rho, T, r) = F^{cl}(\rho, T) + \rho g_{adh}(r) \quad (1.31)$$

L'énergie libre du fluide est l'intégrale de F augmentée de la contribution de la tension de surface :

$$\mathcal{F} = \int_{\Omega} F(\rho, T, r) dV + R \theta \sigma \quad (1.32)$$

On cherche le profil de masse volumique $\rho(r)$ à l'équilibre thermodynamique. Ce profil minimise l'énergie libre du système sous les contraintes de masse, volume et température fixés. La contrainte sur la masse s'écrit :

$$\int_{\Omega} \rho dV = \int_0^l \rho(r) r \theta dr = M \quad (1.33)$$



La fonction $\rho(r)$ est continue par morceaux, avec une discontinuité en $r = R$, lieu de l'interface liquide-vapeur. Considérons une petite variation $\delta\rho(r)$ de la masse volumique autour d'un profil initial $\rho(r)$ avec une discontinuité en $r = R$. On note $[\rho] = \rho(R^+) - \rho(R^-)$ le saut de ρ à l'interface. La conservation de la masse totale se traduit par une relation entre $\Delta\rho$ et la position R de l'interface (voir figure).

$$\underbrace{-\Delta R [\rho] R \theta}_a + \underbrace{\int_l^L \Delta\rho(r) r \theta dr}_b = 0 \quad (1.34)$$

La petite variation de \mathcal{F} correspondante s'écrit :

$$\delta\mathcal{F} = \underbrace{-\delta R [F(\rho)] R \theta + \int_l^L \delta\rho(r) \frac{\partial F}{\partial \rho} r \theta dr}_{\text{énergie libre des phases}} + \underbrace{\delta R \theta \sigma}_{\text{énergie libre d'interface}} \quad (1.35)$$

$$= \left(-\frac{[F(\rho)]}{[\rho]} + \frac{\sigma}{[\rho] R} \right) \int_l^L \delta\rho r \theta dr + \int_l^L \delta\rho(r) \frac{\partial F}{\partial \rho} r \theta dr \quad (1.36)$$

$$= \int_l^L \delta\rho(r) r \theta \left(\frac{\partial F}{\partial \rho} - \frac{[F(\rho)]}{[\rho]} + \frac{\sigma}{[\rho] R} \right) dr \quad (1.37)$$

Si le profil $\rho(r)$ minimise \mathcal{F} localement, alors la petite variation $\delta\mathcal{F}$ doit être nulle quelle que soit la variation $\delta\rho$ considérée. On obtient donc la condition nécessaire suivante :

$$\frac{\partial F}{\partial \rho} - \frac{[F(\rho)]}{[\rho]} + \frac{\sigma}{[\rho] R} = 0 \quad (1.38)$$

Comme le potentiel des forces d'adhésion est continu en R , on a :

$$[F(\rho)] = [F^{cl} + \rho g_{adh}(R)] = [F^{cl}] + [\rho] g_{adh}(R) \quad (1.39)$$

Par conséquent, le profil de ρ vérifie :

$$\frac{\partial F^{cl}}{\partial \rho}(\rho(r)) + g_{adh}(r) = \frac{[F^{cl}(\rho)]}{[\rho]} + g_{adh}(R) - \frac{\sigma}{[\rho] R} \quad (1.40)$$

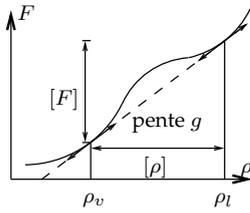
Pour la suite, on rappelle que

$$\frac{\partial F^{cl}}{\partial \rho} = g^{cl} \quad (1.41)$$

Cas particulier de l'interface plane loin de la paroi

Dans le cas particulier où $R \rightarrow \infty$ et $g_{adh} = 0$, on retrouve la condition de bitangente sur F pour une interface plane. En effet, l'équation se simplifie en :

$$g^{cl}(\rho(r)) = \frac{[F^{cl}(\rho)]}{[\rho]} \quad (1.42)$$



Ceci signifie que le potentiel chimique est constant et égal dans les deux phases, et que la dérivée de F en ρ_l et ρ_v est égale à la pente de la droite reliant les deux points dans le plan (ρ, F) (voir illustration ci-contre).

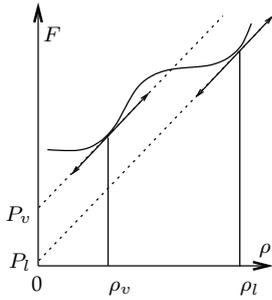
Cas particulier d'une interface courbe loin d'une paroi

En posant $g_{adh} = 0$, on obtient la condition suivante :

$$g^{cl}(\rho(r)) = \frac{[F^{cl}(\rho)]}{[\rho]} - \frac{\sigma}{[\rho] R} \quad (1.43)$$

Encore une fois, les potentiels chimiques sont constants et égaux dans les phases. On peut réécrire cette équation en faisant apparaître la pression :

$$[F^{cl} - \rho g^{cl}] = -[P] = \frac{\sigma}{R} \quad (1.44)$$



On retrouve ainsi le saut de pression à l'interface. La figure ci-contre illustre graphiquement cette relation. Le rayon de courbure R et la tension de surface imposent le saut de pression $P_v - P_l$. La relation $-P = F - \rho g$ s'interprète ainsi : si l'on trace la tangente à la courbe F en un point, son intersection avec l'axe des ordonnées représente la pression. Or, il existe un unique couple de points ρ_l et ρ_v tel que les tangentes en ces points sont parallèles et l'écart vertical égal à σ/R . Ces points caractérisent l'équilibre du système (voir la thèse de Jamet [40] pour plus de détails sur cette approche thermodynamique).

Au premier ordre, les pressions à l'équilibre dans le liquide et la vapeur sont données par [19] :

$$P_l(T, R) = P_{sat}(T) - \frac{\sigma}{R} \frac{\rho_l}{\rho_l - \rho_v} \quad (1.45)$$

$$P_v(T, R) = P_{sat}(T) - \frac{\sigma}{R} \frac{\rho_v}{\rho_l - \rho_v} \quad (1.46)$$

Le signe dépend de la convention utilisée pour les rayons de courbure positifs (ici, $R > 0$ pour les bulles de vapeur).

Interprétation du cas général

Le profil de masse volumique est donné par :

$$g^{cl} + g_{adh}(r) = \frac{[F^{cl}(\rho)]}{[\rho]} + g_{adh}(R) - \frac{\sigma}{[\rho]R} \quad (1.47)$$

Ainsi, les masses volumiques de part et d'autre de l'interface sont données par la même condition que pour une interface courbe (on se place en $r = R$). Le potentiel d'adhésion, continu entre les phases, est soustrait de l'équation :

$$g^{cl}(\rho_l(R)) = g^{cl}(\rho_v(R)) = \frac{[F^{cl}(\rho)]}{[\rho]} - \frac{\sigma}{[\rho]R} \quad (1.48)$$

En revanche, lorsqu'on s'éloigne de l'interface, l'égalité du potentiel chimique total $g = g^{cl} + g_{adh}$ entraîne une variation de la masse volumique.

$$g^{cl}(r) + g_{adh} = cte \quad (1.49)$$

Application à un film mince

Le potentiel de la force d'adhésion est négligeable partout, sauf dans un voisinage de la paroi. L'équation d'équilibre du potentiel chimique reste valable, et on appelle g^∞ la limite de g^{cl} quand on s'éloigne de la paroi. On a :

$$g^{cl} + g_{adh} = cte = g^\infty \quad (1.50)$$

On suppose maintenant que le potentiel des forces d'attraction s'exprime comme suit, avec r la distance à la paroi :

$$g_{adh} = -\frac{\alpha}{r^3} \quad (1.51)$$

A l'équilibre (température uniforme et absence de changement de phase), on a :

$$g^{cl}(r) = g^\infty + \frac{\alpha}{r^3} \quad (1.52)$$

La pression à l'infini P^∞ , la température T , la courbure c et l'épaisseur de film δ sont liées par une relation implicite. On peut facilement expliciter la relation sous la forme d'une fonction :

$$P_{sat}^\infty = f(T, c, \delta) \quad (1.53)$$

En effet, T et c étant fixés, le potentiel chimique d'équilibre à l'interface est imposé. Au premier ordre, on a :

$$g_{sat}(T, R) = g_{sat}(T) + \frac{\sigma}{R} \frac{1}{\rho_l - \rho_v} \quad (1.54)$$

Le potentiel chimique à l'infini est ensuite donné (au premier ordre) par :

$$g_{sat}^\infty(T, R) = g_{sat}(T) + \frac{\sigma}{R} \frac{1}{\rho_l - \rho_v} - \frac{\alpha}{\delta^3} \quad (1.55)$$

D'où l'expression de la pression à l'infini :

$$P_{sat}^\infty(T, R, \delta) = P_{sat}(T) + \frac{\sigma}{R} \frac{\rho_v}{\rho_l - \rho_v} - \frac{\rho_v \alpha}{\delta^3} \quad (1.56)$$

Température d'équilibre du film

Si l'on se souvient que $A = \rho_l \alpha$, la pression d'équilibre du système dans la vapeur loin de la paroi s'écrit :

$$P_{sat,v}^\infty(T, R, \delta) = P_{sat}(T) - \frac{\sigma}{R} \frac{\rho_v}{\rho_l - \rho_v} - \frac{\rho_v}{\rho_l} P_d, \text{ avec } P_d = \frac{A}{\delta^3} \quad (1.57)$$

L'expression de la température de saturation généralement utilisée est obtenue dans le cas des basses pressions, avec l'hypothèse que $\rho_l - \rho_v \simeq \rho_l$. On a alors :

$$P_{sat,v}^\infty(T, R, \delta) = P_{sat}(T) - \left(\frac{\sigma}{R} + \frac{A}{\delta^3} \right) \frac{\rho_v}{\rho_l} \quad (1.58)$$

En utilisant la relation de Clausius-Clapeyron

$$\left. \frac{dP}{dT} \right|_{sat} = \frac{\mathcal{L} \rho_l \rho_v}{T (\rho_l - \rho_v)} \simeq \frac{\mathcal{L} \rho_v}{T} \quad (1.59)$$

on obtient la température d'équilibre en fonction de la pression $P_{sat,v}^\infty$ loin de l'interface, du rayon de courbure R de l'interface (ici par convention, rayon positif pour une bulle de vapeur) et de l'épaisseur δ du film de liquide :

$$\boxed{T_{sat}(P_v^\infty, R, \delta) = T_{sat}(P_v^\infty) \left(1 + \frac{\sigma/R + A/\delta^3}{\mathcal{L} \rho_l} \right)} \quad (1.60)$$

1.3 Le modèle de fluide

Dans cette partie, nous définissons le modèle de fluide que nous utiliserons dans la suite de ce mémoire.

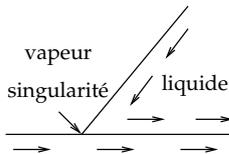
1.3.1 Choix d'un modèle de fluide

Les équations de Navier-Stokes sont un pilier de la modélisation des écoulements de fluides. Or, ces équations ne sont elles aussi qu'un modèle destiné à rendre compte de la réalité. Rappelons rapidement les hypothèses et le domaine d'application de ces équations avant de les poser.

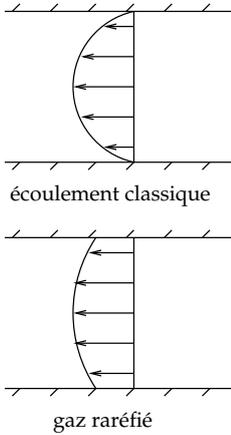
Discussion sur la mécanique des milieux continus

Les équations de Navier-Stokes reposent sur l'hypothèse des milieux continus. Or, on trouve près des parois des phénomènes singuliers où apparaissent de forts gradients des grandeurs continues (notamment de la température et de la vitesse par exemple près des lignes de contact). Les grandeurs continues n'ont évidemment pas de sens à des échelles inférieures à quelques diamètres moléculaires.

Le déplacement d'une ligne de contact constitue un des problèmes fondamentaux de cette étude. Il entraîne une singularité non intégrable des contraintes visqueuses. De toute évidence, les équations de Navier-Stokes ne sont pas applicables dans ce cas. Une solution classique à ce problème consiste à introduire une échelle de coupure –de l'ordre de quelques diamètres moléculaires– en dessous de laquelle les grandeurs continues n'augmentent plus. C'est la démarche suivie dans les modèles de Dussan de ligne de contact dynamique (voir par exemple [23]). Tout le problème consiste ensuite à déterminer la valeur pratique de cette échelle de coupure. Comme le phénomène dépend énormément



de la contribution des petites échelles, le résultat macroscopique du modèle est très sensible à ce paramètre. Dans ce cas précis, il se trouve qu'une échelle de quelques diamètres moléculaires donne des résultats en bon accord avec l'expérience (voir 2.1.2).



Si une échelle de quelques diamètres moléculaires convient bien pour une phase condensée comme un liquide, elle n'est pas du tout adaptée pour les gaz. Dans ce cas, c'est plutôt le libre parcours moyen L qui détermine l'échelle à laquelle on peut définir une grandeur continue. Pour un problème donné de dimension caractéristique l , le nombre de Knudsen $\text{Kn} = L/l$ indique si l'écoulement se comporte comme un milieu continu régi par les équations de Navier-Stokes, ou plutôt comme un ensemble de particules individuelles. Par exemple, un écoulement de gaz dans un capillaire de diamètre l est bien représenté par la mécanique des milieux continus si $\text{Kn} < 0.01$. Dans le cas contraire, tout se passe comme si la condition d'adhérence du fluide à la paroi n'était plus respectée : la vitesse tangentielle moyenne des particules ne tend pas vers zéro quand on s'approche de la paroi (voir ci-contre). On parle alors d'écoulement de gaz raréfié.

Prenons par exemple le cas de la vapeur d'eau à 1 bar. On peut estimer le libre parcours moyen $L = 1/(\sqrt{2}n s_e)$ à $0.1 \mu\text{m}$ (n est le nombre moyen de molécules par unité de volume et s_e la section efficace de choc). Si l'on utilise le critère cité plus haut de $\text{Kn} < 0.01$, cela signifie que les équations de Navier-Stokes ne sont pas adaptées aux échelles inférieures à $10 \mu\text{m}$. Il se trouve que c'est généralement en dessous de cette échelle qu'est déterminé le comportement des lignes de contact et les transferts de masse singuliers. La température de saturation locale par exemple dépend de la pression de la vapeur à l'interface. Il n'est donc pas évident que les raisonnements valables en milieu homogène le sont encore près des lignes de contact.

En général, la modification d'une relation de fermeture des équations de Navier-Stokes permet de modéliser fidèlement le comportement macroscopique d'un système à partir des grandeurs continues classiques. La résistance d'interface est le parfait exemple d'un apport à un modèle continu permettant de rendre compte d'effets liés à la nature moléculaire des fluides (ce n'est pas un hasard que l'épaisseur caractéristique de la résistance d'interface δ_R soit du même ordre de grandeur que le libre parcours moyen). L'accord du modèle avec l'expérience ne garantit cependant pas que le modèle est fondé sur une représentation fidèle des mécanismes à petite échelle.

Les modèles comme ceux initiés par Wayner par exemple (voir 2.3) et entièrement fondés sur la mécanique des milieux continus ont aussi montré un certain succès. On y calcule des pressions et des flux de chaleur dans des films d'une dizaine de nanomètres d'épaisseur et les grandeurs macroscopiques obtenues sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Ceci montre encore une fois la pertinence des équations des milieux continus aux petites échelles.

A contrario, si l'on voulait faire preuve d'un certain pessimisme, on pourrait considérer que le bon accord entre théorie et expérience n'est dû qu'à ces deux ingrédients :

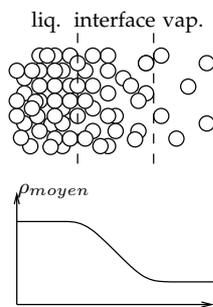
- la formule analytique issue du modèle a le bon comportement au premier ordre (comportement en x , en x^2 , en $\ln x$, etc.), ce qui est probable si le phénomène considéré est une extrapolation à petite échelle d'un phénomène macroscopique,
- cette formule possède un nombre suffisant de paramètres ajustables pour rendre compte des expériences (à l'ordre 1, un seul peut suffire).

Le modèle de ligne de contact de Dussan 2.1.1 peut être interprété de cette façon. Le comportement au premier ordre est correct car déterminé essentiellement par des phénomènes à des échelles intermédiaires, et il possède des paramètres ajustables (angle de contact microscopique et longueur de glissement) qui per-

mettent de rendre compte de la plupart des expériences. De même, le modèle de micro-région de Wayner est paramétré par la constante de Hamaker. La résistance d'interface enfin, aurait pu être un modèle fermé sans aucun paramètre, mais les expériences ont montré la nécessité d'en introduire un sous la forme d'un coefficient d'évaporation. À ce stade, on peut remarquer que dans chaque cas, le paramètre du modèle peut être mis sous la forme d'une longueur caractéristique de coupure en dessous de laquelle un phénomène physique singulier devient négligeable (dissipation visqueuse pour le modèle de Dussan, flux de chaleur pour la résistance d'interface, les deux pour les forces intermoléculaires).

Dans cette étude, nous utiliserons les mêmes ingrédients de mécanique de milieux continus et serons donc exposés aux mêmes risques. C'est une des raisons pour lesquelles nous ne chercherons pas à obtenir des grandes précisions sur les expressions analytiques ou les résultats numériques mais nous privilégierons plutôt la prise en compte du plus grand nombre de phénomènes physiques connus.

Modélisation des interfaces



À l'échelle moléculaire, une interface liquide-vapeur est une zone de transition où la densité moyenne de particules passe progressivement d'une valeur moyenne dans le liquide à une valeur moyenne dans la vapeur. L'épaisseur de cette zone de transition est variable en fonction de la température. Loin du point critique du fluide, elle est de l'ordre de un à quelques diamètres moléculaires. Près du point critique, elle augmente considérablement jusqu'à atteindre des dimensions macroscopiques. Il est possible de décrire le milieu diphasique par un système d'équations où la masse volumique est une grandeur continue (et même plusieurs fois dérivable). La méthode du second gradient utilise une telle description. L'étude de Jamet [40] montre que cette approche est parfaitement légitime, même loin du point critique. Elle présente l'avantage de décrire de nombreux aspects physiques (tension de surface, température de saturation, chaleur latente, ...) avec un nombre très réduit de paramètres (il suffit pratiquement d'une seule fonction thermodynamique de la masse volumique et de la température). Elle est cependant fondée sur la mécanique des milieux continus et demande quelques ajustements si on cherche à l'appliquer loin du point critique. En particulier, les relations de fermeture thermodynamiques doivent être reconstruites afin de retrouver l'ensemble des propriétés macroscopiques usuelles des interfaces (relation entre la température de saturation et la pression, tension de surface, chaleur latente de vaporisation, voir [40]).

La description plus classique des interfaces comme une surface de discontinuité des grandeurs physiques permet d'écrire directement les relations de fermeture thermodynamiques sous leur forme classique (tension de surface, relation de Laplace, chaleur latente, *etc.*). Cependant, contrairement à la méthode du second gradient, elle ferme la porte à des phénomènes physiques nouveaux qui ne seraient pas explicitement pris en compte dans les relations de fermeture. Par exemple, la résistance d'interface est un ingrédient supplémentaire à ajouter aux relations de fermeture dans une approche discontinue. Avec le modèle de fluide du second gradient, on peut montrer qu'une résistance d'interface est naturellement présente dans le modèle. Il en est de même pour la tension de surface : dans le modèle du second gradient, elle varie naturellement avec la courbure de l'interface alors qu'une relation de fermeture explicite doit être introduite pour tenir compte de ce phénomène dans le modèle discontinu. L'inconvénient de prendre en compte implicitement la tension de surface ou la résistance d'interface est que l'on ne contrôle qu'indirectement leur valeur. Ainsi, il n'est pas facile d'imposer une valeur que l'on aurait mesurée expérimentalement. De plus, nous ferons souvent appel à des modèles très simplifiés dans lesquels on n'exploite pas les atouts

du second gradient. C'est pourquoi nous resterons dans le cadre classique des «sharp interfaces». Nous décrirons les interfaces comme des surfaces de discontinuité des grandeurs physiques avec des relations de saut où interviendront les fermetures thermodynamiques.

Les équations de Navier-Stokes «complètes»

Le système d'équations de Navier-Stokes complet s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1.61)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\rho \mathbf{v}) + \nabla P - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^D = \mathbf{F} \quad (1.62)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\rho u) - \nabla \cdot (k \nabla T) - \boldsymbol{\tau}^D : \nabla \mathbf{v} + P \nabla \cdot \mathbf{v} = E \quad (1.63)$$

La première équation exprime la conservation de la masse, la deuxième le bilan de quantité de mouvement, et la troisième le bilan d'énergie interne.

Le second membre \mathbf{F} de l'équation de conservation de la quantité de mouvement 1.62 comporte la gravité $\rho \mathbf{g}$, les forces intermoléculaires à longues portées $\nabla(A/\delta^3)$ et éventuellement un terme d'accélération $\rho \mathbf{a}$ si les équations sont résolues en référentiel accéléré. Quant au second membre E , il s'agit d'une source volumique de puissance (une telle source peut provenir d'un rayonnement ou de réactions chimiques ou nucléaires par exemple, ce qui ne sera pas le cas dans notre étude).

Discussion sur l'hypothèse d'incompressibilité

La compressibilité du fluide peut être discutée dans deux contextes différents :

- dans le cadre de la modélisation des lignes de contact,
- dans le cadre de la simulation d'un problème instationnaire complet.

Dans le premier cas, on s'intéresse à une région proche de la ligne de contact et à un problème stationnaire. Dans ce cas, les variations de pression au niveau des interfaces sont très réduites en comparaison de la pression moyenne. Il n'y a pas d'ondes de pression puisque le problème est stationnaire, et les seules variations de pression dans la vapeur pourraient provenir de l'inertie ou de la viscosité et les niveaux de pression engendrés sont très faibles en comparaison de la pression absolue. La masse volumique du liquide et de la vapeur sont donc constantes avec une très bonne approximation. Dans le deuxième cas, la simplification est moins immédiate.

La première conséquence de la compressibilité du fluide est la présence d'ondes de pression (les ondes acoustiques). Le temps caractéristique de propagation de ces ondes dans la vapeur pour une bulle de quelques millimètres est de 1 à 10 μs à la pression atmosphérique, cette durée est largement plus faible que le temps de croissance de bulles de vapeur (de l'ordre de la milliseconde). On peut donc supposer que la pression dans les bulles de vapeur est uniforme. Cependant, si la pression de la vapeur est pratiquement uniforme dans une inclusion à un instant donné, les forces de tension de surface et l'inertie du liquide peuvent produire de grandes variations de pression au cours du temps.

Dans le cadre d'une simulation numérique, le modèle de fluide compressible est coûteux ou compliqué à mettre en œuvre à bas Mach, car on décrit les ondes de pression dont la constante de temps est très inférieure à celle des phénomènes qui nous intéressent. Un tel modèle est à la base de la méthode du Second Gradient

par exemple, et un enjeu pour les méthodes de ce type consiste à trouver une façon de ne pas prendre en compte les ondes de pression (soit par l'utilisation d'une méthode implicite [52], soit en modifiant le modèle de fluide). N'ayant pas une telle méthode à notre disposition, nous choisissons de nous limiter à un modèle de fluide incompressible, ce qui restreint quelque peu le champ d'investigation accessible à nos simulations. En particulier, il sera difficile de simuler la phase initiale de croissance des bulles de vapeur. Dans cette phase en effet, la pression capillaire ou l'inertie du liquide entraîne une forte variation de la pression et de la masse volumique. On peut observer des oscillations du volume des bulles résultant d'un couplage entre la compressibilité du gaz et l'inertie du liquide, et ces oscillations ne seront pas prises en compte dans un modèle incompressible. Pour la même raison, la simulation de l'effondrement d'une bulle n'est pas réaliste si on ne tient pas compte de la compressibilité de la vapeur.

L'incompressibilité stricte du fluide conduit à écrire :

$$\rho = \text{constante} \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad \text{et} \quad \nabla \cdot (\mathbf{v}) = 0 \quad (1.64)$$

Les fonctions thermodynamiques ne dépendent alors plus que de la température et de la phase dans laquelle on se trouve.

1.3.2 Les équations du modèle et les relations de fermeture

Équations de bilan dans les phases

Le modèle utilisé dans la suite de ce mémoire est donc incompressible. On fait de plus l'hypothèse que la dissipation visqueuse a une contribution négligeable dans le bilan d'énergie (on néglige le terme $\tau^D : \nabla \mathbf{v}$). Les équations de bilan s'écrivent alors :

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1.65)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\rho \mathbf{v}) + \nabla P - \nabla \cdot \tau^D = \mathbf{F} \quad (1.66)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_P T) + \mathbf{v} \cdot \nabla (\rho c_P T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (1.67)$$

Dans les parois, l'équation de la chaleur est la suivante

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_P T) + \mathbf{v}_s \cdot \nabla (\rho c_P T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (1.68)$$

où \mathbf{v}_s est la vitesse de déplacement de la paroi dans le référentiel où on résout le problème. Par exemple, le modèle de ligne de contact du chapitre suivant sera résolu dans un référentiel attaché à la ligne de contact.

Relations de saut aux interfaces

À ce système s'ajoutent les conditions aux limites aux interfaces liquide-vapeur (voir [18, 38])

$$\rho_l (\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{n} = \rho_v (\mathbf{v}_v - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{n} = \dot{m} \quad (1.69)$$

$$P_l - P_v = -\sigma c + P_r \quad (1.70)$$

$$\mathbf{v}_l \times \mathbf{n} = \mathbf{v}_v \times \mathbf{n} \quad (1.71)$$

$$(\tau_v^D \cdot \mathbf{n}) \times \mathbf{n} - (\tau_l^D \cdot \mathbf{n}) \times \mathbf{n} = \nabla_s \sigma \times \mathbf{n} \quad (1.72)$$

$$T_l = T_v = T_{sat} + \dot{q} R_i \quad (1.73)$$

$$\dot{q}_l - \dot{q}_v = -k_l \nabla T_l \cdot \mathbf{n} + k_v \nabla T_v \cdot \mathbf{n} = \dot{m} \mathcal{L} \quad (1.74)$$

où P_r est la pression de recul :

$$P_r \hat{=} \dot{m}^2 \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) \quad (1.75)$$

L'équation 1.70 constitue la relation de Laplace qui impose le saut de pression de part et d'autre d'une interface en fonction de la courbure moyenne c . À ce saut de pression s'ajoute la pression de recul.

La courbure c est signée : positive pour une bulle de vapeur, négative pour une goutte de liquide.

Le terme $\nabla_s \sigma$ représente le gradient de tension de surface le long de l'interface. La tension de surface dépend en effet de nombreux paramètres, dont la température.

Relations de fermeture

Le système est complété par les relations de fermeture où interviennent les lois de comportement thermodynamique du liquide et de la vapeur :

$$\begin{aligned} u &\hat{=} u(\rho, T) & k &= k(\rho, T) \\ P &\hat{=} P(\rho, T) & \mu &= \mu(\rho, T) \\ \boldsymbol{\tau}^D &\hat{=} \lambda \text{Tr}(\mathbf{d}) + 2 \mu \mathbf{d} & \mathbf{d} &\hat{=} \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + {}^t \nabla \mathbf{v}) \\ \sigma &\hat{=} \sigma(T, \dots) & T_{sat} &= T_{sat}(P) \\ \mathcal{L} &\hat{=} \mathcal{L}(T) \end{aligned}$$

T_{sat} est la température de saturation du fluide pour la pression suivante :

$$\begin{aligned} T_{sat} &\hat{=} T_{sat}(P), \quad P \hat{=} P_v + \frac{\rho_v}{\rho_l - \rho_v} \sigma c + \frac{1}{2} P_r \\ &\hat{=} P_l + \frac{\rho_l}{\rho_l - \rho_v} \sigma c - \frac{1}{2} P_r \quad (\text{définition équivalente}) \end{aligned} \quad (1.76)$$

Une partie de cette relation a été démontrée en 1.2.2, on peut aussi consulter [12]. Le terme où intervient la pression de recul est nécessaire pour obtenir une expression cohérente en fonction du saut de pression, mais n'a à notre connaissance pas été validé.

La signification physique de ce terme est même douteuse : la température de saturation est une propriété d'un système à l'équilibre thermodynamique, et la pression de recul un terme qui n'apparaît qu'au deuxième ordre par rapport au déséquilibre thermodynamique (si on mesure le déséquilibre à l'intensité \dot{m} du transfert de masse entre les phases). Nous avons fait face à un problème conceptuel similaire lors de la définition de la résistance d'interface, dont l'effet est d'ordre 1 par rapport au transfert de masse. Au vu des difficultés pour obtenir une validation de la résistance d'interface, il est peu probable que l'on obtienne une validation du terme en P_r dans la température de saturation.

Dans cette étude, on négligera la dépendance de la plupart des grandeurs physiques avec la température : la masse volumique, la viscosité, la conductivité, la capacité thermique et la chaleur latente de changement de phase. En effet, les différences de températures rencontrées dans un écoulement bouillant sont relativement faibles, comme le sont les variations de ces grandeurs (elles varient de quelques pour-cent tout au plus). Nous ferons par ailleurs des approximations bien plus graves pour obtenir des expressions analytiques dans les modèles.

Cette question est bien plus pertinente au sujet de la tension de surface. En effet, contrairement aux autres grandeurs, une légère dépendance de la tension de

surface par rapport à la température peut changer le comportement du système par l'effet Marangoni. Or, nous nous intéressons à des fluides purs en équilibre avec une vapeur saturée. Dans ce cas, la température de saturation ne dépend que de la pression, qui est pratiquement constante dans la vapeur à petite échelle. Les seules régions où la température du fluide aux interfaces n'est pas constante sont celles où la résistance d'interface domine le transfert de chaleur. Dans ce cas, le champ de vitesse dans le liquide est largement dominé par le remplacement du liquide qui s'évapore et l'effet Marangoni est négligeable (voir [78]).

Conclusion

Ce chapitre rassemble quelques ingrédients physiques fondamentaux pour l'étude des écoulements diphasiques à petite échelle. Nous avons rappelé les modèles les plus couramment acceptés concernant :

- les équations de la mécanique des milieux continus dans les phases,
- les relations de saut et les conditions aux limites aux interfaces liquide-vapeur,
- la résistance d'interface,
- les forces intermoléculaires.

Nous avons ensuite justifié l'utilisation d'un modèle incompressible et la simplification des relations de fermeture thermodynamiques pour cette étude.

Ce chapitre apporte un éclairage nouveau sur la résistance d'interface : la définition de la longueur caractéristique δ_R donne une interprétation immédiate de la résistance d'interface et permet de juger de son importance en fonction des échelles de longueur du problème. Notre revue des résultats expérimentaux montre que cette grandeur reste difficile d'accès et constituera un maillon faible du modèle.

Nous avons aussi proposé une démonstration et une interprétation de l'effet des forces intermoléculaires à longue portée. On se rend compte que la pression de disjonction ne représente pas réellement une pression dans le film mais qu'elle est un outil pratique pour faire certains raisonnements. Ainsi, la démonstration qui consiste à appliquer la relation de Clausius-Clapeyron à la pression de disjonction est un raccourci un peu rapide, mais qui conduit au bon résultat.

Chapitre 2

Modélisation des lignes de contact

Après avoir passé en revue les phénomènes physiques importants associés aux écoulements diphasiques avec changement de phase, nous sommes en mesure de proposer une modélisation des lignes de contact.

La littérature sur le sujet est abondante et variée. Toutefois, les travaux antérieurs peuvent être classés en deux groupes dont l'intersection est pratiquement vide : les travaux sur la dynamique de la ligne de contact, et les travaux sur le transfert de masse et de chaleur à la ligne de contact. En revanche, nous n'avons trouvé qu'un nombre très réduit de publications sur la modélisation des lignes de contact avec transfert de masse.

L'objet de ce chapitre est de faire une analyse critique des modèles existants et de bâtir un modèle couplé qui fasse le lien entre la dynamique et le transfert de masse et de chaleur. Nous proposerons des outils d'analyse et d'interprétation qui devraient permettre d'appréhender ces phénomènes de façon synthétique.

À l'issue de notre recherche bibliographique, le modèle le plus proche de nos besoins semble être celui d'Anderson et Davis [3]. Il est spécifiquement appliqué à l'étalement de gouttes de liquide volatile sur des surfaces chauffées. Notre modèle se veut adapté à des configurations plus variées et tente de faire la part des phénomènes physiques prépondérants. Nous aboutirons à un modèle très synthétique mais peut-être moins précis, qui semble plus adapté à un large éventail de configurations.

2.1 Angle de contact dynamique

De la dynamique et du transfert de masse, c'est apparemment la première qui a généré le plus grand nombre de travaux. L'intérêt pour les lignes de contact semble ici catalysé par les problèmes industriels d'enduction. Les fluides sont alors relativement visqueux et les surfaces lisses (il s'agit très rarement de métaux, parfois de polymères et le plus souvent de verre).

On trouve facilement des études assez théoriques sur la dynamique des lignes de contact et de l'angle de contact [24, 23, 36, 58, 37, 16, 69, 4]. Ces études sont fondées sur la mécanique des milieux continus classique et leurs deux ingrédients essentiels sont l'équation de Navier-Stokes et la relation de Laplace. On trouve par ailleurs d'autres approches des lignes de contact, où les aspects microscopiques sont plus franchement mis en avant [33, 32, 31, 64]. Les expériences sur le sujet font souvent appel à des surfaces parfaites (du verre le plus sou-

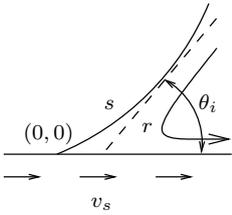
vent, parfois enduit pour en modifier la mouillabilité) et des fluides tout aussi idéaux (les huiles de silicone et les fluides non polaires semblent avoir la faveur des expérimentateurs [61, 28, 25, 74, 81, 75, 82], mais certains ont exploré des voies plus difficiles [62]). L'eau semble avoir fait l'objet d'un nombre très réduit de publications (on a trouvé [11], où la «dynamique» de la ligne de contact se mesure en mm par minute, ce qui n'est malheureusement pas très pertinent dans le cadre de notre étude). Dans [29], de Gennes dessine un panorama particulièrement complet des différents aspects du mouillage en incorporant un très grand nombre d'ingrédients physiques. Les études de l'hystérésis de l'angle de contact sont plus rares. Cox [15] a tenté une approche très théorique sans parvenir à une description réaliste de l'hystérésis. On a aussi trouvé aussi quelques études expérimentales [43, 77, 20] qui ne permettent cependant pas de tirer des conclusions générales.

Le point commun de ces modèles est le calcul du profil de l'interface liquide-vapeur à partir d'une solution simplifiée de l'écoulement de Stokes près de la ligne de contact. Cet écoulement donne lieu à une singularité non intégrable [36] que l'on résout en introduisant une échelle de coupure et un mécanisme physique à l'échelle moléculaire pour fermer le système d'équations. En fait, de nombreux modèles peuvent être interprétés comme des variantes du modèle de Dussan, où les phénomènes microscopiques se résument à un angle de contact microscopique et une longueur de glissement. Ce consensus nous conduit à choisir le modèle de Dussan [23] comme un élément de base de notre modèle.

2.1.1 Présentation du modèle de Dussan

Dans cette partie, on présente le modèle de Dussan, Ramé et Garoff [25] ainsi que quelques résultats importants sur un cas simplifié de ligne de contact dynamique sans changement de phase.

L'échec des équations classiques



Considérons le problème représenté sur la figure ci-contre, d'un ménisque de liquide en déplacement le long d'une paroi solide. On suppose que la viscosité de la vapeur est négligeable et la valeur du nombre de Reynolds inférieure à 1. Si la courbure adimensionnelle \tilde{c} est faible, le champ de vitesse et de pression est le même que pour une interface plane. On montre en annexe B.2.3 que la fonction de courant solution du problème de Stokes vérifie :

$$\psi(r, \theta) = r v_s \frac{(2\theta_i - \theta) \sin \theta - \theta \sin(2\theta_i - \theta)}{2\theta_i - \sin 2\theta_i} \quad (2.1)$$

Le gradient de pression à l'interface liquide-vapeur vérifie :

$$\partial_s P(s, \theta_i) = v_s \mu_l \frac{1}{r^2} \frac{4 \sin \theta_i}{2\theta_i - \sin 2\theta_i} \quad (2.2)$$

Or la courbure de l'interface est liée au saut de pression à l'interface par la relation de Laplace. Il suffit d'intégrer ce gradient de pression et la courbure pour obtenir le profil de l'interface. Le système d'équations monodimensionnel obtenu est le suivant

$$\partial_s y = \sin \theta_i \quad (2.3)$$

$$\partial_s \theta_i = c = \frac{1}{\sigma} (P_v - P_i) \quad (2.4)$$

$$\partial_s P_i = v_s \mu_l \frac{1}{r^2} \frac{4 \sin \theta_i}{2\theta_i - \sin 2\theta_i} \quad (2.5)$$

avec la définition suivante :

$$r \hat{=} \frac{y}{\sin \theta_i}. \quad (2.6)$$

On peut réécrire ce système en éliminant la pression P_i :

$$\begin{aligned} \partial_s y &= \sin \theta_i \\ \partial_{ss} \theta_i &= -\text{Ca} \frac{1}{r^2} \frac{4 \sin \theta_i}{2\theta_i - \sin 2\theta_i}, \quad \text{avec } \text{Ca} = \frac{v_s \mu_l}{\sigma} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Comme on suppose de plus que la courbure adimensionnelle \bar{c} est petite, l'abscisse s est peu différente du rayon r , et on se ramène à une seule équation :

$$\partial_{ss} \theta_i = -\text{Ca} \frac{1}{s^2} \frac{4 \sin \theta_i}{2\theta_i - \sin 2\theta_i} \quad (2.8)$$

Si l'on tente d'intégrer cette équation différentielle en partant d'une distance s en direction de l'origine, on remarque que l'angle de contact θ_i est singulier en $s = 0$. Quel que soit le nombre de capillarité et les conditions initiales d'intégration, l'angle de contact tend vers l'infini à l'origine.

Cette singularité est due au paradoxe bien connu suivant : le long de la paroi, la vitesse du fluide est nulle. Or, si la ligne de contact se déplace, cela signifie que ce même liquide a une vitesse non nulle à la ligne de contact. Le résultat est un gradient de vitesse qui tend vers l'infini à la ligne de contact et une énergie de dissipation visqueuse infinie.

Retour à la condition de Navier

La solution proposée par Dussan est de réintroduire un modèle physique oublié depuis fort longtemps : la condition de Navier. Afin de rendre son modèle le plus général possible, Navier avait prévu une condition aux limites de vitesse à la paroi telle que :

$$(v_l - v_s) = a \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\tau}^D \cdot \mathbf{n} = a \mu_l \frac{\partial v_x}{\partial y} \quad (2.9)$$

On a cru par la suite que tous les fluides pouvaient en fait être modélisés en choisissant $a = \infty$, c'est-à-dire $v_l = v_s$, la condition d'adhérence à la paroi.

Bien plus tard, on s'est rendu compte que les gaz raréfiés par exemple ne vérifient pas cette propriété (voir 1.3.1). Si on introduit le même ingrédient pour les liquides à la paroi à petite échelle, la singularité de contrainte disparaît et la courbure de l'interface liquide-vapeur devient intégrable.

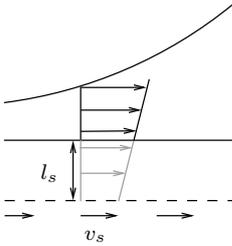
Dussan [23] montre que la formulation précise de la condition aux limites de glissement n'est pas très importante. Seule importe une longueur caractéristique, la longueur de glissement l_s . En utilisant la condition aux limites 2.9, cette longueur peut-être définie par exemple comme :

$$l_s \hat{=} a \mu_l \quad (2.10)$$

On l'interprète alors comme suit : le liquide se comporte comme s'il glissait sur un film du même liquide et d'épaisseur l_s posé sur une paroi avec une condition d'adhérence (voir figure ci-contre). On peut trouver d'autres formulations de la longueur de glissement et d'autres conditions aux limites, mais le résultat important montré par Dussan est que le comportement obtenu ne dépend que de l'ordre de grandeur de la longueur de glissement.

Dans le cadre de l'écoulement qui nous intéresse, l'introduction de la condition de glissement revient donc à augmenter l'épaisseur y du ménisque d'une hauteur l_s , ce qui conduit à l'expression suivante du gradient de pression :

$$\partial_s P(s, \theta_i) = v_s \mu_l \frac{1}{\left(r + \frac{l_s}{\theta}\right)^2} \frac{4 \sin \theta_i}{2\theta_i - \sin 2\theta_i} \quad (2.11)$$



L'équation sur l'angle de contact prend la forme suivante :

$$\partial_{ss}\theta_i = -\text{Ca} \frac{1}{\left(s + \frac{l_s}{\theta}\right)^2} \frac{4 \sin \theta_i}{2\theta_i - \sin 2\theta_i} \quad (2.12)$$

La longueur de glissement permet d'adimensionnaliser l'équation du profil de l'interface :

$$\boxed{\frac{\partial^2 \theta_i}{\partial \tilde{s}^2} = -\text{Ca} \frac{1}{\left(\tilde{s} + \frac{1}{\theta}\right)^2} \frac{4 \sin \theta_i}{2\theta_i - \sin 2\theta_i}} \quad \text{avec } \tilde{s} \doteq \frac{s}{l_s} \quad (2.13)$$

Propriétés des solutions du modèle de Dussan

Cette équation différentielle du second ordre doit être accompagnée de deux conditions aux limites pour être intégrée. Grâce à la condition de glissement, l'angle de contact tend vers une limite finie à l'origine. À cette échelle, ce sont les forces intermoléculaires qui dominent le profil de l'interface, forces qui se traduisent par la valeur de l'angle de contact statique, encore appelé angle de contact microscopique θ_{mic} pour cette raison. Ainsi, la première condition aux limites consiste à imposer l'angle de contact microscopique :

$$\lim_{s \rightarrow 0} \theta_i(s) = \theta_{mic} \quad (2.14)$$

Plusieurs choix sont possibles pour la deuxième condition aux limites. La figure 2.1(a) montre la famille de solutions correspondant à un nombre de capillarité et un angle de contact microscopique donnés. Le système est intégré pour différentes valeurs de la courbure $\theta'(0)$. Les courbes divergent toutes au-delà d'une échelle de longueur variable et cette échelle est très sensible à de petites variations de la condition initiale d'intégration. Sachant que l'échelle macroscopique dépasse souvent de plusieurs ordres de grandeurs l'échelle microscopique, et pour obtenir un système qui ne soit pas trop sensible aux paramètres initiaux, il est donc naturel d'imposer une condition aux limites du côté des grandes échelles, soit l'angle de contact, soit la courbure. Nous choisirons d'imposer la courbure à l'échelle macroscopique s_{ext} :

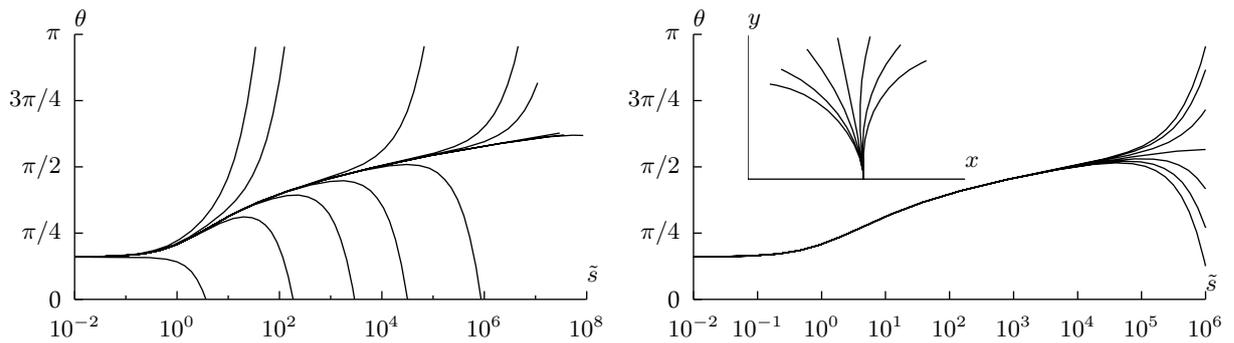
$$c(s_{ext}) = \frac{\partial \theta_i}{\partial s} = c_{ext} \quad (2.15)$$

En pratique, l'échelle macroscopique est liée à la dimension caractéristique du système étudié (notamment le rayon de courbure des bulles ou des gouttes). Fixons les valeurs de Ca et de θ_{mic} , et considérons l'ensemble des solutions pour lesquelles l'angle de contact ne diverge pas avant cette échelle. On constate (figure 2.1(b)) que ces solutions sont pratiquement confondues jusqu'à une échelle un peu inférieure à l'échelle macroscopique (de l'ordre de $s_{ext}/10$).

Cette propriété est très importante et permet de découper les différentes échelles du problème. En reprenant la terminologie usuelle (voir par exemple [25]), on distingue :

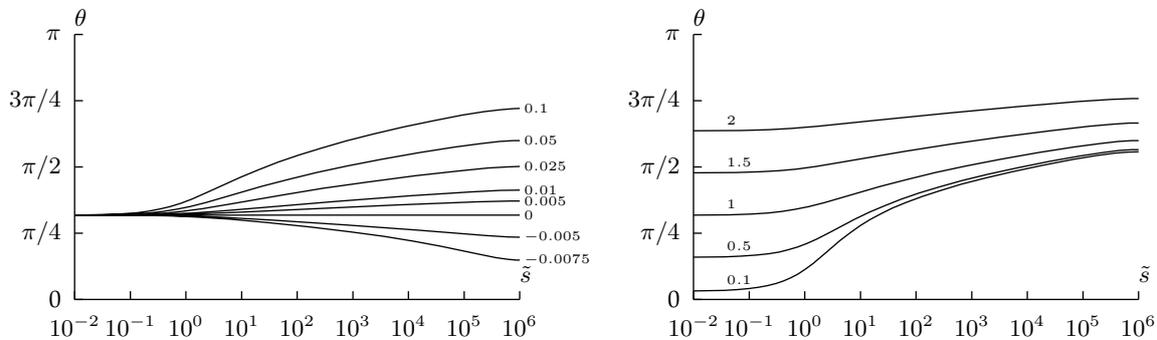
- la région intérieure, à des distances inférieures à la longueur de glissement l_s , où l'angle de contact varie peu,
- la région intermédiaire, où l'angle de contact est indépendant de la condition à la limite extérieure,
- la région extérieure, influencée par l'écoulement du fluide et la courbure macroscopique des interfaces.

On retrouve systématiquement cette décomposition dans les publications sur la dynamique de la ligne de contact.



(a) Quelques solutions de l'équation 2.13 pour $\theta_{mic} = 0.5$, $Ca = 0.05$ et différentes valeurs de la courbure à l'origine. Les solutions représentées sont en fait quelques étapes de la méthode de tir permettant d'obtenir une solution à courbure nulle à l'échelle macroscopique. À mesure que la méthode de tir converge, la divergence de la solution se produit de plus en plus loin.

(b) Solutions de l'équation différentielle pour différentes valeurs de la courbure macroscopique imposée. Le graphique à l'intérieur représente la géométrie de l'interface à l'échelle macroscopique (entre $s = 10^5$ et $s = 10^6$). On remarque que l'angle de contact à une échelle dix fois plus petite $s = 0.1s_{ext}$ est très peu affecté par cette condition aux limites macroscopique.



(c) Solutions pour un angle de contact $\theta_{mic} = 1$ constant et différentes valeurs de Ca . L'angle de contact est beaucoup plus sensible au recul ($Ca < 0$) qu'à l'avancée ($Ca > 0$) et la vitesse maximale de recul est généralement très faible.

(d) Solutions pour $Ca = 0.05$ constant et différentes valeurs de θ_{mic} . Si l'angle de contact statique est petit et le nombre de capillarité relativement élevé, l'angle de contact macroscopique est indépendant de l'angle de contact microscopique.

Figure 2.1 – Quelques profils typiques de l'angle de contact donné par le modèle de Dussan. Illustration de l'influence des différents paramètres du modèle.

La figure 2.1(c) montre l'influence du nombre de capillarité sur le profil de l'angle de contact. On remarque que l'angle de contact macroscopique est beaucoup plus sensible à la vitesse si la ligne de contact recule que si elle avance. Il existe un nombre de capillarité limite en dessous duquel l'angle de contact devient nul. Si les interfaces se déplacent plus rapidement que cette vitesse limite, le démouillage n'a pas lieu et un film de liquide est déposé sur la paroi (on étudie un modèle de film un peu plus loin, en 2.1.4). En pratique, de nombreux substrats sont très mouillants (angle de contact statique petit) ou ont une hystérésis élevée avec un angle de recul petit. Dans ce cas, le recul de la ligne de contact est très lent et il est très probable que l'on forme un film de liquide. Sur une paroi chauffée au contraire, le démouillage reste possible si le film s'évapore immédiatement.

La figure 2.1(d) montre l'influence de l'angle de contact microscopique sur l'angle macroscopique pour un nombre de capillarité fixé. On remarque que pour des fluides relativement mouillants, l'angle de contact macroscopique est indépendant de θ_{mic} . Ce résultat permet de faire le lien entre les modèles de fluides parfaitement mouillants (comme le modèle de Stephan) et les fluides partiellement mouillants caractérisés par une longueur de glissement. Le passage d'un fluide parfaitement mouillant ($\theta_{mic} = 0$) à un fluide partiellement mouillant ($\theta_{mic} > 0$) ne produit donc pas de discontinuité du comportement macroscopique.

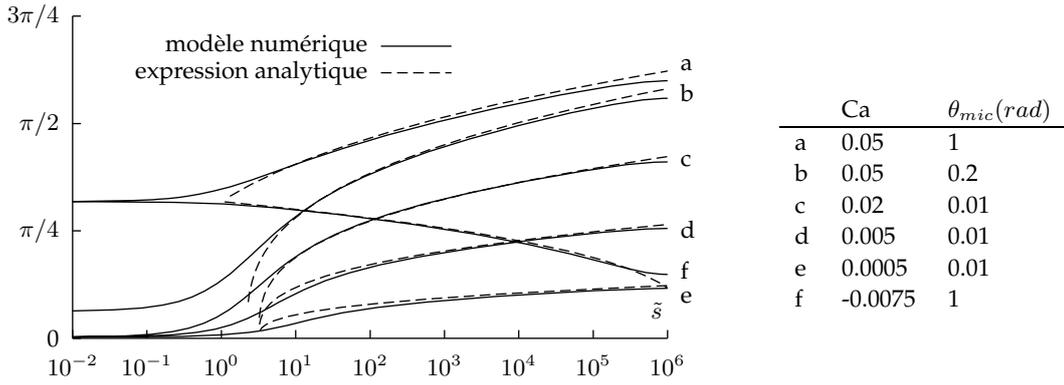


Figure 2.2 – Comparaison de la solution numérique du système d'équations 2.12 et de l'expression analytique 2.16 pour différentes valeurs de Ca et de θ_{mic} . La solution analytique convient pour les grandes échelles mais peine à décrire correctement les petites échelles lorsque θ_{mic} est petit. Cette erreur n'est cependant pas très importante en comparaison de l'erreur due à une incertitude sur la longueur de glissement, et les valeurs de l'angle de contact macroscopique sont raisonnablement bien prédites.

pique des lignes de contact.

Enfin, l'influence de la longueur de glissement l_s sur l'angle de contact macroscopique est facile à mettre en évidence. Changer cette longueur revient à changer le rapport $\tilde{s}_{macro} = s_{macro}/l_s$, donc à décaler l'abscisse adimensionnelle \tilde{s} à laquelle l'angle de contact est évalué vers la gauche ou vers la droite. Il faut donc une variation significative de l_s pour voir l'angle de contact macroscopique varier. Ainsi, le modèle est relativement peu sensible à cette grandeur. Cet avantage est toutefois largement entamé par l'incertitude expérimentale sur l_s (voir plus loin, la confrontation du modèle avec des données expérimentales).

Une solution analytique approchée

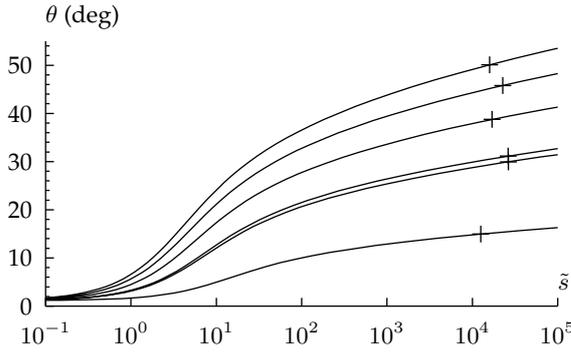
Le résultat le plus utilisé dans la littérature est une solution analytique approchée de l'équation dans la région intermédiaire, proposée par Hocking et Rivers [37]. Cette solution est présentée sous des formes diverses, dont la plus simple est peut-être la suivante :

$$\theta_i(r) = g^{-1} \left(g(\theta_i(r_0)) + Ca \ln \frac{r}{r_0} \right), \quad \text{avec } g(\theta_i) \hat{=} \int_0^{\theta_i} \frac{\theta - \sin \theta \cos \theta}{2 \sin \theta} d\theta \quad (2.16)$$

Cette expression est une approximation qui convient pour les petits nombres de capillarité. Pour l'appliquer, il faut remplacer $\theta_i(r_0)$ par une valeur connue de l'angle de contact. Le choix le plus évident consiste à imposer l'angle de contact microscopique θ_{mic} à petite échelle. En première approximation, la longueur r_0 est alors égale à la longueur de glissement l_s puisque l'angle de contact y est pratiquement égal à l'angle de contact microscopique. Pour que l'expression analytique soit plus fidèle au modèle d'origine, nous proposons d'utiliser l'expression suivante de r_0 :

$$\begin{cases} \theta_{mic} > 0.1 & \rightarrow r_0 \hat{=} \sqrt{\theta_{mic}} l_s \\ \theta_{mic} < 0.1 & \rightarrow r_0 \hat{=} \sqrt{0.1} l_s \end{cases} \quad (2.17)$$

La figure 2.2 représente l'écart entre l'expression analytique approchée et la solution numérique du système complet pour quelques combinaisons du nombre de capillarité et de l'angle de contact microscopique. L'écart observé est relativement réduit en comparaison de l'incertitude sur la longueur de glissement.



(a) Recherche de l'abscisse \tilde{s}_{ext} telle que le modèle rende compte des points expérimentaux. Chaque courbe correspond à une valeur de Ca utilisée pour l'expérience. Les points marquent l'abscisse \tilde{s}_{ext} où la courbe atteint l'angle de contact mesuré. On a ensuite $l_s = s_{ext}/\tilde{s}_{ext}$.

Ca	θ_{ext} (deg.)	\tilde{s}_{ext}	l_s
0.000276	14.95	12500	0.8 nm
0.00344	29.95	26450	0.38 nm
0.00386	31.12	26300	0.38 nm
0.0076	38.74	17000	0.59 nm
0.0120	45.79	22700	0.44 nm
0.0161	50.10	15950	0.62 nm

(b) Extrapolation de la valeur de l_s à partir de l'angle macroscopique mesuré et du nombre de capillarité.

Figure 2.3 – Extrapolation des résultats de Dussan *et al.* [25] pour obtenir la valeur de l_s . L'angle a été mesuré à une distance $s_{ext} = 10 \mu\text{m}$, et notre calcul est fondé sur l'hypothèse que $\theta_{mic} = 0$ (nous avons vu que pour les liquides très mouillants, cette valeur a peu d'influence sur l'angle macroscopique).

Pour finir, il est commode de disposer d'une expression analytique de la fonction g et de sa réciproque. Nous proposons les expressions suivantes :

$$g(x) \simeq \frac{1}{9} x^3 - 0.00183985 x^{4.5} + 1.845823 \cdot 10^{-6} x^{12.258487} \quad (2.18)$$

$$g^{-1}(x) \simeq (9x)^{1/3} + 0.0727387x - 0.0515388x^2 + 0.00341336x^3 \quad (2.19)$$

La précision relative est meilleure que 0.6% pour $x < 2.8$ et 20% entre 2.8 et 3.1 (à ces grands angles, le modèle de Dussan n'est de toutes façons pas applicable, voir le paragraphe sur les limitations du modèle).

2.1.2 Étude de quelques résultats expérimentaux sur le modèle de Dussan

On trouve dans la littérature un grand nombre d'expériences relatives à la mesure des angles de contact dynamiques. Nous avons sélectionné deux séries d'expériences pour mettre la théorie à l'épreuve et tenter d'obtenir un ordre de grandeur de la longueur de glissement.

Expériences de Dussan *et al.* [25]

Une expérience très précise a été réalisée par Dussan *et al.* [25]. Elle consiste à immerger à vitesse constante un tube de verre dans de l'huile de silicone et à mesurer la géométrie du ménisque à proximité de la ligne de contact. Le verre peut être rendu propre et lisse jusqu'à des échelles moléculaires, et l'huile de silicone utilisée est relativement visqueuse et très mouillante.

Les auteurs obtiennent une courbe d'angle de contact en fonction de la distance à la ligne de contact. Certes, l'échelle la plus petite à laquelle l'angle de contact est mesurable reste très loin des échelles microscopiques, mais la très grande précision des mesures permet tout de même de valider le modèle sur le petit intervalle de l'abscisse \tilde{s} où les mesures sont possibles. Dans l'article cité, les auteurs se contentent de comparer le profil d'angle de contact à la courbe théorique sur l'intervalle où il a été mesuré. Peut-être l'ont-ils fait, mais ils ne donnent pas la valeur extrapolée de l'angle de contact microscopique et de la longueur

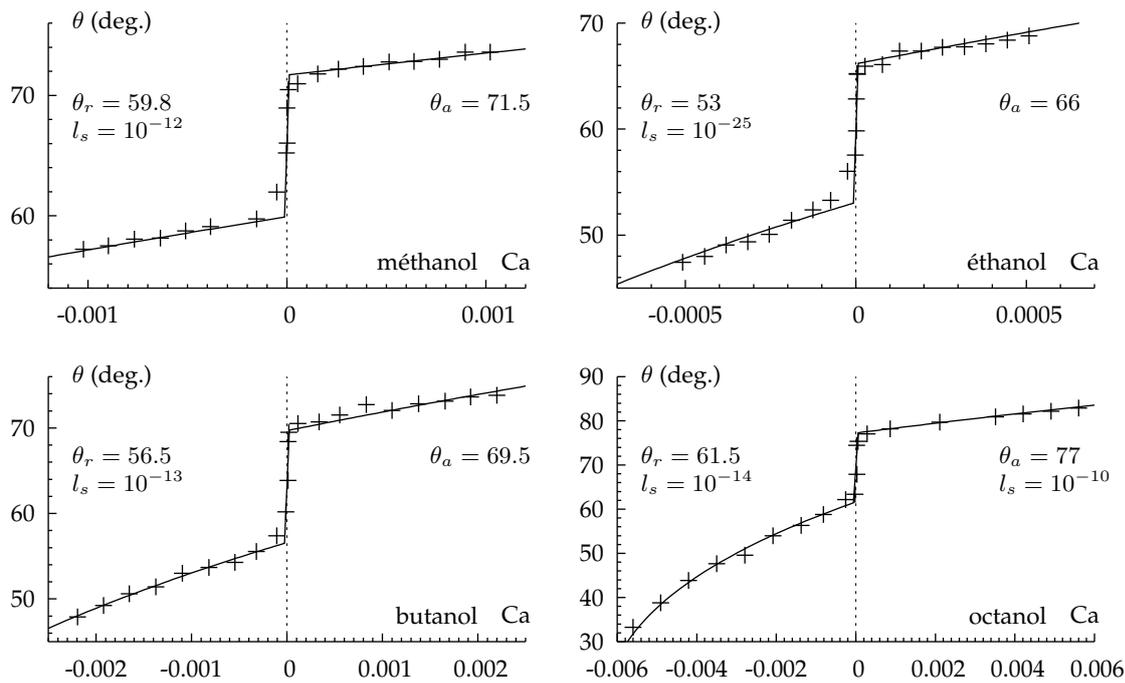


Figure 2.4 – Application du modèle de Dussan aux résultats expérimentaux de Petrov *et al.* [62] : données expérimentales et meilleure approximation par le modèle de Dussan

de glissement. Petrov *et al.* [62] ont récemment réalisé d'autres mesures et analysé celles de Dussan pour en déduire une longueur de glissement. Ils annoncent une longueur de glissement comprise entre 0.28 nm et 1.7 nm, selon le modèle de glissement utilisé. Nous avons repris ces calculs avec notre propre expression du modèle de glissement, et obtenons les valeurs de la figure 2.3.

La longueur de glissement obtenue varie entre 0.38 nm et 0.8 nm pour l'ensemble des points de mesure. Cet écart est relativement faible, compte tenu de la faible sensibilité de l'angle de contact à ce paramètre. D'autre part, la valeur correspond à quelques diamètres moléculaires, en accord avec les hypothèses de départ. On pourrait être tenté de fixer désormais l'un des deux paramètres du modèle, la longueur de glissement l_s à une valeur fixe de l'ordre de la taille des molécules. Mais une telle approche survit-elle à d'autres confrontations ?

Expériences de Petrov *et al.* [62]

Le modèle de Dussan va très vite perdre son pouvoir prédictif avec l'exploration de systèmes plus complexes. Petrov *et al.* [62] ont récemment publié des expériences systématiques sur plusieurs fluides semblables de masse molaire croissante (méthanol, éthanol, butanol et octanol). Le substrat est une fibre de verre de 60 μm de rayon enduite d'un fluoropolymère. Cet enduit a pour effet d'augmenter l'angle de contact et d'introduire une hystérésis. Les résultats sont assez surprenants : bien qu'ils puissent être reproduits à l'aide de différents modèles, les paramètres de ces modèles sont souvent en dehors des valeurs courantes. De plus dans le cas de l'octanol, on a besoin de deux longueurs de glissement différentes pour rendre compte de l'angle d'avancée et de l'angle de recul alors que la plupart des modèles sont symétriques par rapport à la vitesse de déplacement.

Ainsi que l'ont fait les auteurs de cet article avec différents modèles, nous avons appliqué le modèle de Dussan à leurs résultats et avons obtenu les résultats

de la figure 2.4. Pour rendre compte des données, il nous faut pour chaque fluide :

- un angle de contact microscopique d’avancée θ^a et un angle de recul θ^r ,
- une longueur de glissement à l’avancée l_s^a et une autre au recul l_s^r (toutefois, ces deux valeurs ne sont différentes que dans un seul cas).

Le plus surprenant, au vu de ces résultats, est que la valeur de la longueur de glissement est très inférieure aux dimensions des molécules (jusqu’à 10^{-25} m). Les auteurs interprètent ce comportement par la présence d’une dissipation d’énergie locale à l’échelle moléculaire. De la même façon, le modèle de Dussan peut être interprété comme une échelle de coupure de la viscosité : la viscosité usuelle des fluides agit jusqu’à l’échelle de coupure, en dessous de laquelle elle s’annule. Les expériences de Petrov suggèrent exactement l’inverse : à l’échelle moléculaire, la viscosité du fluide semble très supérieure à la viscosité usuelle ce qui produirait une forte variation de l’angle de contact à petite échelle. Ce phénomène est-il lié à la nature polaire des molécules ? Si c’est le cas, le fluide le plus courant et celui qui nous intéresse le plus —l’eau— risque de réserver quelques surprises.

Cette analyse des résultats de Petrov illustre parfaitement la discussion sur la modélisation des petites échelles du premier chapitre (voir 1.3.1). Nous sommes en présence d’un modèle à deux paramètres (que nous avons dupliqués en quatre paramètres pour l’occasion), capable de rendre compte des résultats expérimentaux, et qui de toute évidence part d’un postulat faux sur la physique du phénomène à petite échelle (l’hypothèse d’un glissement du fluide à l’échelle moléculaire).

2.1.3 Limitations du modèle

Le modèle de ligne de contact dynamique présenté plus haut a de nombreuses limitations. Certaines sont d’ordre théorique, dues aux approximations faites lors de la résolution des équations de Navier-Stokes, alors que d’autres sont liées au modèle lui-même et ne sont accessibles que par une confrontation du modèle à l’expérience.

Ainsi, le modèle est construit sur une simplification des équations de Navier-Stokes avec une condition de glissement à la paroi. Entre ces équations et l’expression 2.16, de nombreuses étapes conduisent à négliger certains termes pour parvenir à une expression ayant peu de paramètres et une solution analytique. L’annexe B montre comment parvenir à l’équation 2.2. On y analyse les effets des différentes simplifications (certains résultats sont nouveaux). Les paragraphes suivants font la synthèse des résultats de cette annexe.

Prise en compte des termes d’inertie

La première simplification consiste à négliger les termes convectifs de l’équation de Navier-Stokes. À petite échelle, ces termes sont effectivement négligeables, mais la valeur du nombre de Reynolds local calculée à partir de l’échelle caractéristique à laquelle le système est observé peut être très supérieure à l’unité. Dans le cas de l’eau à pression atmosphérique et à 100°C et pour une vitesse de la ligne de contact de 10 cm s^{-1} , la valeur du nombre de Reynolds local est inférieure à 1 à une échelle caractéristique donnée par :

$$\text{Re} \hat{=} \frac{\rho_l v s_{ext}}{\mu_l} < 1 \Leftrightarrow s_{ext} < \frac{\mu_l}{\rho_l v} = 3\ \mu\text{m} \quad (2.20)$$

Au-delà de cette échelle, l’angle de contact est *a priori* affecté par l’accélération du fluide. Cox [17] étudie ce problème théoriquement et Ramé présente une étude expérimentale de cet aspect [82]. Leur conclusion est que les effets de l’inertie du fluide sur l’angle de contact commencent à être discernables dès que la valeur

du nombre de Reynolds est supérieure à 1. Ils se traduisent alors toujours par une décroissance de l'angle de contact par rapport à la valeur qu'il aurait sans les effets de l'inertie.

Nous avons tenté d'étendre le modèle de ligne de contact pour prendre en compte l'inertie, mais de nombreuses difficultés apparaissent. Voici les conclusions auxquelles nous avons abouti :

- À partir du moment où les effets de l'inertie sont prépondérants sur la géométrie des interfaces, celle-ci devient très sensible aux conditions aux limites du système, et en particulier au champ de vitesse à proximité des lignes de contact. Cet effet est similaire au problème des conditions aux limites aux grands angles discuté plus loin.
- Supposons que la ligne de contact recule. Nous savons que la vitesse maximale de recul des lignes de contact est relativement faible. Au-delà de cette vitesse limite, l'angle de contact est nul et un film de liquide se forme en paroi. Les termes d'inertie ne peuvent accentuer que légèrement ce phénomène puisque la vitesse maximale de recul est déjà très réduite. Ce problème sera discuté plus loin avec les modèles de micro-couches (voir 2.1.4).
- Si l'interface avance, la plage du nombre de capillarité telle que l'angle de contact varie significativement est relativement réduite (entre 0.05 et 0.5). Pour des nombres de capillarité inférieurs, l'angle est peu modifié, et pour des nombres supérieurs, le ménisque est complètement retourné avec emprisonnement d'un film de vapeur le long de la paroi. Dans le premier cas, les termes d'inertie vont au maximum ramener l'angle de contact à sa valeur statique. Comme le nombre de capillarité est petit, l'angle dynamique donné par le modèle de Dussan est peu différent de l'angle de contact statique. L'effet des termes d'inertie est donc faible lui aussi. Dans le deuxième cas, les termes d'accélération redeviennent négligeables puisque le fluide est à peine dévié de sa trajectoire rectiligne. L'accélération détermine alors l'épaisseur du film de vapeur emprisonné au moment du retournement. Après retournement du ménisque, le film de gaz se forme et le comportement de la ligne de contact devient indépendant du comportement des interfaces à l'intérieur du domaine.
- Nous verrons plus loin (voir 2.2.3) que si les termes convectifs deviennent prépondérants, le régime de transfert thermique n'est plus du tout dominé par une singularité à la ligne de contact, et que l'angle de contact ne joue plus alors qu'un rôle secondaire. Le calcul du flux de chaleur ne nécessite alors pas la connaissance de l'angle de contact .
- Notons enfin que les termes convectifs rendent les équations de Navier-Stokes non linéaires. Nous présentons dans l'annexe B une étude d'un problème un peu différent lié au transfert de masse singulier. Ce problème est dérivé de l'écoulement de Jeffery-Hamel, et il admet une infinité de solutions stationnaires. Dans ce cas, il n'est pas évident d'en sélectionner une. Il se peut très bien qu'aucune solution stationnaire ne soit stable et qu'il faille chercher une solution instationnaire.

En conclusion, un modèle incluant les termes d'inertie serait compliqué (il doit tenir compte des conditions aux limites dans le fluide) et sans doute applicable uniquement dans des cas très particuliers (plage serrée de valeurs du nombre de Reynolds comprises entre 1 et 100, problème stationnaire). De telles configurations, situées à la marge de deux régimes d'écoulement (ni visqueux, ni turbulent) sont plus facilement accessibles à des méthodes numériques.

Pourtant, l'ordre de grandeur de la vitesse utilisé dans notre exemple (0.1 m s^{-1}) est relativement faible en comparaison des vitesses rencontrées dans un fluide en ébullition. Si on élude pour l'instant le problème des termes d'inertie aux petites échelles, il se posera donc à nouveau plus tard.



Prise en compte de l'écoulement dans la phase gazeuse

La deuxième simplification consiste à négliger la viscosité de la phase vapeur et donc les contraintes tangentielles exercées par celle-ci sur le liquide. Cette hypothèse est soutenue par les faits suivants :

- On montre en B.4 que la viscosité de la vapeur peut être négligée si l'angle de contact est inférieur à 90° ou si le rapport de masse volumique supérieur à 10. Dans les autres cas, on montre que cette hypothèse conduit à des erreurs importantes (plus de 50% sur le gradient de pression à très haute pression) et le modèle fournit à peine un ordre de grandeur de l'angle de contact. Cependant, le modèle a d'autres limitations dans ces conditions. Par exemple, si la courbure est très forte, l'équation 2.2 n'est plus une bonne approximation du gradient de pression (voir annexe B.5.1). Par ailleurs, si l'angle de contact est supérieur à 120° , on peut montrer que l'écoulement devient très sensible aux conditions aux limites macroscopiques du problème (voir annexe B.2.3). La prise en compte de la viscosité de la vapeur n'améliorerait donc pas significativement la précision du modèle global.
- À petite échelle, lorsque le nombre de Knudsen est inférieur à 100, l'expérience montre qu'une condition de glissement s'applique aux frontières de la phase gazeuse. Les équations de Navier-Stokes ne décrivent donc pas correctement l'écoulement dans ces régions. À défaut d'informations plus précises, on choisit donc de négliger la viscosité de la vapeur

Sélection de la solution à l'ordre 1

Troisième point faible, l'expression du gradient de pression à l'interface liquide-vapeur est construite à partir d'un seul «mode» de l'écoulement (cette notion est largement détaillée dans l'annexe B). Ce mode est déterminé de façon unique par la vitesse de déplacement de la ligne de contact, et c'est pourquoi l'angle de contact macroscopique ne dépend que de ce seul paramètre et est peu sensible aux autres aspects de l'écoulement macroscopique (notamment la courbure à l'échelle macroscopique).

Une autre interprétation de ce mode d'écoulement est qu'il constitue l'approximation à l'ordre 1 du champ de vitesse et de pression par rapport au nombre de capillarité, c'est-à-dire qu'il est correct lorsque la courbure de l'interface tend vers zéro.

On montre que les autres modes de l'écoulement ont une influence significative sur l'écoulement dans au moins deux situations :

- lorsque la courbure de l'interface est importante, donc l'angle de contact très différent de sa valeur statique,
- lorsque l'angle de contact est supérieur à 90° .

Le deuxième cas est le plus pénalisant. Aux grands angles, l'écoulement devient très sensible aux conditions aux limites macroscopiques (cet effet a été mis en évidence par Shickmurzaev [75] et on propose une brève analyse en termes de modes d'écoulements en B.2.3).

2.1.4 La micro-couche

La présence d'un film de liquide en paroi sous les bulles de vapeur a été observée depuis les années 1960. Dans la phase initiale de croissance des bulles, le déplacement de l'interface est très rapide. Or, le modèle de ligne de contact prévoit une vitesse maximale de démouillage qui est très largement dépassée dans cette situation. La ligne de contact se déplace donc lentement alors que la bulle croît beaucoup plus vite, et un film de liquide se forme sur la paroi. Ce film, sou-

vent appelé micro-couche dans la littérature, a une épaisseur de l'ordre du micromètre. Son épaisseur est en tous les cas très inférieure à la taille des bulles. Dans le cadre d'une simulation numérique, il ne pourra pas être pris en compte directement, sinon au prix d'un raffinement du maillage près des parois. Cet argument motive la construction d'un modèle de sous-maille pour décrire la micro-couche.

Actuellement, le modèle de Cooper [14] est encore très utilisé dans les publications. Ce modèle est fondé sur l'inertie du liquide et la tension de surface y est supposée négligeable. Ce modèle ne semble cependant pas adapté à une mise en œuvre dans un code de simulation numérique : il modélise l'ensemble du processus de croissance de la bulle de vapeur, et non le phénomène local de formation du film. De plus, il requiert la connaissance de l'histoire de processus, en raison des termes d'inertie. Ces paramètres le rendent difficile à utiliser comme modèle de sous-maille. Il existe pourtant une raison plus fondamentale de ne pas s'orienter *a priori* vers ce genre de modèle : à l'échelle où les termes d'inertie sont dominants, la valeur du nombre de Reynolds est très élevée. Par conséquent, comme la valeur du nombre de Prandtl est généralement supérieure à 1, la valeur du nombre de Péclet est très élevée elle aussi. Les couches limites thermiques sont donc d'une épaisseur très réduite. Or, le calcul correct du flux de chaleur aux interfaces requiert un maillage suffisamment fin pour capturer les couches limites thermiques. Donc un tel maillage permet aussi de capturer les couches limites hydrodynamiques et le régime d'écoulement à l'échelle d'une maille n'est donc pas franchement dominé par les termes d'inertie.

Bretherton [10] propose un modèle différent dans lequel c'est la compétition entre la tension de surface et la viscosité du fluide qui détermine l'épaisseur du film déposé.

Modèle de film visqueux

Ce modèle a déjà été étudié en détail par Bretherton [10]. On suppose qu'un film de liquide d'épaisseur δ_0 est déposé sur la paroi par un ménisque de liquide en translation uniforme à vitesse $v_s < 0$ (le ménisque recule). Dans le repère mobile associé au ménisque, le solide se déplace à vitesse $v_s < 0$ (c'est-à-dire vers les x négatifs).

Si on suppose que le ménisque dépose un film de liquide d'épaisseur constante sur la paroi, on obtient en régime visqueux une relation entre l'épaisseur δ du film de liquide, la vitesse v_s de recul du ménisque et la courbure c du ménisque à l'échelle macroscopique.

Le calcul de cette épaisseur est présenté en B.6. Il conduit à l'expression suivante de l'épaisseur δ_0 du film déposé :

$$\delta_0 = \tilde{c}_0 \frac{\text{Ca}^{2/3}}{c_{ext}}, \quad \text{avec } \tilde{c}_0 \simeq 1.3376 \quad (2.21)$$

Pour de l'eau à pression atmosphérique, on remarque cependant que le nombre de Reynolds au niveau du film est rapidement supérieur à l'unité (notamment pour des vitesses de déplacement des interfaces de l'ordre du mètre par seconde). Ce modèle est donc très limité dans la gamme de vitesses de déplacement.

2.2 Transfert de chaleur près des lignes de contact

Intéressons-nous maintenant à l'autre aspect des lignes de contact : le transfert de masse et de chaleur. Les publications sont déjà bien moins nombreuses et

plus souvent théoriques qu'expérimentales. Plus encore que pour la dynamique des lignes de contact, l'expérience dans ce domaine est délicate. En fait, contrairement à la dynamique de la ligne de contact pour laquelle les mesures précises de l'angle de contact sont possibles, on ne trouve pratiquement aucune validation quantitative des flux de chaleur prédits par les différents modèles (peu nombreux au demeurant). De plus, les mesures que l'on peut obtenir ne permettent pas d'isoler de façon certaine la contribution des lignes de contact. La faute en est certainement à la difficulté d'obtenir expérimentalement un ménisque stable de liquide surchauffé (nous avons d'ailleurs pu nous en rendre compte par nous-mêmes dans la partie expérimentale de ce travail).

Les publications que nous avons trouvées concernant le transfert de chaleur singulier à la ligne de contact traitent rarement du déplacement des lignes de contact. Les termes convectifs de l'équation de Navier-Stokes sont donc systématiquement négligés.

L'existence d'une singularité de transfert thermique est facile à mettre en évidence. Pourtant, la nécessité d'introduire des ingrédients physiques plus fins à la ligne de contact a fait l'objet de peu d'attention. Les travaux les plus pertinents actuellement sont souvent dérivés d'un modèle proposé par Wayner et Coccio [89] qui montre pour la première fois la relation entre le flux de chaleur singulier à la ligne de contact et l'angle de contact. Wayner a ensuite largement exploité les bases de ce modèle [67, 90, 84, 85, 86, 87, 46]. Stephan a appliqué ce modèle à différentes configurations de caloducs [78, 80, 79, 9] et à une modélisation de l'ébullition en paroi [50]. Stephan et Kern ont récemment étendu ce modèle à des mélanges binaires [45]. Morris [59] a récemment rationalisé l'étude du transfert singulier en montrant que l'on peut découpler la région microscopique proche de la ligne de contact des régions intermédiaires où passe la plus grande partie du flux de chaleur. Dans une autre publication [60], il démontre un résultat très intéressant : les modèles fondés sur l'approche de Wayner sont équivalents à un modèle beaucoup plus simple où les forces intermoléculaires sont représentées par une échelle de longueur caractéristique. Ce modèle simplifié permet d'aboutir à des expressions analytiques des solutions de ces modèles.

2.2.1 Micro-région, domaine conductif et domaine convectif

La première étape de l'étude du transfert de chaleur consiste à découper le domaine fluide proche de la ligne de contact en fonction du phénomène prépondérant qui détermine le flux de chaleur.

Considérons un ménisque de liquide en déplacement à vitesse $-v_s$ sur une paroi chauffée. Pour plus de commodité, on étudie ce système dans un repère entraîné où la vitesse de la ligne de contact est nulle. Dans ce repère, la paroi se déplace à vitesse v_s et le liquide à la l'interface liquide-vapeur à une vitesse un peu inférieure à $-v_s$. Supposons pour commencer que l'interface liquide-vapeur est peu courbée, avec un angle de contact moyen θ_i .

Échelle de coupure du flux de chaleur

Nous savons (voir 1.1.2) que le flux de chaleur qui traverse un film de liquide est limité

- soit par la résistance d'interface, si l'épaisseur du film est inférieure à l'épaisseur caractéristique de résistance d'interface δ_R ,
- soit par la résistance thermique du film de liquide s'il est plus épais.

L'épaisseur de la couche de fluide à une distance s est de l'ordre de $s \theta_i$. Donc, à une distance inférieure à

$$s_R \hat{=} \frac{\delta_R}{\theta_i} \tag{2.22}$$

le flux de chaleur n'augmente plus et il est limité par la résistance d'interface. La résistance thermique du film de liquide est négligeable et la température du liquide à l'interface liquide-vapeur est peu différente de la température de la paroi.

À une distance supérieure à s_R , la résistance thermique du liquide devient prépondérante. Le flux de chaleur diminue rapidement avec la distance s à cause de la résistance thermique croissante du film de liquide. La température du liquide à l'interface liquide-vapeur est alors très proche de la température de saturation.

La distance caractéristique s_R est donc une échelle de coupure du flux de chaleur. En s'approchant de la ligne de contact, le flux augmente rapidement jusqu'à cette échelle. Au-delà, il est limité par la résistance d'interface et n'augmente plus. Sur la figure 2.5, on a représenté schématiquement la température adimensionnelle du liquide à l'interface liquide-vapeur en fonction de l'abscisse s , et le flux de chaleur à l'interface liquide-vapeur.

Vitesse caractéristique du fluide et nombre de Péclet local

L'étude de la dynamique de la ligne de contact avec l'approche de Dussan donne une idée du champ de vitesse dans le ménisque de liquide en l'absence de transfert de masse. La vitesse caractéristique du liquide est constante sur tout le domaine qui va des plus petites échelles jusqu'à l'échelle macroscopique s_{ext} .

Comme l'épaisseur du film de liquide $s \theta_i$ augmente progressivement à mesure que l'on s'éloigne de la ligne de contact, on s'attend à voir dominer les phénomènes convectifs à partir d'une certaine échelle. Nous proposons de construire un nombre de Péclet local $Pe(s)$ pour déterminer l'échelle de transition vers le régime convectif. Ce nombre s'exprime naturellement comme un rapport de temps caractéristiques :

- Le temps caractéristique de diffusion de la chaleur à travers la couche de liquide d'épaisseur $s \theta_i$ s'écrit :

$$t_{diff} \hat{=} \frac{s^2 \theta_i^2}{\alpha_l} \tag{2.23}$$

C'est le temps caractéristique nécessaire pour qu'une particule de fluide se mette à l'équilibre thermique par conduction à travers l'épaisseur du liquide.

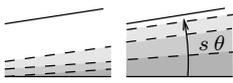
- Le temps caractéristique mis par la même particule pour «traverser» la ligne de contact s'écrit :

$$t_{conv} \hat{=} \frac{s}{v_s} \tag{2.24}$$

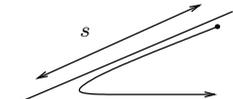
Par conséquent, on peut définir le nombre de Péclet local comme le rapport de ces deux temps caractéristiques :

$$Pe(s) \hat{=} 10 \frac{s v_s \theta_i^2}{\alpha_l} \tag{2.25}$$

Le rapport des temps caractéristiques donne la bonne variation en fonction des grandeurs physiques, mais la longueur obtenue ne correspond pas à l'échelle de transition que l'on obtient lorsque l'on résout numériquement le problème. Le



propagation de la chaleur à travers le film.



temps de traversée d'une particule : distance s , vitesse v_s

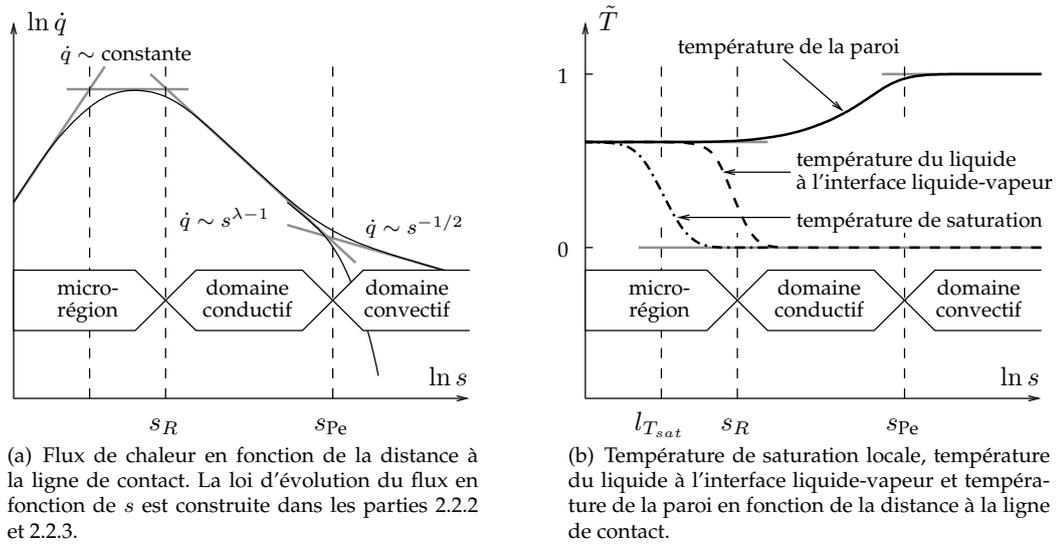


Figure 2.5 – Représentation schématique des trois domaines et des échelles de longueur caractéristiques du transfert de chaleur près des lignes de contact. La longueur s est la distance à la ligne de contact, la température T_{ext} est la température caractéristique de la paroi à l'échelle macroscopique et on définit la température adimensionnelle $\tilde{T} = (T - T_{sat}) / (T_{ext} - T_{sat})$. L'échelle $l_{T_{sat}}$ est définie dans la partie 2.3 consacrée à la micro-région.

facteur 10 est déterminé empiriquement pour corriger cette longueur caractéristique (voir 2.5.1).

Si le nombre de Péclet est petit devant 1, l'équation de la chaleur est dominée par le terme de Fourier. Les particules se mettent rapidement à l'équilibre thermique au cours de leur déplacement près de la ligne de contact : le champ de température est indépendant du champ de vitesse. Si au contraire le nombre de Péclet est supérieur à l'unité, les termes convectifs sont importants. Nous verrons par la suite (voir 2.2.3) qu'ils se traduisent par la formation de couches limites thermiques le long des interfaces. Selon le signe de la vitesse v_s , soit le flux de chaleur est fortement augmenté par la présence de la couche limite, soit au contraire il est fortement diminué.

Le nombre de Péclet local varie le long du ménisque. Il est petit lorsque s est petit, près des lignes de contact, et il augmente aux grandes échelles. On peut donc définir une échelle de transition

$$s_{Pe} \hat{=} \frac{\alpha l}{v_s \theta_i^2} \tag{2.26}$$

telle que, aux échelles inférieures les termes convectifs sont négligeables et le flux de chaleur est indépendant du champ de vitesse, et aux échelles supérieures, les termes convectifs sont importants et le flux de chaleur est gouverné par le profil de couches limites thermiques aux interfaces.

La vitesse caractéristique choisie ne tient pas compte du débit du liquide qui alimente le ménisque sous l'effet de l'évaporation. Cette vitesse est très faible à grande échelle est augmentée seulement à petite échelle. Le nombre de Péclet associé à ce champ de vitesse est très inférieur à l'unité et l'échelle de transition vers le régime convectif est donc uniquement déterminée par la vitesse de déplacement de la ligne de contact.

Définition des trois régions

La configuration la plus riche est celle où les deux échelles de transition s_{Pe} et s_R sont ordonnées comme suit : l'échelle de coupure de résistance d'interface est très inférieure à l'échelle où sont impliqués les termes convectifs, soit $s_R \ll s_{Pe}$.

La figure 1.1 du premier chapitre donne la valeur de l'épaisseur caractéristique d'interface pour différents fluides en fonction de la pression de travail. Elle est inférieure à $1 \mu\text{m}$ pour la plupart de fluides (sauf le mercure) et dès que la pression est supérieure à 0.1 bar. À des pressions supérieures à 1 bar, elle est inférieure à $0.1 \mu\text{m}$.

Plus la vitesse des lignes de contact est élevée, plus l'échelle s_{Pe} est petite. On peut donc calculer la vitesse maximale de la ligne de contact telle que $s_{Pe} > s_R$. Cette vitesse est donnée par :

$$v = \frac{k_l}{\rho_l c_{Pl} \delta_R} = \frac{\alpha_l}{\delta_R} \quad (2.27)$$

La diffusivité des liquides usuels est de l'ordre de $10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ à toutes les pressions. L'ordre défini précédemment est donc respecté jusqu'à des vitesses de 0.1 m s^{-1} à basse pression et jusqu'à plusieurs mètres par seconde à haute pression.

Modèle dégénéré à grande vitesse

Aux grandes vitesses de déplacement de la ligne de contact, l'ordre des longueurs caractéristiques est inversé et le régime purement conductif inexistant. Dans ce cas, le flux de chaleur est constant dans la micro-région et déterminé par la position des couches limites en dehors de cette région. Nous verrons lors de l'étude des couches limites que la contribution des lignes de contact est négligeable dans ce cas.

À grande vitesse, le modèle de ligne de contact est donc relativement pauvre :

- la dynamique de la ligne de contact est dominée par l'inertie du fluide qui rend difficile la prédiction de l'angle de contact,
- l'angle de contact prend des valeurs extrêmes correspondant à la formation d'un film de liquide ou de vapeur en paroi,
- la contribution des lignes de contact au transfert de masse et de chaleur global devient négligeable.

En revanche, ce cas de figure est particulièrement favorable à la pression de recul, dont l'effet est alors maximal.

Nous allons donc nous intéresser plus particulièrement au cas dans lequel il existe trois régions distinctes de régime de transfert thermique :

- la micro-région, dominée par la résistance d'interface,
- le domaine conductif, où la température du liquide à l'interface liquide-vapeur est égale à la température de saturation et les termes convectifs négligeables,
- le domaine convectif.

Dans les deux parties suivantes, nous étudions le transfert de chaleur à la ligne de contact dans le domaine conductif et dans le domaine convectif. Dans ces deux régions, le couplage entre l'hydrodynamique et la thermique est unidirectionnel : le champ de température dépend du profil de l'interface et éventuellement du champ de vitesse, alors que le profil et le champ de vitesse sont indépendants du champ de température.

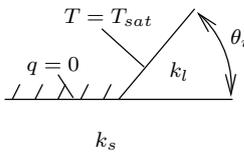
Dans la micro-région, presque tous les phénomènes physiques sont couplés : l'hydrodynamique est liée à l'évaporation et inversement. De plus, d'autres phé-

nomènes physiques deviennent non négligeables dans cette région : la température de saturation locale est modifiée et les forces intermoléculaires à longue portée influencent le profil de l'interface. En revanche, on peut très souvent faire l'hypothèse que la température de paroi est constante dans cette région.

2.2.2 Transfert de chaleur dans le domaine conductif

Nous commençons par l'étude du domaine conductif, car il est facile à découpler des deux autres domaines et le champ de température y est indépendant de la vitesse du fluide.

Description du problème modèle



Le problème résolu est représenté ci-contre. La paroi est supposée avoir une grande épaisseur. Le domaine liquide est délimité par la paroi solide et une interface liquide-vapeur plane ayant un angle θ_i avec la paroi. On suppose que la température de saturation T_{sat} est constante et la résistance d'interface négligeable. On cherche une solution stationnaire de l'équation de la chaleur

$$\nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (2.28)$$

dans la paroi et le liquide. On suppose que le domaine a des frontières intérieure et extérieure circulaires, la frontière intérieure ayant un rayon $r = s_R$ et la frontière extérieure un rayon $r = s_{ext}$ (ce rayon extérieur est soit l'échelle du problème macroscopique à laquelle l'interface ne peut plus être supposée plane, soit l'échelle s_{Pe} qui détermine la limite du domaine convectif).

À basse pression, la conductivité thermique de la vapeur est très inférieure à celle du liquide. À notre connaissance, tous les modèles de ligne de contact existants utilisent cette hypothèse et supposent que le flux de chaleur à l'interface solide-vapeur est nul (notamment [5] et les modèles dérivés des travaux de Wayner [67] comme le modèle de Stephan [80]). On peut cependant calculer assez facilement le flux de chaleur dans la vapeur (voir A.2.2), et les conclusions sont les mêmes que pour le problème de Stokes (limite de validité aux très grands angles de contact et à haute pression). Les conditions aux limites du problème sont donc :

- flux de chaleur nul à l'interface solide-vapeur,
- température constante $T = T_{sat}$ à l'interface liquide-vapeur,
- continuité de la température et du flux à l'interface solide-liquide.

Solution analytique

Le calcul de la solution générale de ce problème est présenté en annexe A.2.1. Si on appelle $T_s(s_{ext})$ la température de la paroi à l'abscisse s_{ext} , le flux de chaleur à l'interface liquide-vapeur s'écrit (équation A.55)

$$q(s) = (T_s(s_{ext}) - T_{sat}) \frac{s^{\lambda-1}}{s_{ext}^\lambda} \frac{k_l \lambda}{\sin(\lambda \theta_i)} \quad (2.29)$$

où λ est la plus petite racine réelle positive de la fonction suivante :

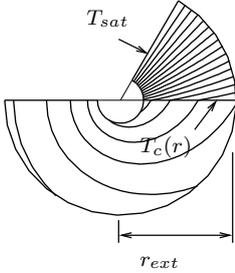
$$\Lambda(\lambda, \theta_i) \hat{=} \operatorname{tg} \lambda \theta_i \operatorname{tg} \lambda \pi - \frac{k_l}{k_s} \quad (2.30)$$

Le facteur λ est compris entre 0 et 0.5. Si le rapport de conductivité k_l/k_s est très petit devant 1 et l'angle de contact supérieur à quelques degrés, ce paramètre est

proche de 0. Une bonne approximation de λ est alors fournie par l'expression suivante :

$$\frac{k_l}{k_s \theta_i} \ll 1 \Rightarrow \lambda \simeq \sqrt{\frac{k_l}{k_s \theta_i \pi}} \quad (2.31)$$

Une étude de la précision de cette approximation et des expressions plus générales utiles pour la mise en œuvre du modèle sont proposées dans l'annexe A.2.1. La figure ci-contre représente les isovaleurs du champ de température typique dans le solide et le liquide. La température varie linéairement par rapport à θ dans le liquide. Dans la paroi, elle est pratiquement constante sur des arcs de cercles centrés autour de la ligne de contact. La température à la surface de la paroi au contact du liquide s'écrit :



$$T_s(s) = T_{sat} + (T_s(s_{ext}) - T_{sat}) \left(\frac{s}{s_{ext}} \right)^\lambda \quad (2.32)$$

L'intégrale du flux de chaleur à l'interface liquide-vapeur entre les abscisses s_R et s_{ext} s'écrit :

$$\int_{s_R}^{s_{ext}} q(s) ds = (T_s(s_{ext}) - T_{sat}) \frac{k_l}{\sin(\lambda \theta_i)} \underbrace{\left(1 - \left(\frac{s_R}{s_{ext}} \right)^\lambda \right)}_{\doteq \beta} \quad (2.33)$$

Le dernier terme β de cette expression est un facteur compris entre 0 et 1. Le flux de chaleur vers les petites échelles ne peut excéder la valeur maximale obtenue lorsque $\beta = 1$. Si le flux de chaleur est « coupé » à une échelle $s_R > 0$ (par exemple par la résistance d'interface) le flux total n'est qu'une fraction du flux maximal. En pratique, le rapport d'échelles s_R/s_{ext} est rarement inférieur à 10^{-6} (c'est le rapport entre l'échelle de coupure de la résistance d'interface et l'échelle macroscopique du système) et est plus souvent de l'ordre de 10^{-2} à 10^{-5} . On peut donc trouver les deux cas extrêmes suivants :

- si le rapport de conductivité est très grand (paroi métallique de forte conductivité thermique), la puissance λ est proche de 0, le terme β est proche de 0 et seule une faible fraction du flux de chaleur maximal est atteinte. Le flux à la ligne de contact est alors limité par l'échelle de coupure s_R
- si le rapport de conductivité est faible ou l'angle de contact vraiment petit, le terme β est proche de 1 et le flux de chaleur n'est pas limité par l'échelle de coupure mais par la conductivité thermique de la paroi.

Par exemple, considérons de l'eau sur un acier ($k_l = 15 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$) avec un angle de contact de 30° , et de l'eau sur du cuivre ($k_l = 300 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$) avec le même angle de contact. Supposons que $s_R = 0.1 \mu\text{m}$ (situation à 1 bar) et $s_{ext} = 1 \text{ mm}$ (goutte posée sur une plaque). Le paramètre λ vaut respectivement 0.16 et 0.037. Le paramètre β vaut alors 0.77 pour l'acier et 0.28 pour le cuivre. Le flux de chaleur est donc plutôt limité par la conductivité thermique de la paroi dans le cas de l'acier alors qu'il est plutôt limité par la résistance d'interface dans le cas du cuivre.

Une autre conclusion importante est que quelles que soient les conditions aux limites précises du champ de température à l'extérieur et à l'intérieur, le flux de chaleur et le champ de température à l'intérieur ne sont affectés qu'à proximité de ces bords du domaine. En particulier, les détails précis du transfert de chaleur aux échelles inférieures à s_R n'affectent pas le flux de chaleur au cœur du domaine conductif.

Adimensionnalisation des grandeurs

La distance s à la ligne de contact est adimensionnalisée par l'échelle macroscopique s_{ext} :

$$\tilde{s} \hat{=} \frac{s}{s_{ext}} \quad (2.34)$$

Le choix d'une expression de la température adimensionnelle \tilde{T} s'impose dans ce cas :

$$\tilde{T} \hat{=} \frac{T - T_{sat}}{T_s(s_{ext}) - T_{sat}} \quad (2.35)$$

On adimensionnalise le flux de chaleur \dot{q} par le flux $\dot{q}_{car.}$ traversant une épaisseur s_{ext} de fluide sous une différence de température $T_s(s_{ext}) - T_{sat}$. Le flux adimensionnel à l'échelle s_{ext} est alors voisin de 1 à l'angle de contact près :

$$\tilde{q} \hat{=} \frac{\dot{q}}{\dot{q}_{car.}}, \quad \dot{q}_{car.} \hat{=} (T_s(s_{ext}) - T_{sat}) \frac{k_l}{s_{ext}} \quad (2.36)$$

Enfin, on adimensionnalise le flux de chaleur intégré Q par l'intégrale du flux caractéristique $\dot{q}_{car.}$ sur une distance s_{ext} et sur une longueur de ligne de contact de 1 m :

$$\tilde{Q} \hat{=} \frac{Q}{\dot{q}_{car.} s_{ext}} \quad (2.37)$$

On a alors la relation suivante :

$$Q = \int_{s_1}^{s_2} \dot{q}(s) ds \Rightarrow \tilde{Q} = \int_{\tilde{s}_1}^{\tilde{s}_2} \tilde{q}(s) ds \quad (2.38)$$

Avec ces grandeurs adimensionnelles, la température à la paroi, le flux de chaleur et l'intégrale du flux de chaleur prennent la forme suivante

$$\tilde{T}(\tilde{s}) = \tilde{s}^\lambda, \quad \lambda \simeq \sqrt{\frac{k_l}{k_s \theta_i \pi}} \quad (2.39)$$

$$\tilde{q}(\tilde{s}) = \frac{\lambda \tilde{s}^{\lambda-1}}{\sin(\lambda \theta_i)} \simeq \frac{\tilde{s}^{\lambda-1}}{\theta_i} \quad (2.40)$$

$$\tilde{Q} = \frac{\beta}{\sin(\lambda \theta_i)} \simeq \frac{\beta}{\lambda \theta_i}, \quad \beta \hat{=} 1 - \left(\frac{s_R}{s_{ext}} \right)^\lambda \quad (2.41)$$

où les équivalents sont valables lorsque le rapport de conductivité k_l/k_s tend vers zéro.

Présentation des graphiques en échelle semi-logarithmique

Une représentation graphique du flux de chaleur en fonction des différentes échelles paraît indispensable. On peut envisager de tracer le flux en fonction de l'abscisse en échelle logarithmique, mais cette représentation ne permet pas de visualiser d'un seul coup d'œil le flux de chaleur total.

Comme la dynamique des valeurs de l'abscisse s est très élevée l'axe des abscisses porte la distance adimensionnelle \tilde{s} en échelle logarithmique. En ordonnées, on porte l'intensité du flux thermique. En échelle linéaire, l'intégrale du flux serait égale à l'aire de la surface située sous la courbe $\dot{q}(s)$. Cette propriété visuelle est très intéressante et on voudrait la retrouver sur notre représentation en échelle logarithmique. Autrement dit, si on appelle \tilde{q} la grandeur représentée en ordonnées, on veut que l'aire située sous la courbe entre deux abscisses s_1 et s_2

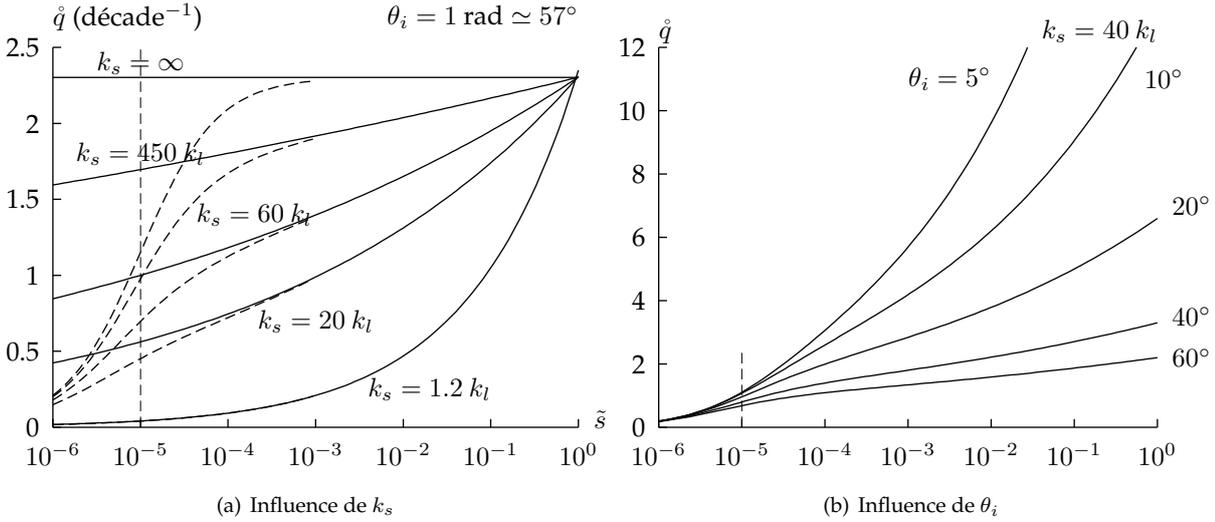


Figure 2.6 – Répartition du flux de chaleur adimensionnel entre les différentes échelles dans le modèle de conduction pure. À gauche, les courbes correspondent à différentes valeurs de la conductivité thermique de la paroi. Les rapports de conductivités choisis sont représentatifs de l’eau à 100°C ($k_l = 0.677 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$) sur une paroi de conductivité infinie, du cuivre, un acier, un acier inoxydable et un verre. À droite, les courbes correspondent à différentes valeurs de l’angle de contact. Les courbes en trait plein correspondent à un problème où la résistance d’interface est négligeable. Les courbes en pointillés représentent la solution en présence d’une résistance d’interface R_i : nous avons défini en 2.2.1 l’échelle s_R de coupure à partir de laquelle le transfert de chaleur est limité par la résistance d’interface. Dans cet exemple, la longueur de coupure adimensionnalisée par s_{ext} est égale à $s_R/s_{ext} = 10^{-5}$ (concrètement, ces grandeurs pourraient correspondre à une goutte d’eau de quelques mm de diamètre à pression atmosphérique). Ce graphique montre que la contribution des échelles inférieures à s_R est faible en comparaison de la contribution des échelles supérieures. C’est pourquoi on dit que s_R est une échelle de coupure du flux de chaleur.

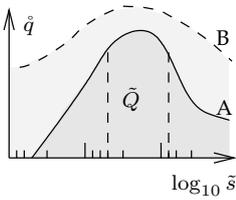
soit égale à l’intégrale du flux sur cet intervalle :

$$\tilde{Q} = \int_{\tilde{s}_1}^{\tilde{s}_2} \tilde{q}(s) ds = \int_{\log_{10} \tilde{s}_1}^{\log_{10} \tilde{s}_2} \tilde{q}(s) d(\log_{10} s) \tag{2.42}$$

Pour que cette propriété soit vérifiée, la grandeur \tilde{q} à tracer doit être égale à :

$$\tilde{q}(s) \doteq \tilde{q} \tilde{s} \ln 10 \tag{2.43}$$

L’axe vertical est alors gradué en décade^{-1} .



La figure ci-contre illustre ce principe. L’aire située sous les courbes A et B est proportionnelle à l’intégrale du flux de chaleur. Dans cet exemple, on voit au premier coup d’œil que la contribution majoritaire au flux de chaleur global vient des échelles intermédiaires (entre les deux segments verticaux), et que le flux total représenté par la courbe B est environ deux fois plus élevé que le flux représenté par la courbe A.

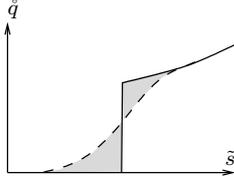
Application au régime conductif intermédiaire

La figure 2.6(a) représente les profils de répartition de flux pour différents rapports de conductivité k_l/k_s , alors que l’angle de contact est fixé.

Comme on peut s’y attendre, le flux total représenté par l’aire de la courbe croît avec la conductivité thermique de la paroi. Si la conductivité thermique de la paroi très grande devant celle du liquide, la courbe est pratiquement de hauteur constante, signe que toutes les échelles ont la même contribution au flux de chaleur total. Le flux varie comme $s^{\lambda-1}$ avec $\lambda - 1 \simeq -1$, qui correspond à la plus forte singularité possible. Lorsque le rapport de conductivité est plus proche de 1

au contraire, la température de la paroi diminue très rapidement à petite échelle et la contribution des petites échelles au flux de chaleur total est négligeable. La singularité du flux de chaleur est la plus faible, le flux de chaleur local varie alors comme $s^{\lambda-1}$ avec $\lambda - 1 \simeq -0.5$.

La figure 2.6(b) montre l'effet d'une variation de l'angle de contact sur le transfert de chaleur. Aux petits angles, le paramètre λ augmente. La singularité du flux de chaleur devient moins prononcée et la contribution relative des petites échelles devient plus faible. En revanche, comme l'épaisseur de liquide diminue aussi, le flux de chaleur local comme le flux total augmentent. La singularité du flux de chaleur est donc la plus forte aux grands angles, mais le flux de chaleur global reste le plus élevé lorsque l'angle de contact est petit.



Le calcul exact de la contribution des échelles $s < s_R$ où la résistance d'interface domine la résistance thermique du liquide n'est pas nécessaire : la contribution de ces échelles est compensée par la baisse progressive du flux de chaleur aux échelles juste supérieures à s_R (voir figure ci-contre). Par conséquent, une bonne approximation du flux total est obtenue avec l'équation 2.41 où le flux est tronqué à l'échelle s_R .

Prise en compte de l'angle de contact dynamique

D'après le modèle de Dussan étudié en 2.1, le déplacement de la ligne de contact produit une variation de l'angle de contact en fonction de l'abscisse s . Au premier ordre par rapport à la vitesse de déplacement, l'angle de contact varie comme le logarithme de l'abscisse s (voir figure 2.1(c)).

Par ailleurs, si le rapport de conductivité k_l/k_s est faible, le flux de chaleur est régulièrement réparti sur l'ensemble des échelles (la grandeur \dot{q} est de l'ordre de 1). On propose donc d'utiliser l'angle de contact moyen θ_i évalué à la moyenne géométrique des échelles s_R et s_{ext} , et de calculer le flux par l'approximation suivante

$$\tilde{Q} \simeq \frac{\beta}{\lambda \theta_m}, \quad \beta \doteq 1 - \left(\frac{s_R}{s_{ext}} \right)^\lambda, \quad \theta_m \doteq \theta_i(\sqrt{s_R s_{ext}}) \quad (2.44)$$

où l'angle θ_i est obtenu par l'expression 2.16.

Cette expression n'est pas très précise si l'angle de contact varie beaucoup entre les échelles s_R et s_{ext} , c'est-à-dire pour des nombres de capillarité élevés. Nous savons par ailleurs que la taille du domaine conducteur s_{pe}/s_R est très réduite de même que la contribution de ces échelles au flux de chaleur total. Ainsi, l'utilisation d'une expression plus précise semble inutile.

2.2.3 Domaine convectif

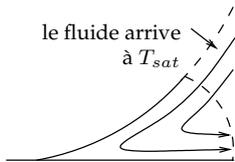
Intéressons-nous maintenant aux échelles $s > s_{pe}$ où les termes convectifs de l'équation de transport de la chaleur sont importants. Dans ce cas, le champ de température devient sensible d'une part au champ de vitesse (et en particulier à la direction du déplacement de la ligne de contact) et d'autre part à la température du liquide lorsqu'il arrive à proximité de la ligne de contact (c'est-à-dire à la configuration du champ de température macroscopique).

Hypothèse sur le champ de vitesse près de la ligne de contact

Si le nombre de Reynolds local n'est pas trop élevé (par exemple inférieur à quelques dizaines pour un film de liquide en paroi) l'écoulement à proximité des lignes de contact est laminaire. Les particules de fluides proches de l'interface

liquide vapeur ou de la paroi se déplacent le long de ces frontières, quelle que soit la forme de l'interface liquide-vapeur. De plus, seule une couche limite de fluide située à proximité des interfaces est affectée par le transfert de chaleur aux interfaces. On peut donc en conclure que le flux de chaleur aux interfaces est complètement découplé de la géométrie de l'interface liquide-vapeur. En particulier il ne dépend plus de l'angle de contact θ_i .

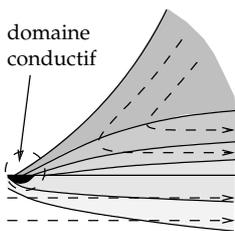
Transfert de masse et de chaleur à l'avancée de la ligne de contact



Supposons que la ligne de contact avance le long de la paroi. Dans le référentiel associé à la ligne de contact, les particules de fluide arrivent à proximité de la ligne de contact en longeant l'interface liquide-vapeur et la quittent en longeant la paroi.

La température du fluide à la ligne de contact dépend maintenant de sa température à son arrivée dans le domaine, et nous devons pour cela faire une hypothèse sur l'écoulement extérieur. Nous proposons d'appliquer le raisonnement heuristique suivant :

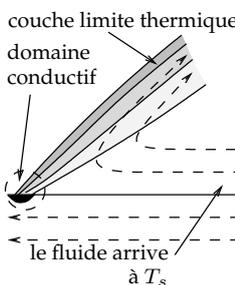
Si l'écoulement est laminaire, les particules de fluides qui arrivent en longeant l'interface liquide-vapeur ont été proches de cette interface pendant une durée au moins égale au temps qu'il leur faudra pour passer la ligne de contact. Elles sont donc à l'équilibre thermique avec cette interface à leur entrée dans le domaine.



Ainsi, à l'avancée de la ligne de contact, on suppose que la température du fluide à l'entrée du domaine est égale à la température de saturation. Comme l'interface liquide-vapeur impose toujours $T = T_{sat}$, le fluide n'échange pas de chaleur avec cette interface. *Le flux de masse et de chaleur à l'interface liquide-vapeur est donc nul dans toute la région convective.*

Lorsque ce même liquide repart le long de la paroi, il se réchauffe progressivement selon un profil de couche limite. Le gradient de température dans le liquide est alors bien plus élevé que si le liquide était au repos. Ainsi, *le flux de chaleur à la paroi est beaucoup plus élevé que pour une ligne de contact statique.* D'autre part, une couche limite symétrique se développe dans la paroi sous l'effet du passage de la ligne de contact et du refroidissement soudain.

Recul de la ligne de contact



Au recul, le liquide entre dans le domaine le long de la paroi et en ressort le long de l'interface liquide-vapeur. Si on fait la même hypothèse que précédemment, la température du liquide à l'entrée du domaine est égale à la température de la paroi, et le liquide conserve cette température jusqu'à son passage à la ligne de contact. *Le flux de chaleur à la paroi est nul.*

Une fois que le fluide longe l'interface liquide-vapeur, il se refroidit à son contact. Le champ de température dans le liquide prend la forme d'une couche limite thermique à l'interface liquide-vapeur. Cette fois, *le flux de masse et de chaleur dans le domaine convectif est très supérieur à celui d'une ligne de contact statique.*

Modélisation

Dans le modèle, on suppose que le flux de chaleur est nul à l'interface où le liquide entre dans le domaine. Pour obtenir le flux sur l'autre interface, nous supposons que la vitesse est localement uniforme près des interfaces.

La vitesse du liquide à la paroi est égale à v_s (vitesse de la paroi dans le repère attaché à la ligne de contact) et la vitesse v_i du liquide à l'interface liquide-vapeur

est donnée par l'équation B.56 :

$$v_i = -v_s \frac{\theta_i \cos \theta_i - \sin \theta_i}{\sin \theta_i \cos \theta_i - \theta_i} \quad (2.45)$$

Par exemple, pour de petits angles de contact, on a

$$v_i \simeq -\frac{1}{2}v_s \quad (2.46)$$

et cette vitesse diminue jusqu'à $v_i = -v_s$ lorsque l'angle de contact est égal à π .

Pour une vitesse $v_s < 0$ (recul), on suppose que le liquide initialement à température uniforme $T = T_s$ est mis en contact à l'abscisse $s = s_0$ avec l'interface à température T_{sat} . La température dans la couche limite thermique à l'interface liquide-vapeur est donnée par l'expression classique du transfert instationnaire dans un solide initialement isotherme mis en contact avec un thermostat (voir par exemple [49])

$$\frac{T(\delta, t) - T_{sat}}{T_s - T_{sat}} = \operatorname{erf} \left(\frac{\delta}{2\sqrt{\alpha_l t}} \right) \quad (2.47)$$

où δ est la distance à l'interface et t le temps depuis lequel le liquide est en contact avec le thermostat. Le temps t est lié à l'abscisse s par la relations $s - s_0 = v_i t$, d'où :

$$\tilde{T} = \frac{T(\delta, t) - T_{sat}}{T_s - T_{sat}} = \operatorname{erf} \left(\frac{\delta\sqrt{v_i}}{2\sqrt{\alpha_l (s - s_0)}} \right) \quad (2.48)$$

Enfin, le flux de chaleur lors du recul de la ligne de contact s'écrit :

$$\dot{q}(s) = k_l \frac{\partial}{\partial \delta} T = k_l (T_s - T_{sat}) \sqrt{\frac{v_i}{\pi \alpha_l (s - s_0)}} \quad (2.49)$$

On écrit maintenant ce flux en variables adimensionnelles telles qu'elles sont définies en 2.2.2. Les longueurs s sont adimensionnalisées par l'échelle de transition s_{pe} . On a :

$$\tilde{q}(\tilde{s}) = \frac{\dot{q}}{\dot{q}_{car.}} = \sqrt{\left| \frac{v_i}{\pi v_s} \right|} \frac{1}{\theta_i \sqrt{\tilde{s} - \tilde{s}_0}}, \quad \text{avec } 0.5 < \left| \frac{v_i}{\pi v_s} \right| < 1 \quad (2.50)$$

L'origine s_0 de la couche limite est choisie de telle sorte que le flux de chaleur \dot{q} soit continu à l'échelle de couplage s_{pe} . Si le paramètre λ est petit, on a :

$$\tilde{s}_0 \simeq 1 - \left| \frac{v_i}{\pi v_s} \right| \quad (2.51)$$

Si la ligne de contact avance, la température de la paroi sous le liquide est constante (elle ne dépend pas de la distance à la ligne de contact) et sa valeur s'écrit

$$T_{sl} = \frac{T_{sat} k_l \sqrt{\alpha_s} + T_{ext} k_s \sqrt{\alpha_l}}{k_l \sqrt{\alpha_s} + k_s \sqrt{\alpha_l}} \quad (2.52)$$

où T_{ext} est la température de la paroi à l'extérieur des couches limites thermiques (température de la paroi avant le passage de la ligne de contact). Le flux de chaleur à l'interface solide-liquide est donné par l'expression suivante :

$$\dot{q}(s) = k_l (T - T_{sat}) \sqrt{\frac{v_s}{\pi \alpha_l (s - s_0)}} \quad (2.53)$$

Le raccord de la solution du problème en régime convectif avec la solution du problème en régime conductif est simple dans le cas d'un recul de la ligne de

contact : la température caractéristique de la paroi à l'échelle de couplage est égale à la température de la paroi avant le passage de la ligne de contact.

Si la ligne de contact avance, la température caractéristique est plus difficile à déterminer. On montre en annexe A.2.1 que le flux de chaleur à petite échelle n'est sensible qu'à une moyenne de la température dans la paroi. Cette moyenne est à prendre sur un cercle de rayon s_{Pe} (échelle de raccordement des deux domaines) centré sur la ligne de contact. Pour cette raison, nous proposons d'utiliser la température moyenne entre l'avant et l'arrière de la ligne de contact : à l'avant, la température est égale à la température initiale T_{ext} de la paroi, et à l'arrière de la ligne de contact, elle est égale à la température T_{sl} . On estime donc la température à l'échelle de couplage s_{Pe} par l'expression suivante :

$$T_s(s_{Pe}) = \frac{1}{2} (T_{ext} + T_{sl}) \quad (2.54)$$

Discussion

Ce modèle simplifié fournit un ordre de grandeur du flux de chaleur à l'interface liquide-vapeur et à la paroi. Le résultat essentiel est la dissymétrie du transfert de chaleur en fonction de la direction du déplacement :

- à l'avancée, un flux élevé passe de la paroi au liquide et l'évaporation est négligeable,
- au recul, le flux de chaleur à la paroi est négligeable et le flux de masse et de chaleur à l'interface est nettement augmenté.

Si on calcule la contribution $\dot{q} \sim \tilde{q} \tilde{s}$ des différentes échelles, celle-ci varie comme $\sqrt{\tilde{s}}$. Elle augmente donc à grande échelle, ce qui signifie que la contribution des petites échelles au flux de chaleur global est négligeable.

	k	α	\tilde{T}
cuivre	380	$11.6 \cdot 10^{-5}$	0.952
acier	40	$1.25 \cdot 10^{-5}$	0.87
inox	15	$0.44 \cdot 10^{-5}$	0.81
verre	1.3	$7.8 \cdot 10^{-7}$	0.47
eau	0.68	$1.7 \cdot 10^{-7}$	

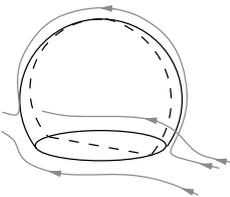
$$\tilde{T} = (T_{sl} - T_{sat}) / (T_{ext} - T_{sat})$$

Pour les liquides usuels et des parois métalliques, la température T_{sl} est peu différente de la température initiale de la paroi. On peut illustrer cette différence pour de l'eau à 1 bar sur trois matériaux courants : le cuivre, l'acier inoxydable et le verre. Les valeurs obtenues sont représentées ci-contre.

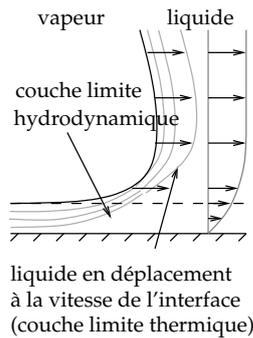
Pour le cuivre, la variation de température de surface atteint 5% de la surchauffe initiale : la température de paroi varie très peu. L'acier inoxydable, qui conduit particulièrement mal la chaleur, voit sa température de surchauffe en surface baisser de 20% au passage de la ligne de contact, variation qui reste relativement modeste.

Le domaine d'application de ce modèle simplifié est relativement réduit. La principale limitation tient à l'influence des termes convectifs dans l'équation de quantité de mouvement. La valeur du nombre de Prandtl $Pr = Pe/Re$ des liquides non métalliques courants est comprise entre 1 et 10. Ainsi, lorsque la valeur du nombre de Péclet est supérieure à 10, celle du nombre de Reynolds est supérieure à 1 et le système d'équations de Stokes ne décrit plus correctement le champ de vitesse. On peut s'attendre à deux effets des termes convectifs :

- d'une part, la vitesse du liquide à l'interface liquide-vapeur est sans doute plus proche de v_s que de $1/2 v_s$,
- d'autre part, si l'écoulement macroscopique n'est pas perpendiculaire à la ligne de contact (hypothèse du modèle bidimensionnel), la configuration macroscopique des interfaces dans la direction transverse doit être prise en compte. Si on considère par exemple une bulle de vapeur glissant sur une paroi, le modèle n'est strictement applicable que dans le plan où la ligne de contact est perpendiculaire à la direction du déplacement (pointillés sur l'illustration ci-contre).



Enfin, s'il ne fait aucun doute que l'avancée d'un ménisque peut se produire dans les conditions décrites par le modèle (c'est le cas fréquent du mouillage d'une paroi), il n'est pas évident que le cas inverse puisse se produire. Nous savons en effet que les grandes vitesses de recul produisent un film en paroi dès les plus faibles vitesses, et ce d'autant plus facilement que l'angle de recul est petit. Dans ce cas, il n'existe plus de ligne de contact. D'après le modèle de Cooper et Loyd [14], l'épaisseur du film de liquide qui se forme est du même ordre de grandeur que l'épaisseur de la couche limite hydrodynamique. Cette couche limite est formée de liquide dont la vitesse est proche de la vitesse de la paroi. Toujours d'après Cooper, le liquide qui n'est pas entraîné dans le film se déplace à la vitesse de l'interface liquide-vapeur. Comme il est stationnaire par rapport à celle-ci, la couche limite initialement formée s'épaissit et le flux de chaleur à l'interface liquide-vapeur diminue avec le temps.

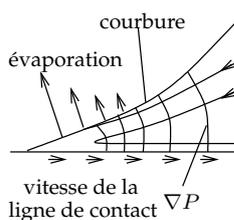


La figure ci-contre illustre le mécanisme proposé par Cooper et Loyd pour décrire la croissance rapide d'une bulle de vapeur près d'une paroi. On y a ajouté une représentation du champ de température dans le liquide. La couche limite thermique située dans le film est stationnaire si on l'observe dans le référentiel mobile attaché à l'interface en mouvement. En revanche, la couche limite située à l'extérieur du film se déplace à la vitesse de l'interface : le liquide est au repos dans ce référentiel et le flux de chaleur diminue avec le temps. Remarquons que l'épaisseur de la couche limite hydrodynamique dépend de l'histoire du déplacement du fluide avant le passage des interfaces. L'épaisseur du film ne dépend donc pas seulement de la vitesse instantanée des interfaces.

Les conclusions de cette discussion sur le domaine convectif sont similaires à celles que nous avons formulées lors de l'étude du champ de vitesse et du profil d'interface : la non-linéarité des équations et la sensibilité du système aux conditions extérieures et à l'histoire du système rendent la modélisation compliquée. En particulier, il n'est pas possible de raccorder les lignes de contact au problème extérieur à l'aide d'un nombre réduit de paramètres, comme c'est le cas dans le domaine conductif. On est capable de prédire qualitativement certains phénomènes mais un calcul du problème complet semble nécessaire pour décrire correctement la ligne de contact.

2.3 Hydrodynamique et transfert de chaleur dans la micro-région

Dans les parties précédentes, nous avons étudié le transfert de chaleur à la ligne de contact en supposant que l'interface liquide-vapeur est une condition aux limites de température imposée (à savoir $T = T_{sat}$) et que la chaleur se propage selon la loi de Fourier. Aux petites échelles, plusieurs phénomènes viennent compliquer le modèle. Nous avons déjà mentionné la résistance d'interface, qui a pour effet de limiter le flux de masse et de chaleur à l'interface (voir le paragraphe 1.1.2). Parmi les autres effets, on peut citer l'influence de la courbure de l'interface et des forces intermoléculaires sur la pression de saturation et la pression de recul (voir 1.2.2).



On appelle «micro-région» la région proche des lignes de contact où ces effets sont prépondérants. Elle est caractérisée par un couplage fort entre le flux de masse et de chaleur à l'interface liquide-vapeur et l'hydrodynamique. L'évaporation très rapide du liquide à ces échelles produit un écoulement de liquide le long de la paroi. Le liquide s'écoule sous l'effet d'un gradient de pression. Enfin, la relation de Laplace relie la pression à la courbure de l'interface. Le couplage entre le flux de chaleur et l'écoulement de liquide conduit ainsi à une forte courbure de l'interface à petite échelle. À l'échelle macroscopique, il se traduit par une augmentation de l'angle de contact avec la température de la paroi. La modélisation

de la micro-région a pour but d'obtenir une relation $\theta_{macro} = f(T_s - T_{sat})$ entre l'angle de contact macroscopique et la surchauffe de la paroi.

Notre approche est une extension des travaux de Wayner et Coccio [89] et de Stephan [78]. Ces modèles prennent la forme d'un système d'équations différentielles non linéaires relativement complexe. L'utilisation de ces modèles passe traditionnellement par la construction d'une méthode numérique de résolution des équations [78]. Cette étape n'est pas triviale et quelques éléments importants sont détaillés dans l'annexe C. Cependant, si l'on accepte certaines simplifications du modèle, il est possible d'obtenir une corrélation relativement précise de l'angle de contact macroscopique. À partir d'un nombre de capillarité Ca_q particulier, on peut montrer que l'angle de contact varie comme $Ca_q^{1/4}$.

La plupart des résultats obtenus dans cette partie sont démontrés par Morris [60]. En particulier, il donne une expression équivalente de l'angle de contact et montre que le rôle des phénomènes intermoléculaire est secondaire dans la détermination de l'angle de contact macroscopique. Il remplace pour cela les forces d'adhésion par une condition de glissement à la paroi.

2.3.1 Modélisation de la micro-région

L'approche traditionnelle initiée par Wayner et Coccio [89] est fondée sur les forces intermoléculaires à longue portée. Celles-ci jouent le rôle d'une échelle de coupure pour la mécanique des milieux continus. En effet, tout comme pour la dynamique de la ligne de contact, l'écoulement du liquide à petite échelle lié à l'évaporation conduit à une courbure non intégrable et à un angle de contact indéterminé. Pour que l'angle de contact prenne une valeur finie, il faut obligatoirement introduire une échelle de coupure. On a pour cela différentes possibilités :

- soit on suppose qu'il existe une échelle de coupure hydrodynamique, en dessous de laquelle les contraintes visqueuses n'ont plus d'effet (une sorte de glissement du fluide à la paroi comme dans le modèle de Dussan),
- soit on suppose qu'il existe une échelle de coupure pour le flux de masse et de chaleur à petite échelle. La résistance d'interface introduit une première échelle de coupure, en dessous de laquelle le flux de chaleur n'augmente plus. Il faut donc introduire une deuxième échelle de coupure en dessous de laquelle le flux de masse et de chaleur diminue. En pratique, le flux diminue sous l'effet d'une augmentation de la température de saturation locale (soit à cause de la courbure très forte de l'interface, soit à cause des forces intermoléculaires à longue portée). En dessous d'une échelle de coupure $l_{T_{sat}}$, la température de saturation augmente jusqu'à la température de la paroi et le flux de chaleur de masse s'annule.

Les modèles de fluides parfaitement mouillants

Si on suppose que la valeur de la constante de Hamaker du couple paroi-fluide est positive, on obtient simultanément ces deux échelles de coupure. En effet, nous avons vu en 1.2.1 que les forces intermoléculaires ont pour effet d'augmenter localement la température d'équilibre thermodynamique d'une interface liquide-vapeur à pression de vapeur fixée. La température de saturation augmente d'autant plus que l'épaisseur du film de liquide est plus petite. Ainsi, pour une température de paroi et une pression de vapeur fixée, il existe une valeur d'équilibre de l'épaisseur δ_{adh} du film telle que ce dernier soit à l'équilibre thermodynamique. Si on appelle P_v la pression de la vapeur loin du film et T_{sat} la température de saturation correspondant à cette pression, la température d'équilibre du film $T_{sat,local}$ s'exprime en fonction de son épaisseur δ et des paramètres

physiques de la façon suivante (c'est une application de l'équation 1.60) :

$$T_{sat,local} = T_{sat} \left(1 + \frac{A}{\rho_l \mathcal{L} \delta^3} \right) \quad (2.55)$$

On en déduit la valeur de l'épaisseur δ_{adh} d'équilibre du film pour une température de paroi T_s imposée :

$$\delta_{adh} = \left(\frac{T_{sat}}{T_s - T_{sat}} \frac{A}{\rho_l \mathcal{L}} \right)^{1/3} \quad (2.56)$$

La constante de Hamaker vaut typiquement 2 zJ (soit $2 \cdot 10^{-21}$ J, voir [39]). L'épaisseur des films de liquide est donc comprise entre 0.1 et quelques dizaines de nm si la surchauffe de la paroi est comprise entre une fraction de K et quelques dizaines de K.

Wayner et Coccio ont construit un système d'équations qui décrit le transfert de masse et de chaleur et l'écoulement de liquide en tenant compte des forces intermoléculaires. Ce système est décrit et interprété en annexe C.1 sous une forme un peu différente à partir des travaux de Stephan [78]. Wayner et Coccio ont remarqué que l'on peut trouver un profil de l'interface liquide-vapeur qui démarre à la paroi par un film de liquide d'épaisseur δ_{adh} où le flux de masse et de chaleur est nul, et dont l'épaisseur et l'angle de contact augmentent progressivement pour se raccorder à une interface plane à l'échelle macroscopique. De plus, ce profil n'existe que pour un angle de contact bien précis qui dépend de la température de la paroi.

Le système d'équations à résoudre est non linéaire et fortement couplé, si bien qu'il est difficile d'obtenir des résultats analytiques sur l'angle de contact. De plus, les forces intermoléculaires semblent jouer un rôle fondamental dans la détermination de l'angle de contact macroscopique. Ce modèle est habituellement résolu à l'aide d'une méthode numérique.

Il est très facile d'étendre ce modèle au cas d'une ligne de contact dynamique. Le film adsorbé joue en effet le rôle d'une échelle de coupure de la contrainte visqueuse. Un tel modèle est construit en annexe C.2 et les équations sont rappelées dans le cadre 2.1.

Un modèle de fluide partiellement mouillant

Le modèle proposé par Wayner convient pour beaucoup de fluides à condition que la constante de Hamaker soit positive. Or, il existe aussi un grand nombre de couples fluide-paroi pour lesquels l'angle de contact statique est non nul à la température de saturation et ces fluides ne peuvent pas être décrits par ce type de modèle.

Nous avons donc suivi une autre voie pour décrire le comportement du fluide à petite échelle et utilisé à nouveau le principe de la longueur de glissement. Cette fois, nous n'introduisons explicitement qu'une échelle de coupure hydrodynamique. Le flux de chaleur peut quant à lui rester très important à des échelles plus petites. La construction du modèle est détaillée en C.2.2 et les équations dans le cadre 2.1.

Ce modèle permet de mettre en évidence les grandeurs caractéristiques du problème (échelles de longueur, pression et flux de chaleur caractéristiques). Avec ces grandeurs, il est possible de simplifier le système d'équations et d'obtenir une corrélation relativement précise de l'angle de contact macroscopique en fonction des différents paramètres physiques. Dans la partie suivante, on rappelle et on interprète ces différents résultats.

Les systèmes d'équations du modèle de fluide parfaitement mouillant et du modèle de fluide partiellement mouillant ont la même structure :	$f_V(\theta) \hat{=} \frac{8}{2\theta \cos(2\theta) - \sin(2\theta)} \simeq -\frac{3}{\theta^3} \quad (2.62)$
	$f_v(\theta) \hat{=} \frac{4 \sin(\theta_i)}{2\theta - \sin(2\theta)} \simeq \frac{3}{\theta^3} \quad (2.63)$
$\partial_s x = \cos \theta_i \quad (2.57)$	$c \hat{=} \frac{1}{\sigma} (P_c + P_r - P_d) \quad (2.64)$
$\partial_s y = \sin \theta_i \quad (2.58)$	$P_\sigma \hat{=} \sigma c \quad (\text{relation de Laplace}) \quad (2.65)$
$\partial_s \theta_i = c \quad (2.59)$	$P_r \hat{=} \dot{m}^2 \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) \quad (\text{pression de recul}) \quad (2.66)$
$\partial_s P_c = -\mu_l \left(\underbrace{V \frac{1}{r^3} f_V(\theta_i)}_{\text{évaporation}} + \underbrace{v_s \frac{1}{r^2} f_v(\theta_i)}_{\text{dynamique}} \right) \quad (2.60)$	$P_d \hat{=} \frac{A}{y^3} \quad (\text{pression de disjonction}) \quad (2.67)$
$\partial_s Q = k_l \frac{T_s - T_{sat,local}}{r \theta_i + \delta_R} \quad (2.61)$	$T_{sat,local} \hat{=} T_{sat}(P_v) \left(1 + \frac{P_\sigma + P_d}{\mathcal{L} \rho_l} \right) \quad (2.68)$

(a) Éléments communs aux deux modèles. Ces équations sont construites en annexe C. Petit résumé : les trois premières équations relient le profil $x(s)$, $y(s)$ à la courbure c de l'interface. La courbure c est déduite du saut de pression à l'interface par la relation de Laplace 2.65, la pression de recul 2.66 et la pression de disjonction 2.67. La pression dans la vapeur est supposée constante tandis que la pression dans le liquide évolue en fonction de l'hydrodynamique dans le film de liquide (équation 2.60). La solution de l'équation de Stokes dans un coin d'ouverture θ_i quelconque conduit aux deux expressions 2.62 et 2.63. Lorsque l'angle θ_i est petit, ces expressions se réduisent à l'hypothèse de lubrification et s'écrivent $-3/\theta^3$. Enfin, l'équation 2.61 fournit l'équation d'évolution du flux de chaleur intégré (donc du débit V) en fonction du flux de chaleur local. Cette équation fait intervenir l'épaisseur équivalente de résistance d'interface δ_R et la température de saturation locale $T_{sat,local}$.

Parfaitement mouillant :	Partiellement mouillant :
$r \hat{=} \frac{y}{\sin \theta_i} \quad (2.69)$	$r \hat{=} \frac{y + l_s}{\sin \theta_i} \quad (2.74)$
$V \hat{=} -\frac{Q}{\rho_l \mathcal{L}} + v_s \delta_{adh} \quad (2.70)$	$V \hat{=} -\frac{Q}{\rho_l \mathcal{L}} \quad (2.75)$
$A > 0 \quad (2.71)$	$A \hat{=} 0 \quad (2.76)$
$\lim_{s \rightarrow -\infty} \theta_i = 0 \quad (2.72)$	$\lim_{s \rightarrow 0} \theta_i = \theta_{mic} \quad (2.77)$
$\lim_{s \rightarrow +\infty} P_c = 0 \quad (2.73)$	$\lim_{s \rightarrow 0} P_c = 0 \quad (2.78)$

(b) Relations de fermetures et conditions aux limites spécifiques au modèle de fluide parfaitement mouillant (modèle issu de celui de Stephan).

(c) Relations de fermetures et conditions aux limites spécifiques au modèle de fluide partiellement mouillant.

TAB. 2.1 – Rappel des deux modèles de micro-région proposés. Le premier est issu des travaux de Stephan [78] et adapté pour tenir compte du déplacement de la ligne de contact. Le deuxième, déjà suggéré par Morris [60] est une adaptation de ce modèle à des fluides partiellement mouillants caractérisés par un angle de contact θ_{mic} non nul et une longueur de glissement l_s .

2.3.2 Analyse des modèles de micro-région

Grandeurs caractéristiques

Les deux modèles résumés dans le cadre 2.1 sont en fait très similaires. Les grandeurs caractéristiques qui apparaissent sont :

- l'épaisseur équivalente de résistance d'interface δ_R ,
- l'épaisseur du film adsorbé δ_{adh} ,
- la longueur de glissement l_s .

Le choix de la dimension caractéristique utilisée pour adimensionnaliser les longueurs est très important : on montre en annexe C.2.3 que la dimension caractéristique pertinente du modèle est l'épaisseur équivalente d'interface δ_R .

Les autres grandeurs caractéristiques sont naturellement liées au choix de la longueur caractéristique :

- le flux de chaleur caractéristique

$$\dot{q}_0 \doteq k_l \frac{T_s - T_{sat}}{\delta_R}, \quad (2.79)$$

- la pression caractéristique $P_0 \doteq \frac{\sigma}{\delta_R}$,

- le flux de chaleur caractéristique intégré $Q_0 \doteq \delta_R \dot{q}_0$.

On réalise l'adimensionnalisation du système d'équations des deux modèles en annexe C.2.3. Pour les besoins de l'exposé, on rappelle ici une version simplifiée de ce système (dans l'hypothèse de lubrification) pour un fluide partiellement mouillant. Si les variables sont adimensionnalisées avec les grandeurs définies ci-dessus, le système s'écrit :

$$\begin{aligned} \partial_{\tilde{s}} \tilde{y} &= \theta \\ \partial_{\tilde{s}} \tilde{\theta} &= \tilde{P} + D_1 \tilde{q}^2 \\ \partial_{\tilde{s}} \tilde{P} &= \left(-3 \text{Ca}_q \frac{\tilde{Q}}{(\tilde{y} + D_2)} - 3 \text{Ca}_v \right) \frac{1}{(\tilde{y} + D_2)^2} \\ \partial_{\tilde{s}} \tilde{Q} &= \frac{1 - D_5 \tilde{P}}{\tilde{y} + 1} \end{aligned} \quad (2.80)$$

Les grandeurs adimensionnelles qui apparaissent sont les suivantes :

$$\begin{aligned} D_1 &\doteq \frac{\delta_R \dot{q}_0^2}{\mathcal{L}^2} \frac{\rho_l - \rho_v}{\sigma \rho_l \rho_v} & \text{Ca}_v &\doteq \frac{\mu_l v_s}{\sigma} \\ D_2 &\doteq \frac{l_s}{\delta_R} & D_5 &\doteq \frac{T_{sat}}{T_s - T_{sat}} \frac{\sigma}{\delta_R \rho_l \mathcal{L}} \\ \text{Ca}_q &\doteq \frac{\mu_l v_q}{\sigma}, \quad \text{avec } v_q \doteq \frac{\dot{q}_0}{\rho_l \mathcal{L}} \end{aligned} \quad (2.81)$$

Ces grandeurs adimensionnelles s'interprètent comme suit :

- la grandeur D_1 mesure l'influence de la pression de recul sur la courbure de l'interface,
- la grandeur D_2 mesure l'étendue de la micro-région : l'angle de contact varie fortement entre les deux longueurs caractéristiques dont on fait le rapport,
- la grandeur Ca_q mesure l'influence du transfert de chaleur sur l'angle de contact (c'est un nombre de capillarité calculé en utilisant la vitesse caractéristique $\dot{q}_0/(\rho_l \mathcal{L})$),
- et Ca_v mesure l'influence de la dynamique de la ligne de contact sur cet angle (c'est un nombre de capillarité calculé à partir de la vitesse de la paroi v_s),
- la grandeur D_5 enfin mesure la variation de la température de saturation en fonction de la pression.

Comme la pression \tilde{P} est forte à petite échelle puis diminue, le nombre adimensionnel D_5 n'est important qu'à petite échelle. On montre en annexe C qu'il a pour effet d'introduire une échelle caractéristique supplémentaire dans le système : l'échelle de coupure $l_{T_{sat}}$ en dessous de laquelle la température de saturation locale augmente sous l'effet de la courbure de l'interface et bloque le flux de chaleur. On montre en C.2.4 que cette échelle s'écrit :

$$l_{T_{sat}} \doteq \frac{1}{2} D_5 \sqrt{3 \text{Ca}_q} \delta_R \quad (2.82)$$

L'obtention de ce résultat n'est pas simple et nécessite de connaître *a priori* la solution du système d'équations, en particulier la valeur de la pression adimensionnelle \tilde{P} à petite échelle.

Pour de l'eau à 1 bar, cette longueur caractéristique est de l'ordre de 0.1 nm pour des surchauffes de paroi de l'ordre de 1 K, et elle augmente avec la pression de la vapeur.

Solution approchée du modèle de micro-région

Les expressions fournies ici sont des approximations de la solution du modèle de micro-région. Le détail de leur construction figure en annexe C.2.4. Morris propose une solution très similaire [60].

Dans l'hypothèse où la pression de recul est négligeable, l'angle de contact macroscopique statique s'écrit comme une combinaison de deux angles :

- l'angle de contact microscopique θ_{mic} ,
- l'angle de contact macroscopique $\theta_{macro,0}$ calculé pour $\theta_{mic} = 0$.

Une approximation de cet angle est donnée par l'expression suivante :

$$\theta_{macro,statique} \simeq (\theta_{macro,0}^3 + \theta_{mic}^3)^{1/3} \quad (2.83)$$

L'expression suivante fournit une approximation de l'angle $\theta_{macro,0}$

$$\theta_{macro,0} \simeq (3 Ca_q)^{1/4} \Theta \left(\ln \frac{l_0}{\delta_R} \right) \quad (2.84)$$

avec :

$$l_0 \doteq l_s + l_{T_{sat}} \quad (2.85)$$

$$\Theta(x) \doteq 1.3707 - 0.1720 x - 0.00797 x^2 - 0.000172 x^3$$

La puissance 1/4 du nombre de capillarité Ca_q est une valeur exacte tant que l'on reste dans l'hypothèse de lubrification. L'approximation réside dans la fonction Θ qui est une corrélation et dans la détermination de la longueur caractéristique l_0 .

Cette solution du modèle de micro-région pour un fluide partiellement mouillant s'étend au modèle de Stephan : il faut pour cela appliquer l'approximation avec les paramètres suivants :

$$l_s = 2 \delta_{adh} \quad (2.86)$$

$$\theta_{mic} = 0$$

L'utilisation de l'épaisseur du film adsorbé comme longueur de glissement est tout à fait naturelle. Le facteur 2 peut être interprété ainsi : les forces d'adhésion produisent une véritable longueur de glissement δ_{adh} , mais contribuent aussi à l'augmentation de la température de saturation. Elles conduisent à une deuxième longueur de coupure $l_{T_{sat},adh} = \delta_{adh}$ qui s'ajoute à $l_{T_{sat}}$.

La précision de ces approximations est de $\pm 5\%$ pour le modèle de fluide partiellement mouillant et de $\pm 10\%$ pour le modèle de Stephan (voir figures C.9 et C.10 en annexe). Une restriction très importante concerne l'ordre des longueurs caractéristiques : l'approximation perd toute légitimité si $l_0 > \delta_R$. En pratique, ce cas de figure se présente pourtant dans le modèle de Stephan, lorsque la pression de la vapeur est très grande (quelques MPa) et la température de surchauffe très faible. Dans ce cas, l'épaisseur δ_{adh} du film adsorbé devient très supérieure à l'épaisseur équivalente de résistance d'interface δ_R . Toutefois, les calculs réalisés avec de l'eau à 140 bar ou de l'ammoniac à 20 bar montrent que l'approximation donne encore le bon résultat à 10% près. Il ne faut pas oublier non plus que les équations du modèle perdent elles-aussi leur précision à haute pression en raison de la viscosité croissante de la vapeur.

Pour finir, remarquons que pour un fluide donné et à pression de vapeur imposée, on peut facilement mettre en évidence l'évolution de l'angle de contact statique avec la température de la paroi (voir annexe C.2.4) :

– Pour un fluide partiellement mouillant, on a :

$$\theta_{macro,statique} \simeq (\theta_{macro,0}^3 + \theta_{mic}^3)^{1/3}, \quad \text{avec } \theta_{macro,0} = \theta_0 \left(\frac{T_s - T_{sat}}{1 \text{ K}} \right)^{1/4} \quad (2.87)$$

– Pour un fluide parfaitement mouillant, on a :

$$\theta_{macro,statique} \simeq \theta_0 \left(\frac{T_s - T_{sat}}{1 \text{ K}} \right)^p, \quad \text{avec } p \simeq 0.3 \quad (2.88)$$

où θ_0 est un angle caractéristique calculé pour une surchauffe de 1 K.

Pour presque tous les fluides, l'angle caractéristique θ_0 est compris entre 10 et 30°. Comme l'angle $\theta_{macro,statique}$ varie comme la racine quatrième de la température de surchauffe, l'angle macroscopique issu de ce modèle est le plus souvent compris entre 5° et 60°. En effet, on s'attend à observer rarement des surchauffes de paroi très faibles (de plus les fluctuations de températures supérieures à la valeur moyenne de la surchauffe rendent ce modèle stationnaire non applicable). À l'autre extrémité de l'échelle, au-delà de quelques dizaines de K de surchauffe, le liquide devient très instable et la pression de recul devient prépondérante. On ne s'attend donc pas à trouver un ménisque de liquide dans un état stationnaire à ces niveaux de température.

2.4 Couplage entre la dynamique et le transfert de chaleur

2.4.1 Dynamique de la ligne de contact

Jusqu'ici, nous n'avons considéré le modèle de micro-région que dans le cadre de lignes de contact statiques. Les remarques suivantes permettent de décrire le comportement dynamique de la ligne de contact sous certaines hypothèses.

Vitesse limite de démouillage

Dans le modèle de micro-région, l'angle de contact est affecté à la fois par le débit singulier et par la vitesse de déplacement de la ligne de contact. D'après le modèle de transfert de chaleur dans le domaine conducteur, à grande échelle $s > \delta_R$, le débit linéique V augmente au plus comme $\ln s$ pour une paroi de très forte conductivité thermique. Le terme v_s/r^2 de l'équation 2.60 est donc dominant à grande échelle. À une échelle intermédiaire $l_s < s < \delta_R$ où la température de saturation locale n'est pas trop affectée par la courbure, le flux de chaleur est constant, limité par la résistance d'interface. Le débit V augmente donc comme r , et les deux termes en V/r^3 et en v_s/r^2 sont comparables. Il existe donc une vitesse caractéristique v_0 limite telle que ces deux termes sont égaux. Si la ligne de contact se déplace à une vitesse inférieure à cette vitesse limite, l'angle de contact dépend nettement de l'hydrodynamique liée à l'évaporation, et donc de la température de la paroi. Si au contraire la ligne de contact se déplace plus rapidement, l'influence de la température de la paroi devient négligeable. Cette vitesse est typiquement de quelques centimètres par seconde.

Cette remarque permet de prévoir l'amplitude de la vitesse maximale de démouillage sur une paroi chaude pour un fluide parfaitement mouillant. Si l'angle de contact statique donné par le modèle de Stephan est égal à θ , le débit $V(s)$ dans la micro-région est de l'ordre de :

$$V(s) \simeq \frac{s \dot{q}}{\rho_l \mathcal{L}} = \frac{y k_l (T_s - T_{sat})}{\theta \delta_R \rho_l \mathcal{L}} \quad (2.89)$$

Dans l'hypothèse de lubrification, la vitesse limite est donc de l'ordre de :

$$v_{s,max} \simeq \frac{V}{y} \simeq \frac{k_l (T_s - T_{sat})}{\theta \delta_R \rho_l \mathcal{L}} \quad (2.90)$$

Pour de l'eau à pression atmosphérique un angle de 30° et une surchauffe de paroi de 1 K, la vitesse limite est de 1 cm s^{-1} environ.

Construction d'une corrélation de l'angle de contact dynamique

Si la vitesse de déplacement de la ligne de contact est petite devant la vitesse caractéristique $v_{s,max}$, alors l'angle de contact dans la micro-région n'est que très peu affecté par la dynamique de la ligne de contact. Cette dernière n'a une influence significative qu'à l'extérieur de la micro-région, lorsque $s > s_R$. Dans ce cas, on propose la corrélation suivante de l'angle de contact macroscopique :

$$\theta_{macro} = g^{-1} \left(g(\theta_{macro,statique}) + \text{Ca} \ln \frac{s_{macro}}{s_R} \right) \quad (2.91)$$

Cette corrélation suppose que l'angle de contact à la sortie de la micro-région est indépendant de la vitesse de la ligne de contact. On applique donc la formule de Cox 2.16 entre la sortie de la micro-région s_R et l'échelle macroscopique s_{macro} .

Si au contraire la vitesse de déplacement de la ligne de contact est très supérieure à la vitesse caractéristique $v_{s,max}$, alors la contribution du transfert de masse au champ de vitesse global est partout négligeable. On a :

$$\text{Ca}_q \frac{\tilde{Q}}{(\tilde{y} + D_2)} \ll \text{Ca}_v \quad (2.92)$$

Le système d'équations se réduit alors à celui du modèle de Dussan (équations 2.7), dont la solution est l'équation 2.16

$$\theta_{ext} = g^{-1} \left(g(\theta_{macro,statique}) + \text{Ca} \ln \frac{s_{macro}}{r_0} \right), \quad (2.93)$$

avec :

$$\begin{cases} \theta_{macro,statique} > 0.1 & \rightarrow r_0 \hat{=} \sqrt{\theta_{macro,statique}} l_s \\ \theta_{macro,statique} < 0.1 & \rightarrow r_0 \hat{=} \sqrt{0.1} l_s \end{cases} \quad (2.94)$$

L'expression générale de l'angle de contact dynamique est une corrélation qui se réduit à ces deux expressions dans chaque cas. Nous proposons l'expression suivante :

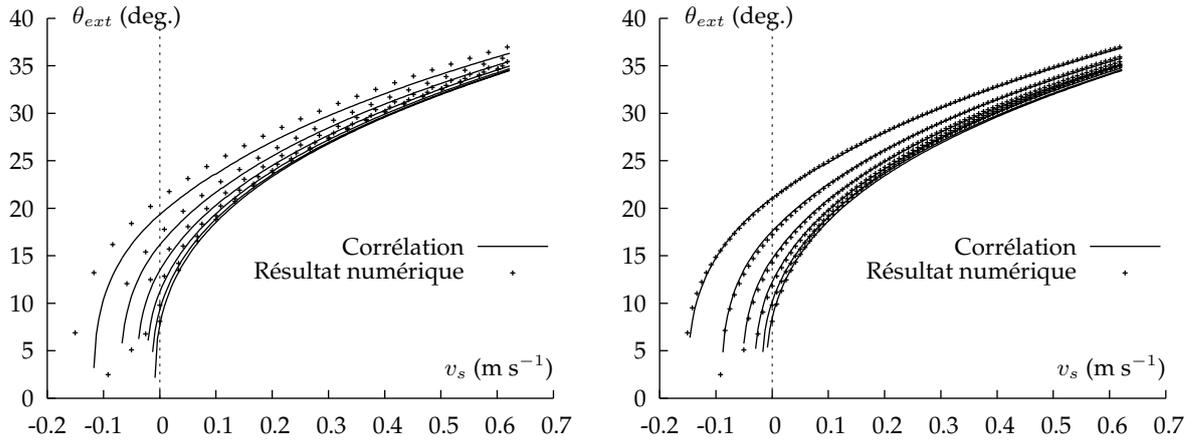
$$\theta_{ext} = g^{-1} \left(g(\theta_{macro,statique}) + \text{Ca} \ln \frac{s_{macro}}{r_1} \right), \quad (2.95)$$

avec :

$$\begin{cases} \theta_{macro,statique} > 0.1 & \Rightarrow r_0 \hat{=} \sqrt{\theta_{macro,statique}} l_s \\ \theta_{macro,statique} < 0.1 & \Rightarrow r_0 \hat{=} \sqrt{0.1} l_s \end{cases} \quad (2.96)$$

$$r_1 \hat{=} \frac{r_0 + x s_R}{1 + x}, \quad \text{avec } x \hat{=} \sqrt{\frac{v_{s,max}}{|v_s|}}$$

Cette expression donne d'excellents résultats si on l'applique à l'eau à pression atmosphérique : l'angle de contact et la vitesse limite de démouillage sont corrects à quelques pour-cent près. L'erreur la plus importante provient de l'évaluation de l'angle de contact statique en fonction de la température (voir figure 2.7). La vitesse maximale de recul de la ligne de contact est très faible : elle se mesure en cm s^{-1} et ce résultat semble assez général.



(a) Angle de contact dynamique. Sans compensation de l'erreur sur l'angle statique, l'angle statique fourni par la corrélation est de 8% inférieur au résultat du calcul de référence.

(b) Angle de contact dynamique (l'angle statique a été corrigé par une augmentation de 40% de la température, soit un facteur 1.08⁴).

Figure 2.7 – Angle de contact dynamique : comparaison entre les résultats du code de calcul de référence et l'expression analytique approchée 2.95. Le calcul est présenté pour de l'eau à 1 bar et pour différentes températures de paroi (surchauffe de 0.25, 0.5, 1, 2, 4 et 8 K), un angle de contact microscopique nul et une longueur de glissement de 0.1 nm. L'erreur liée à l'évaluation de l'angle de contact statique est relativement importante. Si on compense cette erreur, la prise en compte de la dynamique de la ligne de contact donne d'excellents résultats.

2.4.2 Influence de la pression de recul

Calcul de la variation d'angle de contact

Développons l'équation 2.59 qui relie la pression dans le liquide à la courbure de l'interface liquide-vapeur :

$$\partial_s \theta_i = \frac{1}{\sigma} \left(P_c - P_d + \dot{m}^2 \frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_l \rho_v} \right) \quad (2.97)$$

L'angle de contact macroscopique s'écrit alors de la façon suivante :

$$\theta_{macro} = \theta_{mic} + \int_0^{s_{ext}} \frac{\partial \theta_i}{\partial s} ds \quad (2.98)$$

Nous nous proposons d'évaluer séparément l'effet de la pression de recul : supposons l'angle de contact macroscopique θ_i connu, nous calculons la contribution $\Delta \theta_{Pr}$ de la pression de recul à cet angle de la façon suivante :

$$\Delta \theta_{Pr} = \int_0^{s_{ext}} \frac{1}{\sigma} \dot{m}^2 \frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_l \rho_v} ds \quad (2.99)$$

Pour cela, nous rappelons l'expression du flux de chaleur dans les trois régimes de transfert de chaleur (micro-région, domaine conductif, domaine convectif) :

$$\begin{aligned} s < s_R & \quad \dot{q} = q_0 \simeq \frac{T_{mic} - T_{sat}}{R_i} \sim \text{constante} \\ s_R < s < s_{Pe} & \quad \dot{q} \simeq k_l (T_{ext} - T_{sat}) \frac{s^{\lambda-1}}{s_{ext}^\lambda \theta} \sim s^{\lambda-1}, \quad 0 < \lambda < 0.5 \\ s_{Pe} < s & \quad \dot{q} \simeq \begin{cases} k_l (T_{ext} - T_{sat}) \sqrt{\frac{v_s}{2\pi\alpha_l}} s^{-1/2} & \text{si } v_s < 0 \\ 0 & \text{si } v_s > 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.100)$$

L'effet de la pression de recul augmente avec le flux de chaleur, et ce dernier augmente avec la conductivité thermique de la paroi. Pour simplifier les calculs, nous supposons que la conductivité thermique de la paroi est très grande. On a alors :

$$\begin{aligned} \lambda &\simeq 0, \\ T_{mic} &\simeq T_{ext} \end{aligned} \quad (2.101)$$

Le flux de chaleur étant continu au passage entre les différentes régions, on peut exprimer celui-ci en fonction du flux q_0 dans la micro-région

$$\begin{aligned} s < s_R &\Rightarrow \dot{q} \simeq q_0, & \int_0^{s_R} P_r ds &\simeq P_{r,0} s_R \\ s_R < s < s_{Pe} &\Rightarrow \dot{q} \simeq q_0 \frac{s_R}{s}, & \int_{s_R}^{s_{Pe}} P_r ds &\simeq P_{r,0} s_R \left(1 - \frac{s_R}{s_{Pe}}\right) \\ s_{Pe} < s, \quad v_s < 0 &\Rightarrow \dot{q} \simeq q_0 \frac{s_R}{s_{Pe}} \frac{\sqrt{s_{Pe}}}{\sqrt{s}}, & \int_{s_{Pe}}^{s_{ext}} P_r ds &\simeq P_{r,0} s_R \frac{s_R}{s_{Pe}} \ln \frac{s_{ext}}{s_{Pe}} \end{aligned} \quad (2.102)$$

où

$$P_{r,0} \hat{=} \frac{q_0^2}{\mathcal{L}^2} \frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_l \rho_v} \quad (2.103)$$

On peut donc écrire pour chaque région une variation de l'angle de contact liée à la pression de recul :

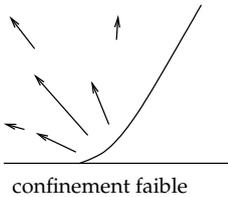
$$\begin{aligned} s < s_R &\rightarrow \Delta\theta_{micro} = \Delta\theta_0 \hat{=} \frac{P_{r,0} s_R}{\sigma} \\ s_R < s < s_{Pe} &\rightarrow \Delta\theta_{cond} = \Delta\theta_0 \left(1 - \frac{s_R}{s_{Pe}}\right) \\ s_{Pe} < s, \quad v_s < 0 &\rightarrow \Delta\theta_{conv} = \Delta\theta_0 \frac{s_R}{s_{Pe}} \ln \frac{s_{ext}}{s_{Pe}} \end{aligned} \quad (2.104)$$

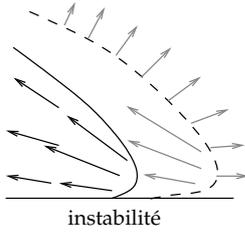
Il apparaît immédiatement deux cas limites en fonction du rapport s_R/s_{Pe} :

- si $s_R/s_{Pe} \ll 1$ (vitesse faible), alors la contribution du domaine convectif à $\Delta\theta$ est négligeable, et la contribution du domaine conductif est égale à la contribution de la micro-région,
- si au contraire $s_R/s_{Pe} \simeq 1$ (vitesse élevée), on se trouve à la limite du cas dégénéré où le domaine conductif est inexistant. Le domaine convectif contribue alors beaucoup plus que la micro-région (l'échelle macroscopique étant souvent très supérieure à la longueur s_R).

Un scénario possible d'instabilité

Ces éléments permettent d'envisager un mécanisme d'instabilité de la ligne de contact : la contribution de la pression de recul à l'angle de contact varie comme le carré du flux de chaleur q_0 , donc comme le carré de la température de surchauffe de la paroi $T_s - T_{sat}$. Or, tant que la variation d'angle de contact est inférieure à quelques dizaines de degrés, il est possible que la ligne de contact soit stable : le volume de vapeur produit à la ligne de contact n'est pas très confiné et peut s'échapper vers les grandes échelles. En revanche, si l'angle de contact dépasse 90° , on s'attend à ce que le confinement de la vapeur par le liquide devienne suffisant pour entraîner une instabilité de la ligne de contact : si le volume de vapeur créé à la ligne de contact ne peut s'échapper librement, la pression dans la vapeur augmente et chasse le liquide, y compris à la ligne de contact. Il ne reste alors qu'un mince film de liquide en paroi qui n'a pas démouillé à cause de la trop grande vitesse de recul de la ligne de contact. Une fois que l'instabilité a démarré, la vitesse de la ligne de contact et la pression de recul augmentent.





Si un film est déposé en paroi, celui-ci s'évapore très rapidement et contribue à augmenter la vitesse de recul de l'interface liquide-vapeur.

Dans ce scénario, l'instabilité se produit lorsque l'angle de contact est de l'ordre de 90° . On en déduit une température limite de la paroi, telle que la variation de l'angle de contact due à la pression de recul atteigne cette valeur en fonction de la vitesse de la ligne de contact. Pour une ligne de contact à faible vitesse, on a :

$$\Delta\theta \simeq 2 \Delta\theta_0 \simeq 2 \frac{(T_s - T_{sat})^2}{\sigma \mathcal{L}^2 R_i^2} \frac{s_R}{\rho_l \rho_v} \quad (2.105)$$

Dans ce cas, l'angle de contact à l'échelle s_R est déjà égal à la moitié de l'angle de contact macroscopique (en effet, on a $\Delta\theta_R = \Delta\theta_{cond}$). Donc il est raisonnable de calculer l'échelle s_R en utilisant un angle de contact élevé (voir la définition de s_R en 2.2.1). On suppose donc $s_R \simeq \delta_R$. L'instabilité est alors caractérisée par la relation suivante :

$$\Delta\theta \simeq 2 \frac{(T_s - T_{sat})^2}{\sigma \mathcal{L}^2 R_i} \frac{k_l}{\rho_l \rho_v} > \frac{\pi}{2} \quad (2.106)$$

La température de surchauffe limite $T_s - T_{sat}$ pour de l'eau prédite par ce modèle est d'environ 120 K pour des pressions comprises entre 0.01 et 20 bar. Comme ces températures sont très élevées, de nombreuses approximations du modèle ne sont plus valables (en particulier l'hypothèse que les propriétés physiques du fluide ne dépendent pas de la température). L'ordre de grandeur de la température limite pour de l'eau est compatible avec la limite basse de température habituellement admise pour le phénomène de Leidenfrost (la température minimale de la paroi est comprise entre 200 et 250°C). La pression de recul obtenue pour de l'eau à pression atmosphérique est alors de l'ordre de 1 bar dans la micro-région, et la vitesse de la vapeur atteint 1200 m s^{-1} , soit plusieurs fois la vitesse du son dans la vapeur ! Une telle valeur prouve que les approximations utilisées pour le calcul de la résistance d'interface ne sont plus valables, et l'erreur sur la résistance d'interface atteint probablement un facteur 2.

Si l'instabilité se produit, on s'attend à observer une très forte augmentation de la pression de la vapeur, liée au confinement et à l'inertie du liquide. Cette augmentation de pression s'accompagnerait d'une élévation de la température de saturation et le flux de chaleur s'en trouverait bloqué. Ainsi, après le démarrage de l'instabilité, la dynamique du phénomène semble dictée par l'équilibre entre l'inertie du liquide, la pression dans la vapeur et la température de saturation. Il faut alors déterminer si l'instabilité se poursuit ou si elle meurt en raison du blocage du flux de masse à l'interface. Une autre issue de ce scénario est la formation d'un film de liquide relativement épais à la paroi (par un mécanisme analogue à celui du modèle de Cooper et Loyd [14]). Dans ce cas, le flux de chaleur finit par diminuer après refroidissement d'une couche de liquide à la surface du film et l'instabilité s'arrête. La suite du scénario dépend essentiellement de l'état de la paroi après l'instabilité : si elle reste mouillée, le liquide peut facilement revenir à son contact car la surface du film de liquide est «froide». Si elle s'assèche au contraire, il sera pratiquement impossible de la remouiller : au moindre contact, la même instabilité se reproduira. Dans cette optique, le scénario conduit à la crise d'ébullition si le film de liquide est suffisamment fin pour qu'il ait le temps de s'évaporer complètement avant le remouillage de la paroi.

Le lien entre ce mécanisme d'instabilité et le flux critique semble évident. Pourtant, il n'est pas certain que l'instabilité de la ligne de contact soit réellement un signe précurseur de la crise d'ébullition. Il faudrait pour cela que l'instabilité se poursuive après son démarrage et que l'on obtienne un démouillage total de la paroi. Pour déterminer précisément la suite du scénario et répondre à cette question, l'utilisation d'un outil de simulation numérique semble tout à fait

T_{sat}	373	K				
T_s	$T_{sat}+10$	K				
ρ_l	958.1	kg m^{-3}				
ρ_v	0.5974	kg m^{-3}				
k_l	0.677	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$				
c_{Pl}	4216	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$				
\mathcal{L}	$2.257 \cdot 10^6$	J kg^{-1}				
μ_l	$282.2 \cdot 10^{-6}$	Pa s				
σ	0.059	N m^{-1}				
r	461.9	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$				
A	$2 \cdot 10^{-21}$	J				
R_i	$6.4 \cdot 10^{-8}$	$\text{K m}^2 \text{W}^{-1}$				
k_s	40	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$				
ρ_s	8000	kg m^{-3}				
c_{Ps}	400	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$				
(a) Propriétés physiques						
				$v = 0$	$v = -3 \text{ cm s}^{-1}$	$v = 10 \text{ cm s}^{-1}$
δ_R (m)					$4.3 \cdot 10^{-8}$	
θ_{macro} (deg.)	16.5			13.4		25.3
s_R (m)	$1.5 \cdot 10^{-7}$			$1.8 \cdot 10^{-7}$		$1 \cdot 10^{-7}$
s_{Pe} (m)	∞			$9 \cdot 10^{-5}$		10^{-3}
Ca	0			$1.5 \cdot 10^{-4}$		$5 \cdot 10^{-4}$
q_0 (W m^{-2})				1700		
			(b) Grandeurs caractéristiques du problème			

TAB. 2.2 – Paramètres physiques et grandeurs caractéristiques correspondant à l'exemple traité dans le paragraphe 2.5.1.

indiquée... En revanche, une fois le démouillage de la paroi réalisé, le critère obtenu sur la température de la paroi indique si le remouillage est possible ou non. Ainsi, la température limite prédite coïncide grossièrement avec l'apparition du phénomène de Leidenfrost. Il faudrait cependant appliquer le modèle à d'autres configurations et d'autres fluides pour conclure sur la validité du mécanisme proposé (notamment, le modèle prévoit que la température de surchauffe limite est indépendante de la pression, et on peut peut-être vérifier assez facilement cette conclusion dans la gamme des pressions inférieures à la pression atmosphérique).

En tous les cas, cette étude démontre que pour des surchauffes de quelques K seulement, l'effet de la pression de recul est complètement négligeable.

2.5 Résumé du modèle et conclusion

Le modèle que nous avons construit comprend un grand nombre d'aspects très différents. Pour illustrer de façon plus simple l'ensemble du modèle, nous fournissons les deux outils suivants :

- une illustration du modèle sur un cas concret en présentant graphiquement l'évolution des grandeurs physiques en fonction des échelles,
- et un résumé de l'ensemble des expressions du modèle analytique.

Nous concluons ensuite ce chapitre sur la modélisation de la ligne de contact en rappelant les apports de cette étude par rapport aux modèles existants.

2.5.1 Profils des grandeurs physiques le long de l'interface

Afin de fournir une image synthétique de l'ensemble du modèle, nous allons appliquer celui-ci dans un cas concret. Pour cette étude, nous considérerons le cas de l'eau. Les calculs ont été menés à l'aide d'un code spécialement conçu pour traiter le problème complet de l'hydrodynamique et du transfert de chaleur près de la ligne de contact. Ce code permet de résoudre exactement le problème dans les zones de transition, en particulier au passage entre la micro-région et le domaine conductif, et au passage du domaine conductif au domaine convectif.

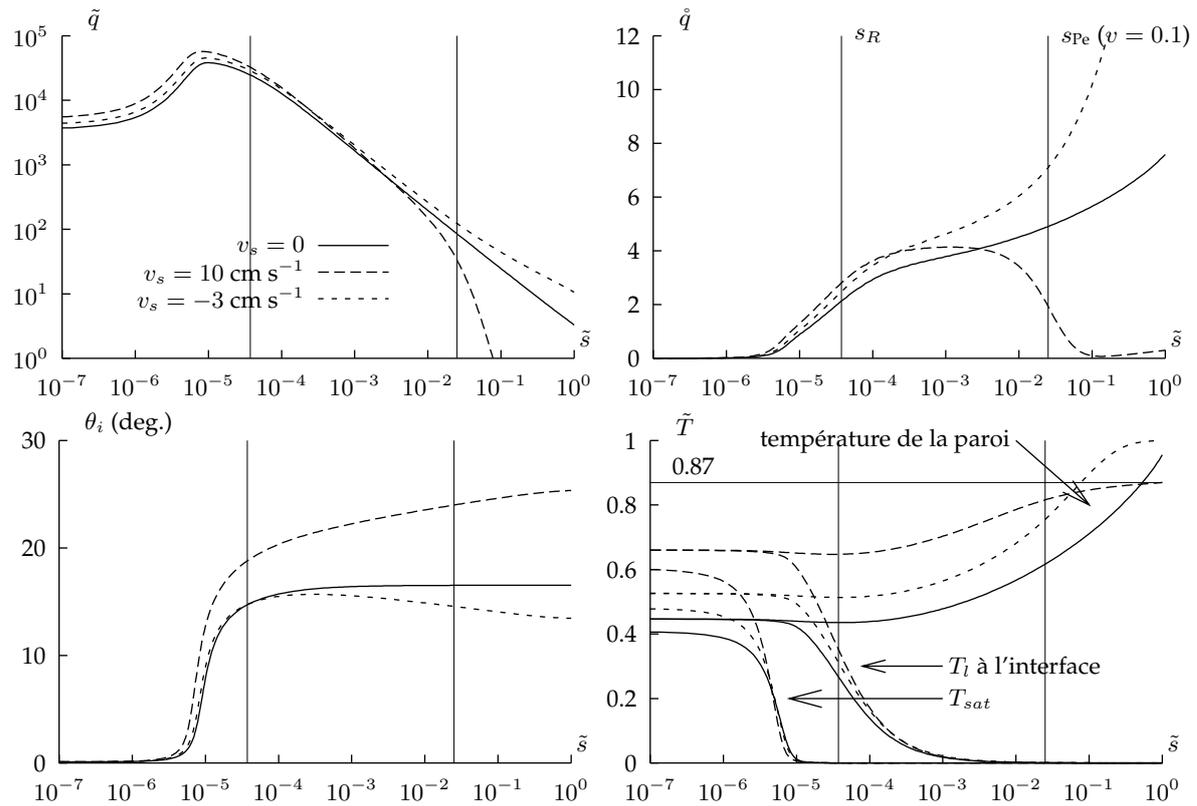


Figure 2.8 – Profils des grandeurs physiques en fonction de la distance à la ligne de contact pour de l’eau à 1 bar sur un acier courant dans l’hypothèse de fluide parfaitement mouillant et pour une surchauffe de paroi de 10 K. Les courbes sont tracées pour trois valeurs différentes de la vitesse de déplacement de la ligne de contact. Les deux échelles caractéristiques s_R et s_{Pe} sont marquées par des traits verticaux (seule l’échelle s_{Pe} correspondant à $v = 0.1$ est tracée, l’autre étant située à une échelle environ dix fois plus grande).

Profils de flux de chaleur et de température

La figure 2.8 représente les profils de flux de chaleur \tilde{q} , de température \tilde{T} et d’angle de contact θ pour de l’eau à 1 bar dans les conditions précisées dans le tableau 2.2(a) sous forme adimensionnelle. Les longueurs sont adimensionnalisées par l’échelle caractéristique à laquelle est imposée la température, soit $s_{ext} = 5$ mm. Le flux de chaleur est adimensionnalisé par $q_0 = k_l (T_s - T_{sat}) / s_{ext}$ (voir tableau 2.2(b)).

Les profils de flux \tilde{q} et de température \tilde{T} correspondent exactement à la représentation schématique de la figure 2.5. Le flux est faible à très petite échelle car limité par l’augmentation de la température de saturation locale, puis atteint un maximum juste avant l’échelle de coupure s_R . À partir de cette échelle, dans le domaine conductif, le flux de chaleur à l’interface liquide-vapeur diminue selon une loi puissance jusqu’à l’échelle de transition s_{Pe} . Au-delà de cette échelle de transition, le flux dépend du sens de déplacement de la ligne de contact. Si la vitesse est positive (la ligne de contact avance), le flux de chaleur chute très rapidement. Si la vitesse est négative, le flux suit une autre loi puissance, en $s^{1/2}$.

On a représenté trois températures différentes sur le même graphique. Dans l’ordre croissant en valeur de la température, on a :

- la température de saturation locale,
- la température du liquide à l’interface liquide-vapeur,
- la température de la paroi.

À petite échelle, les trois températures prennent la même valeur et le flux de cha-

leur est relativement faible. La température de saturation augmente au point d'atteindre celle de la paroi. Après une première échelle de transition où la température de saturation chute brusquement, le flux de chaleur augmente et le transfert de chaleur est dominé par la résistance d'interface : en effet, la température du liquide à l'interface liquide-vapeur est peu différente de la température de la paroi, la résistance thermique du liquide est donc très inférieure à la résistance d'interface. Jusqu'à l'échelle de coupure s_R , la température de la paroi est pratiquement constante. À partir de cette échelle, la température du liquide à l'interface diminue rapidement pour atteindre la température de saturation. Le flux de chaleur est alors limité par la conduction dans le liquide et dans la paroi, d'où une augmentation progressive de la température de la paroi. Enfin, à partir de l'échelle de transition s_{Pe} , la température de la paroi est à nouveau constante. Comme prévu par le modèle du domaine convectif, la température de la paroi sous le liquide est égale à la température T_{ext} si la ligne de contact recule, et est un peu inférieure à cette température si elle avance le long de la paroi. Le résultat du calcul numérique pour un recul de la ligne de contact est $\tilde{T} = 0.87$ à la paroi à l'échelle macroscopique, en bon accord avec le modèle (l'expression 2.52 conduit à une valeur de $\tilde{T} = 0.873$). Ce graphique montre enfin que la température à petite échelle augmente avec la vitesse de déplacement de la ligne de contact, et ce quelle que soit la direction du déplacement. En effet, l'extension du domaine convectif vers les petites échelles a pour effet d'augmenter la température de la paroi à ces échelles.

Représentation du flux adimensionnel en décade⁻¹

La représentation graphique de \dot{q} montre que la contribution des échelles inférieures à s_R est très faible. On remarque au passage l'avantage de cette représentation : l'échelle de coupure du flux de chaleur en s_R est évidente sur celle-ci, alors qu'elle n'apparaît pas clairement sur la courbe de \tilde{q} en échelle logarithmique. Cette dernière est trompeuse de ce point de vue car elle montre un maximum du flux de chaleur à un endroit où en fait sa contribution au flux total est négligeable). Comme prévu, l'échelle de transition s_R se situe approximativement à l'endroit où la contribution au flux de chaleur a été divisée par deux. Si la ligne de contact avance, la contribution des échelles supérieures à s_{Pe} est négligeable elle aussi, si bien que le flux de chaleur n'est significatif que dans le domaine conductif. Si la ligne de contact recule au contraire, il apparaît clairement que la contribution des grandes échelles est très supérieure à celle des petites échelles. La singularité du flux de chaleur à la ligne de contact passe alors inaperçue en comparaison de la contribution des grandes échelles.

Profils d'angle de contact

Enfin, les profils d'angle de contact comportent deux régions : aux échelles comprises entre l'échelle de coupure de T_{sat} et s_R , l'angle de contact varie très rapidement pour atteindre la valeur de l'angle de contact statique. Aux échelles supérieures, la variation de l'angle de contact suit pratiquement une loi logarithmique jusqu'aux grandes échelles (cette variation est bien représentée par l'expression 2.16 issue du modèle de Dussan).

2.5.2 Résumé du modèle de ligne de contact

Présentation du modèle analytique

Pour compléter cette revue synthétique du modèle de ligne de contact, le tableau 2.3 rappelle l'ensemble des expressions analytiques utilisées pour construire une formulation explicite du modèle. En plus des propriétés physiques usuelles de la paroi et du fluide, le modèle utilise des grandeurs qui caractérisent le comportement microscopique de la ligne de contact :

- soit la constante de Hamaker pour un fluide parfaitement mouillant,
- soit une longueur de glissement l_s et un angle de contact microscopique θ_{mic} .

Ces grandeurs sont généralement difficiles à obtenir. Toutefois, le modèle n'est très sensible qu'à la valeur de θ_{mic} . Suite à notre étude des résultats expérimentaux de Petrov *et al.* [62] en 2.1.2, il apparaît qu'il suffit d'appliquer le modèle avec un angle $\theta_{mic} \hat{=} \theta_a$ égal à l'angle de contact statique d'avancée si $v_s > 0$ et un angle $\theta_{mic} \hat{=} \theta_r$ égal à l'angle de contact statique de recul si $v_s < 0$. Les valeurs de la constante de Hamaker et de l_s interviennent aussi dans le modèle. Pour la première, une valeur de $2 \cdot 10^{-21}$ J convient la plupart du temps. Pour la deuxième, l'expérience de Dussan [25] conduit à $l_s = 10^{-10}$ m tandis que l'expérience de Petrov *et al.* conduit à des valeurs plus faibles. L'incertitude sur ce paramètre et l'incohérence apparente des valeurs obtenues par Petrov font de la longueur de glissement un point faible du modèle.

La mise en œuvre de ces expressions requiert l'utilisation d'une méthode itérative. Les formules utilisent en effet la valeur de la température T_{mic} à l'échelle microscopique, qui n'est pas connue *a priori*. La méthode la plus simple pour obtenir la valeur de T_{mic} consiste à calculer l'angle de contact en supposant d'abord que $T_{mic} = T_{ext}$, puis à itérer l'évaluation de θ_{ext} et de T_{mic} . Le calcul converge en trois à cinq itérations vers une valeur stable de l'angle de contact et de la température de paroi dans la micro-région.

Malgré les progrès réalisés pour parvenir à une expression facile à mettre en œuvre du modèle, nous ne sommes parvenus qu'à un résultat approximatif : l'approximation analytique proposée comporte un grand nombre de points faibles. En particulier, le raccordement entre les différentes régions (micro-région, domaine conductif et domaine convectif) pourrait être pris en compte de façon plus précise pour éviter l'apparition de discontinuités dans le modèle. De nombreuses expressions pourraient être remplacées par des expressions plus précises (par exemple, le calcul du flux de chaleur dans le domaine conductif pourrait tenir compte plus rigoureusement de l'évolution de l'angle de contact dans ce domaine).

D'un autre côté, nous disposons d'un code de calcul permettant de résoudre complètement les équations du modèle, et les deux méthodes fournissent des résultats très similaires.

Enfin, l'intégration du modèle dans un code de simulation numérique directe n'est réaliste que si le modèle de ligne de contact n'est pas trop coûteux. Or, les expressions du tableau 2.3 constituent déjà une somme importante de calculs que l'on peut être amené à simplifier encore.

C'est pourquoi, malgré la relative imprécision de ces expressions, nous pensons qu'elles fournissent un outil très intéressant pour le calcul de l'angle de contact et du flux de chaleur à la ligne de contact. Si on se limite à un fluide particulier et à une pression fixée, on peut aisément corriger les expressions analytiques pour qu'elles recouvrent précisément les résultats du code de calcul de référence. Une fois que les résultats expérimentaux seront suffisamment précis pour pouvoir distinguer les résultats du code de ceux de la corrélation, il sera

temps de se poser à nouveau la question de la précision de cette dernière.

Rappel des principales grandeurs caractéristiques du modèle

Le tableau 2.3 met en relief les différentes grandeurs caractéristiques du modèle. Pour commencer, on distingue cinq longueurs caractéristiques. Dans l'ordre décroissant, on trouve :

- l'échelle macroscopique s_{ext} où le modèle est raccordé au problème macroscopique,
- l'échelle de transition s_{pe} , qui marque la transition entre le domaine convectif à grande échelle et le domaine conductif à l'échelle médiane,
- l'échelle de coupure s_R en dessous de laquelle la résistance d'interface devient supérieure à la résistance thermique du film de liquide. Cette échelle marque l'entrée dans la micro-région.
- l'échelle de coupure $s_{T_{sat}}$ en dessous de laquelle le flux de chaleur diminue nettement en raison d'une augmentation de la température de saturation locale,
- et enfin l'échelle l_s ou δ_{adh} selon la modélisation choisie, qui constitue l'ultime échelle de coupure en dessous de laquelle l'angle de contact ne varie plus.

Dans certains cas, l'ordre de ces grandeurs caractéristiques peut être inversé, ce qui conduit à des cas dégénérés du modèle de ligne de contact. Par exemple, pour de très grandes vitesses de déplacement, l'échelle s_{pe} peut être inférieure à l'échelle s_R . Dans ce cas, le domaine conductif est inexistant et le flux de chaleur perd tout aspect singulier. À de telles vitesses, l'angle de contact prend des valeurs extrêmes et l'angle de contact ne peut plus être prédit de façon fiable par le modèle (rappelons qu'au-delà d'un angle de contact de 120° , les conditions aux limites du problème macroscopique influencent l'angle de contact et que la seule vitesse de déplacement ne suffit plus à le déterminer).

Si l'échelle de couplage s_{ext} est inférieure à s_R , le flux de chaleur n'est plus singulier non plus et les variations de l'angle de contact sont très limitées. Le modèle n'a donc d'intérêt que si les longueurs caractéristiques sont classées dans l'ordre : $s_R < s_{pe}$ et $s_R < s_{ext}$.

On distingue par ailleurs un certain nombre d'angles de contact caractéristiques :

- l'angle de contact microscopique θ_{mic} qui est un paramètre du modèle,
- l'angle de contact statique caractéristique de la micro-région, noté $\theta_{mic,0}$. C'est l'angle de contact statique macroscopique que l'on observerait si le fluide était parfaitement mouillant, et il est généralement compris entre 10 et 30° .
- l'angle de contact statique macroscopique $\theta_{statique}$,
- et enfin l'angle de contact dynamique à différentes échelles.

Le calcul de ces angles fait appel à des corrélations ou des approximations. En particulier, il est faux si la valeur du nombre de Reynolds devient supérieure à 1 à l'échelle s_{ext} . Dans ce cas, le problème devient très dépendant des conditions aux limites précises et de la configuration du problème macroscopique. Nous avons choisi de ne pas nous attarder sur cette question car on peut monter par ailleurs que l'utilisation du modèle de ligne de contact dans une simulation numérique nécessite de résoudre les couches limites thermiques et hydrodynamiques. La valeur nombre de Reynolds à l'échelle du modèle devrait donc être inférieure à l'unité.

Enfin, on distingue trois températures caractéristiques :

- la température de la paroi à l'échelle macroscopique T_{ext} ,
- la température à la surface de la paroi à l'échelle de transition s_{pe} ,

- et enfin la température de la paroi dans la micro-région, supposée constante.

Pour des parois métalliques, les deux premières températures sont toujours relativement proches l'une de l'autre, comme nous l'avons montré en 2.2.3. En revanche, si le métal de la paroi est peu conducteur (comme de l'acier inoxydable) et le rapport d'échelles s_{pe}/s_R grand, la température dans la micro-région peut être significativement plus faible que la température T_{ext} .

2.5.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisé des ingrédients connus pour modéliser de la ligne de contact :

- pour modéliser la dynamique de la ligne de contact, nous avons choisi l'approche de Dussan [25], fondée sur les équations de Stokes et l'introduction d'une condition aux limites de glissement à la paroi,
- et pour prendre en compte le transfert de masse, nous sommes partis de la formulation proposée par Stephan [78].

Il était relativement aisé de construire un modèle combinant les deux approches. Nous avons ainsi obtenu un modèle de ligne de contact dynamique avec transfert de masse pour des fluides parfaitement mouillants.

Suivant la démarche de Morris [59], nous séparons la micro-région (qui détermine l'angle de contact) de la région intermédiaire où se situe la contribution majoritaire au flux de chaleur global. Ces deux régions définissent une échelle de transition s_R dont la position se déduit presque directement de l'épaisseur équivalente d'interface δ_R . Cependant, la prise en compte de la dynamique de la ligne de contact introduit une échelle supplémentaire de transition entre le domaine conductif et le domaine convectif.

Ce modèle est cependant insuffisant pour décrire nos résultats expérimentaux. En particulier, nous avons besoin d'un modèle capable de décrire des fluides partiellement mouillants. Nous avons donc proposé une variante du modèle de Stephan : le film de liquide qui résulte de la positivité de la constante de Hamaker est remplacé par une condition de glissement à la paroi et une condition d'angle de contact imposé. Ce deuxième modèle semble décrire la ligne de contact de façon cohérente. Comme le montre Morris [60], lorsque l'angle de contact microscopique est petit, son comportement est qualitativement identique à celui du modèle de Stephan.

Ce deuxième modèle apporte cependant bien plus qu'une simple extension à des fluides partiellement mouillants : grâce à une analyse dimensionnelle de ce modèle simplifié s'appuyant sur un choix judicieux des grandeurs caractéristiques, il est possible d'obtenir des expressions analytiques de ses solutions. Pour ce faire, il est important de fonder l'adimensionnalisation sur l'épaisseur équivalente d'interface δ_R . Il n'est pas inutile d'insister sur ce point car cette grandeur joue un rôle fondamental dans le modèle. Elle apparaît deux fois dans la solution fondamentale 2.84 du modèle simplifié de la micro-région : une fois dans le rapport d'échelles l_0/δ_R , et une fois dans le groupe adimensionnel Ca_q au travers du flux de chaleur caractéristique \dot{q}_0 dans la micro-région. Ce résultat confirme l'intérêt d'interpréter la résistance d'interface comme une épaisseur équivalente.

Grâce à ce modèle simplifié, on obtient très facilement la loi d'évolution de l'angle de contact en fonction de la température de la paroi (une loi en $(T_{mic} - T_{sat})^{1/4}$ mise en évidence par Morris [60]). De plus, en interprétant le modèle de fluide parfaitement mouillant comme un fluide partiellement mouillant particulier (avec un angle de contact nul et une longueur de glissement l_s égale à l'épaisseur du film adsorbé), on retrouve avec une précision très intéressante l'angle de contact du modèle de Stephan en général et la loi d'évolution en $(T_{mic} - T_{sat})^{0.3}$

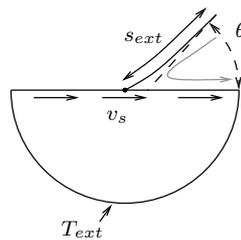
Résumé de la formulation analytique approchée du modèle.

$R_i \hat{=} \frac{2 - \epsilon}{2\epsilon} \frac{T_{sat} \sqrt{2\pi R T_{sat} / M} (\rho_l - \rho_v)}{\mathcal{L}^2 \rho_v \rho_l}$	résistance d'interface	1.17 ⁽¹⁾
$\delta_R \hat{=} R_i k_l$	épaisseur équivalente	1.19
$Ca_v \hat{=} \frac{\mu_l v_s}{\sigma}$	nombre de capillarité (dynamique)	
<i>Calcul de l'angle de contact à la sortie de la micro-région (on suppose connue la valeur de T_{mic})</i>		
$q_0 \hat{=} k_l \frac{T_{mic} - T_{sat}}{\delta_R}$	flux caractéristique	2.79
$Ca_q \hat{=} \frac{\mu_l q_0}{\sigma \rho_l \mathcal{L}}$	nombre de capillarité (transfert de masse)	2.81
$l_{T_{sat}} \hat{=} \frac{1}{2} \frac{T_{sat}}{T_s - T_{sat}} \frac{\sigma}{\delta_R \rho_l \mathcal{L}} \sqrt{3 Ca_q} \delta_R$	échelle de coupure du flux de chaleur	2.82 ⁽⁴⁾
$\delta_{adh} \hat{=} \left(\frac{T_{sat}}{T_{mic} - T_{sat}} \frac{A}{\rho_l \mathcal{L}} \right)^{1/3}$	épaisseur du film adsorbé	2.56
$l_0 \hat{=} \begin{cases} l_s + l_{T_{sat}} & \text{si } A < 0 \\ 2 \delta_{adh} + l_{T_{sat}} & \text{si } A > 0 \end{cases}$	échelle de coupure microscopique	2.85, 2.86 ⁽⁷⁾
$\theta_{mic,0} \hat{=} (3 Ca_q)^{1/4} \Theta \left(\ln \left(\frac{l_0}{\delta_R} \right) \right)$	angle caractéristique de la micro-région	2.84 ^(2,3)
$\theta_{statique} \hat{=} (\theta_{mic,0}^3 + \theta_{mic}^3)^{1/3}$	angle macroscopique statique	2.83 ⁽⁵⁾
<i>Calcul de l'angle de contact à l'échelle macroscopique et au milieu du domaine conducteur.</i>		
$\theta_{ext,dyn} \hat{=} g^{-1} \left(g(\theta_{mic,0}) + Ca_v \ln \frac{s_{ext}}{r_1} \right)$	angle macroscopique dynamique	2.95, 2.96 ^(2,6,8)
$s_{Pe} \hat{=} \min \left(\frac{\alpha_l}{ v_s \theta_{ext,dyn}^2}, s_{ext} \right)$	échelle de transition vers le régime convectif	2.26
$s_{cond} \hat{=} \sqrt{s_R s_{Pe}}$	échelle médiane du domaine convectif	2.44
$\theta_{cond} \hat{=} g^{-1} \left(g(\theta_{mic,0}) + Ca_v \ln \frac{s_{cond}}{r_0} \right)$	angle de contact moyen dans le domaine conducteur	2.95, 2.96 ^(2,6,8)
<i>Calcul du flux de chaleur intégré et de la température de la paroi dans la micro-région.</i>		
$T_s s_{Pe} \hat{=} \frac{1}{2} (T_{ext} + T_{sl})$	Température caractéristique à l'extérieur du domaine conducteur	2.54 ⁽⁹⁾
$\frac{T_{mic} - T_{sat}}{T_s s_{Pe} - T_{sat}} \simeq \left(\frac{s_R}{s_{Pe}} \right)^\lambda$	Température à l'échelle microscopique	2.39 ^(2,10)
$\int_0^{s_{Pe}} \dot{q} ds \simeq (T_s s_{Pe} - T_{sat}) \frac{k_l}{\sin(\lambda \theta_{cond})} \left(1 - \left(\frac{s_R}{s_{Pe}} \right)^\lambda \right)$	Flux de chaleur dans le domaine conducteur	2.33 ^(2,10,11)
$\begin{cases} v_s > 0 \Rightarrow \dot{q} = 0 \\ v_s < 0 \Rightarrow \text{expression 2.49} \end{cases}$	Flux de chaleur dans le domaine convectif	2.49 ^(2,12)

Hypothèses et simplifications utilisées :

- ¹ Vitesse de la vapeur \ll vitesse du son, ϵ est le coefficient d'accommodation.
- ² Propriétés physiques du fluide indépendantes de la température et du flux de masse, pression constante de la vapeur.
- ³ Approximation de lubrification, $10^{-8} < l_0/\delta_R < 1$, la fonction Θ est une corrélation précise à 0.2% sur cet intervalle.
- ⁴ Expression fondée sur une corrélation de la pression à l'origine (voir annexe C.2.4).
- ⁵ Corrélation correcte à $\pm 5\%$ près pour les fluides courants.

- 6 Approximation valable pour les faibles valeurs du nombre de capillarité $Ca_v < 0.01$, les petits angles, les faibles pressions et les valeurs du nombre de Reynolds inférieures à 1. Aux angles supérieurs à 90° , les conditions aux limites macroscopiques doivent être prises en compte, et aux hautes pressions, la viscosité de la vapeur n'est plus négligeable (voir annexe B). Cette superposition de l'angle de contact statique et du modèle de Dussan n'est pas correcte : elle entraîne une petite erreur sur la vitesse maximale de recul de la ligne de contact.
- 7 Si $A > 0$, cette expression est une heuristique qui permet de retrouver les résultats du modèle de Stephan à $\pm 10\%$ près dans une très large gamme de paramètres. Les cas les plus pénalisants sont les faibles surchauffes à haute pression, où la condition $l_0/\delta_R < 1$ n'est pas vérifiée (voir annexe C.2.4).
- 8 La longueur r_1 est une correction de l'échelle de glissement pour obtenir un bon accord entre le modèle numérique et l'approximation analytique (voir expression 2.96).
- 9 Cette expression peut poser quelques problèmes de mise en œuvre car elle rend le modèle discontinu par rapport à la vitesse v_s . La discontinuité n'est pas très forte (inférieure à la précision du modèle), et peut donc être lissée sans inconvénient.
- 10 On trouvera une expression plus générale de λ sur la figure A.6 en annexe. On néglige le flux de chaleur dans la vapeur et l'influence des conditions aux limites microscopiques et macroscopiques et on suppose la courbure relative faible.
- 11 Le flux est calculé en supposant que la résistance d'interface produit une coupure brutale du flux de chaleur. Cette approximation convient si $s_R/s_{Pe} \ll 1$.
- 12 Le flux est calculé en négligeant les effets liés au raccordement continu entre le domaine conductif et le domaine convectif.



Paramètres d'entrée du modèle

s_{ext}	échelle macroscopique
$T_{ext} - T_{sat}$	surchauffe de paroi
v_s	vitesse de déplacement

Résultats principaux

$\theta(s_{ext})$	angle macroscopique
$\int_0^{s_{ext}} \dot{q}(s) ds$	flux de chaleur

TAB. 2.3 – Résumé du modèle complet de ligne de contact sous sa forme analytique approchée

en particulier.

Nous avons proposé deux modèles de fluides, partiellement et parfaitement mouillants, qui semblent *a priori* cohérents, et nous avons introduit la dynamique de la ligne de contact dans les modèles. Nous proposons une expression analytique de l'angle de contact macroscopique et du flux de chaleur qui tient compte du transfert de masse et de chaleur dans la micro-région, de la dynamique de la ligne de contact et de la pression de recul.

Ce travail a aussi permis de mettre en évidence les limitations de ces modèles. Ainsi, nous avons montré dans quelles conditions l'angle de contact ne peut plus être prédit car il dépend des conditions aux limites précises de l'écoulement macroscopique. Cela se produit essentiellement lorsque la valeur du nombre de Reynolds est supérieure à l'unité et lorsque l'angle de contact est supérieur à 90° . D'autre part, nous avons fait part des incertitudes concernant le comportement

de la vapeur à très petite échelle, et notamment l'hypothèse de pression de vapeur constante. Nous avons souligné aussi l'importance de l'erreur commise à haute pression en négligeant la viscosité de la vapeur. Enfin, si le modèle est destiné à être appliqué dans des conditions extrêmes comme au voisinage du flux critique, il faut se souvenir que l'expression de la résistance d'interface suppose que la vitesse de la vapeur est petite devant la vitesse du son et que l'on a supposé que les propriétés physiques des fluides varient de façon négligeable avec la température.

Rappelons aussi que le modèle dépend d'une longueur de glissement l_s . Nous avons montré en étudiant des résultats expérimentaux que l'on peut sans doute toujours trouver une valeur de ce paramètre qui rende compte des expériences, mais qu'il n'a parfois plus du tout le sens physique qu'on lui accorde (notamment lorsqu'on trouve des valeurs très inférieures aux dimensions moléculaires). On peut alors s'interroger sur la pertinence de la modélisation.

Enfin, le défaut majeur de ce modèle est peut-être de dépendre de la configuration de l'écoulement à des échelles très inférieures au micro-mètre, soit très en-dessous de la rugosité des surfaces courantes. Quelle est donc la valeur de ce modèle pour décrire des lignes de contact sur des surfaces réelles? Le modèle montre que si l'angle de contact statique est supérieur à quelques dizaines de degrés, ce dernier ne dépend pratiquement pas de la température de la paroi. Ce résultat se généralise sans doute à des surfaces rugueuses.

Par ailleurs, le modèle montre que le flux de chaleur est équitablement réparti à toutes les échelles entre l'échelle de coupure δ_R et l'échelle macroscopique s_{ext} . La conjecture suivante semble pertinente : si la géométrie des surfaces est de type fractale en dessous de la plus grande échelle des rugosités, la longueur des lignes de contact augmente à mesure que l'on considère des échelles de plus en plus petites. Si on parvenait de plus à prédire l'angle de contact moyen entre l'interface et la surface aux différentes échelles, il serait possible de prédire le flux de chaleur en présence des rugosités. S'il est clair que la longueur des lignes de contact augmente aux petites échelles, l'évolution de l'angle de contact en fonction de l'échelle d'observation est plus difficile à prédire. Il n'est donc pas facile de prévoir si le flux de chaleur doit augmenter ou diminuer en présence des rugosités. En revanche, on peut assurer que si les rugosités ont une échelle caractéristique inférieure à δ_R , alors elles n'ont aucun effet sur le transfert de chaleur. La simulation numérique pourrait apporter des réponses à cette question. . .

Ces limitations et cette conjecture au sujet des surfaces rugueuses appellent naturellement une vérification expérimentale. Avant cela, nous allons montrer comment utiliser notre modèle dans le cadre d'une simulation numérique de l'ébullition en paroi.

Deuxième partie

**Simulation numérique de l'ébullition
en paroi**

Chapitre 3

La méthode mixte front-tracking / VOF

Le modèle de ligne de contact que nous avons développé dans la première partie du mémoire fournit des résultats fondamentaux et est utilisable tel quel dans des configurations simples d'écoulements stationnaires. Un des objectifs de cette étude est d'introduire ce modèle dans une méthode de simulation numérique capable de résoudre des problèmes instationnaires (croissance de bulles en paroi et instabilités par exemple). Les méthodes numériques existantes ont toutes des défauts qui rendent difficiles ou impossibles les calculs qui nous intéressent. C'est pourquoi nous avons consacré une partie de ce travail à la construction d'une méthode numérique adaptée à ces problèmes. Nous nous sommes limités pour l'instant à des simulations axisymétriques ou bidimensionnelles pour concentrer nos efforts sur la qualité de la physique des simulations, mais on prévoit déjà de mettre en œuvre une méthode tridimensionnelle.

Après avoir défini les critères de qualité que l'on attend de la solution numérique, on rappellera rapidement les différentes méthodes disponibles. Nous verrons que les méthodes existantes ne remplissent pas tous les critères que l'on se sera imposés. Nous choisirons une méthode comme base de travail et nous décrirons en détail un algorithme qui nous rapproche des critères imposés.

3.1 Discussion sur les méthodes numériques

Au début de ce mémoire, nous avons mentionné quelques problèmes fondamentaux que nous aimerions aborder par la simulation numérique. Nous avons cité en particulier les interactions des interfaces avec des objets de petite taille (sondes optiques par exemple), et les phénomènes liés à l'ébullition et à la crise d'ébullition. L'interaction des interfaces avec les petites structures est un problème gouverné par la dynamique des lignes de contact et la tension de surface.

Lors de l'ébullition, les mécanismes suivants jouent probablement un rôle fondamental, et nous aimerions que la méthode numérique puisse les traiter :

- la croissance d'une bulle de vapeur sur une paroi chauffée,
- le processus de formation d'un film de liquide sous la bulle,
- l'instabilité de recul de la ligne de contact (pour déterminer si elle peut jouer un rôle dans la détermination du flux critique),
- le remouillage des parois.

Tous ces problèmes nécessitent la prise en compte d'un écoulement diphasique avec changement de phase où la tension de surface est du même ordre de grandeur que les forces d'inertie, de dissipation visqueuse ou de gravité. Les lignes de

contact y jouent un rôle essentiel dont la méthode numérique doit rendre compte.

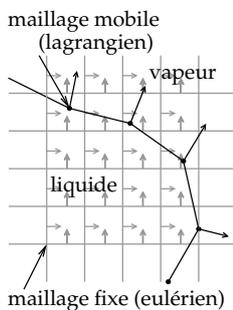
3.1.1 Revue de quelques méthodes numériques existantes

Nous proposons une revue très sommaire, car ce travail de fond a déjà été réalisé par ailleurs (voir [42, 21, 47]). Nous nous contenterons de rappeler les caractéristiques de différentes méthodes disponibles qui nous ont servi à faire le choix de la méthode de départ.

Les méthodes de suivi lagrangiennes

L'approche qui vient immédiatement à l'esprit consiste à décrire les interfaces par un maillage mobile. Cette approche conduit à deux classes de méthodes : d'une part les méthodes de suivi lagrangiennes et mixtes eulériennes-lagrangiennes (appelées méthodes ALE pour Arbitrary Lagrangian Eulerian) et d'autre part les méthodes de front-tracking. Dans les premières (voir par exemple [56]), tout le maillage du fluide se déforme de sorte que les interfaces soient à chaque instant une ligne du maillage. Avec une telle formulation, les conditions aux limites de contrainte mécanique, de vitesse ou de flux de chaleur sont naturelles, mais les changements de topologie des interfaces sont pratiquement hors de portée pour des raisons de complexité géométrique. Cette méthode est utilisée lorsqu'on cherche des résultats très précis sur des géométries relativement simples.

Les méthodes à double maillage eulérien/lagrangien



Dans la méthode de front-tracking [83, 76, 21], un maillage surfacique mobile représente les interfaces tandis que la vitesse, la pression, la température et les autres grandeurs volumiques sont discrétisées sur un maillage fixe. Dans cette approche, les conditions aux limites aux interfaces sont difficiles à maîtriser. Certaines propriétés accessibles dans une approche lagrangienne, comme les propriétés de conservation du volume ou les bilans d'énergie sur les phases sont très compliqués à vérifier lorsque les interfaces ne coïncident pas avec les lignes du maillage. Ces méthodes sont donc caractérisées par des imprécisions au niveau des bilans, compensées par un grand nombre d'astuces permettant de rendre ces imprécisions acceptables. Beaucoup moins lourdes que les méthodes lagrangiennes, ces méthodes bénéficient de toute l'expérience acquise en simulation d'écoulements monophasiques. La gestion du maillage surfacique des interfaces reste une difficulté majeure, notamment lors des changements de topologie, mais les contraintes sur ce maillage sont nettement moins sévères que pour le maillage volumique des méthodes lagrangiennes. Elles se révèlent bien plus efficaces pour résoudre l'écoulement monophasique à l'intérieur des phases, où le schéma classique «Marker And Cell» reste une valeur sûre.

Les méthodes purement eulériennes

La méthode la plus répandue et une des plus robustes à ce jour est la méthode VOF, pour Volume Of Fluid [35]. Dans cette méthode, on discrétise le champ de masse volumique sur le même maillage fixe que la vitesse, la pression et la température. De ce champ de masse volumique, on déduit par des algorithmes géométriques la position des interfaces dans chaque maille. Cette position permet de calculer l'effet de la tension de surface sur le fluide et les variations de masse volumique dans chaque maille. Selon le niveau de raffinement de l'algorithme de reconstruction, on obtient une méthode plus ou moins facile à mettre

en œuvre. La prise en compte de la tension de surface dépend énormément de cet algorithme de reconstruction et les méthodes les plus précises sont tout aussi complexes à mettre en œuvre que les méthodes de front-tracking. En revanche, le suivi des interfaces est réalisé par un algorithme de transport sur le maillage eulérien. On évite ainsi une grande partie des difficultés d'ordre algorithmique liées au maillage mobile.

Parmi les autres méthodes purement eulériennes, on trouve aussi les méthodes dites «level-set», où l'indicatrice de phase est une fonction continue discrétisée. Les interfaces sont implicitement définies comme l'isovaleur 0.5 de l'indicatrice de phase. L'indicatrice est associée à une équation de transport qui comporte obligatoirement un terme anti-diffusif (la définition de ce terme pose quelques difficultés). Ces méthodes présentent encore moins de difficultés numériques que les méthodes VOF, car les grandeurs physiques sont régulières.

On peut citer la méthode fondée sur les équations du second-gradient [41]. Plus proche de la physique, elle ne manque pas d'élégance puisque les propriétés physiques propres aux interfaces —telles que la tension de surface ou la chaleur latente de changement d'état— sont naturellement prises en compte par les équations d'évolution des variables eulériennes. Les grandeurs physiques sont continues à l'échelle du maillage et c'est sans doute la méthode la plus simple à mettre en œuvre numériquement.

Le compromis complexité/précision/efficacité

Les méthodes ont été citées dans l'ordre décroissant d'efficacité numérique, de précision et de complexité. Les méthodes lagrangiennes sont naturellement les plus précises, car la discrétisation des champs de grandeurs physiques respecte la topologie de ces champs : les lignes du maillage suivent les discontinuités du champ physique. Ces méthodes sont aussi les plus compliquées à mettre en œuvre.

Les méthodes mixtes eulériennes-lagrangiennes constituent un compromis intéressant car elles évitent la gestion compliquée d'un maillage volumique mobile qui suive les champs physiques mais conservent une information précise sur la localisation des discontinuités.

Les méthodes purement eulériennes sont en général les plus simples car elles évitent la gestion d'un maillage mobile, mais les discontinuités des champs sont représentées par une grandeur sur le maillage eulérien et la localisation n'est donc pas très précise. Ces méthodes requièrent donc souvent un maillage plus fin pour obtenir la même précision.

Il semble qu'à l'heure actuelle, toutes les méthodes citées ont été appliquées à des calculs d'écoulements diphasiques en 3D, et la plupart l'ont été pour des écoulements avec transfert de masse.

3.1.2 Critères de qualité de la méthode

Duquennoy [21, 22] a mis en œuvre une méthode de front-tracking, dans laquelle il a plus spécifiquement amélioré la prise en compte du changement de phase et des lignes de contact. Le travail qu'il a réalisé a mis en évidence plusieurs points faibles de la méthode de front-tracking :

- les courants parasites,
- le défaut de conservation de la masse,
- les limitations liées aux lignes de contact,
- la cohérence de la description du champ de température.

Ces points faibles constituent autant de critères de sélection d'une méthode mieux adaptée à nos problèmes. Dans les paragraphes suivants, nous donnons quelques indications plus précises sur ces quatre points.

Les courants parasites

On appelle courants parasites les courants observés dans une simulation numérique ayant atteint un état stationnaire d'équilibre alors qu'aucune énergie n'est injectée dans le système. Ces courants résultent d'erreurs de discrétisation de la tension de surface et ont de graves conséquences sur les résultats des calculs.

La première conséquence est qu'ils rendent certains calculs impossibles. D'après Duquennoy [21], l'intensité des courants parasites augmente lorsque la valeur du nombre d'Ohnesorge diminue (la longueur D est la dimension caractéristique des gouttes ou des bulles) :

$$\text{Oh} \triangleq \frac{\mu_l}{\sigma \rho_l D} \quad (3.1)$$

En pratique, avec de l'eau à pression atmosphérique et une dimension caractéristique de l'ordre du centimètre, les courants parasites rendent les interfaces complètement instables aux temps longs. La simulation de phénomènes lents dont la durée excède quelques secondes est alors impossible.

La deuxième conséquence est qu'ils rendent irréalistes les calculs anisothermes où le transfert de chaleur n'est pas dominé par la conduction. Lors de la croissance d'une bulle de vapeur à haute pression par exemple, la géométrie des couches limites thermiques détermine l'intensité du transfert de masse en dehors des lignes de contact et de la micro-couche. Or, les courants parasites détruisent complètement ces couches limites, rendant le calcul du champ de température irréaliste.

Il est donc extrêmement important de réduire l'intensité des courants parasites au moins jusqu'à un niveau tel que la valeur du nombre de Péclet soit très inférieure à 1. Dans ce cas, les courants parasites n'ont plus aucune influence sur le champ de température.

La conservation du volume

Cette propriété est un enjeu très important pour la méthode de front-tracking comme pour la méthode VOF. Par nature, la méthode VOF a de bonnes propriétés de conservation du volume, mais certaines étapes de l'algorithme sont approximatives et la conservation est inexacte dans la plupart des algorithmes existants [7]. La méthode de front-tracking mise en œuvre par Duquennoy présente une erreur encore plus importante que les méthodes VOF sur le bilan de volume des phases, d'une part en raison de la méthode d'interpolation par splines utilisée pour garantir la régularité du maillage lagrangien, d'autre part en raison de l'algorithme de transport de ce maillage.

L'erreur sur le bilan de volume a des conséquences importantes sur la simulation de la croissance de bulles en paroi : dans certains cas, la bulle diminue de volume alors que le fluide est partout surchauffé. Si l'erreur est moins importante, le temps de croissance et le diamètre au détachement peuvent être mal prédits.

Par conséquent, l'exactitude du bilan de volume des phases est un ingrédient indispensable de la méthode numérique.

Les lignes de contact

La méthode de front-tracking [21] n'est pas la seule dans laquelle des conditions aux limites sur les angles de contact ont été mises en œuvre. Cependant, c'est peut-être avec les méthodes lagrangiennes celle pour laquelle l'expression d'une condition aux limites d'angle de contact est la plus directe. La formulation utilisée par Duquennoy empêche pour l'instant la simulation d'angles inférieurs à 30° environ, et la modélisation de l'angle de contact est mal contrôlée (l'angle de contact dynamique notamment n'est pas modélisé rigoureusement). Il nous faut donc une méthode capable de prendre en compte de façon rigoureuse le modèle développé dans la première partie, y compris le flux de chaleur et le transfert de masse singuliers.

La cohérence du champ de température

La formulation précédente du front-tracking n'assure pas exactement la condition aux limites $T = T_{sat}$ aux interfaces. Ainsi, on peut observer qu'une bulle de vapeur initialement à T_{sat} se réchauffe au contact d'un liquide surchauffé, ce qui contredit le sens physique. Cette incohérence, ainsi que l'imprécision de la formulation du transfert de masse aux interfaces n'est pas compatible avec la mise en œuvre d'un modèle précis de transfert de chaleur singulier aux lignes de contact.

3.1.3 Notre choix : une méthode de front-tracking

Argumentaire

Notre choix s'est porté sur une méthode de front-tracking pour les raisons suivantes :

- Il nous faut une méthode capable de gérer des grandes déformations, relativement facile à mettre en œuvre et extensible au 3D, ce qui fait des méthodes purement lagrangiennes de mauvais candidats (notamment pour le passage au 3D).
- La méthode doit pouvoir traiter des problèmes où la tension de surface est dominante sans aucun champ de vitesse parasite. Or, à notre connaissance, il n'existe pas de formulation de la méthode VOF sans maillage lagrangien qui vérifie ce critère, alors que nous en avons trouvé une pour le front-tracking.
- Nous disposons déjà d'une bonne expérience des méthodes de front-tracking ainsi que d'une base logicielle suite à la thèse de Duquennoy [21].

Pourtant, la méthode originale de front-tracking présente de nombreux inconvénients, dont le plus important est peut-être la présence de courants parasites. C'est la raison pour laquelle nous avons profondément modifié de nombreux aspects de la formulation initiale, à commencer par la démarche de discrétisation des équations continues.

Démarche de discrétisation des équations continues

Sur le fond, cette démarche change radicalement par rapport à la méthode initiale [83] : l'ancienne approche consiste à appliquer un opérateur de filtrage aux équations de Navier-Stokes pour rendre toutes les grandeurs continues (masse volumique, champ de vitesse, etc.), puis à discrétiser ces équations filtrées. Les outils d'analyse numérique classiques prédisent alors une convergence rapide en fonction de la discrétisation car la solution du problème est régulière. L'inconvé-

nient de la méthode est que l'on converge rapidement vers la solution du problème filtré et non vers la solution du problème réel. En ce sens, la méthode n'est même pas «consistante». Si on fait décroître le support de la fonction de filtrage en même temps que l'on raffine le maillage, on ne dispose d'aucun résultat de convergence de la méthode numérique. Ainsi, dans la méthode de front-tracking mise en œuvre par Duquenois, l'intensité des courants parasites est constante lorsqu'on raffine le maillage. La méthode ne converge donc pas vers la solution du problème continu.

La nouvelle approche est fondée sur des bilans sur des volumes de contrôle, exactement comme dans une méthode de volumes finis classique. On discrétise donc directement les équations de Navier-Stokes, y compris les discontinuités aux interfaces. Pour obtenir la convergence en maillage de la méthode, un modèle de sous-maille des grandeurs physiques doit être introduit dans les éléments où ces grandeurs sont discontinues. Ainsi, on utilise une représentation discrète un peu plus fine des champs physiques qui tient compte de la position des interfaces. La convergence obtenue est d'ordre 1 si on utilise un modèle de sous-maille d'ordre zéro dans les éléments contenant des interfaces (c'est l'approche utilisée pour les calculs de ce mémoire). Des modèles de sous-maille plus raffinés permettraient d'augmenter la précision de la méthode, et on devrait pouvoir obtenir les mêmes qualités qu'une méthode lagrangienne.

Résumé des apports essentiels de ce travail

Cette nouvelle approche de discrétisation est empruntée aux méthodes VOF, et n'est donc pas nouvelle. Les apports essentiels de ce travail concernent :

- les algorithmes de transport, pour assurer un bilan de masse exact des phases,
- la discrétisation de la tension de surface et de la gravité, pour éliminer pratiquement les courants parasites,
- le calcul du flux de chaleur aux interfaces pour une meilleure précision,
- la prise en compte des lignes de contact, pour mettre en œuvre les modèles décrits dans la première partie de ce mémoire.

La méthode proposée peut être étendue à des schémas en trois dimensions et d'autres types de discrétisations eulériennes. On propose en effet une formulation des différentes grandeurs physiques (en particulier les forces de tension de surface et de gravité) et des opérateurs d'interpolation qui s'étend directement en trois dimensions. D'autre part, pour peu que la discrétisation de la vitesse et de la pression permette d'écrire un bilan de volume discret, le schéma est extensible à des discrétisations plus riches que celle du schéma MAC (par exemple la discrétisation Volume-Éléments finis [27, 34]).

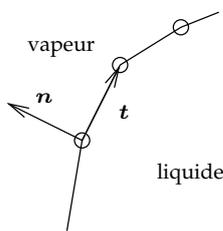
On peut remarquer que les approches «VOF» et «front-tracking» semblent converger vers une même formulation. La formulation VOF d'origine a ainsi été modifiée [65] par l'ajout d'un maillage lagrangien des interfaces. Elle constitue maintenant une méthode «VOF avec marqueurs» (à notre connaissance, une telle méthode n'existe cependant pas encore en 3D). Notre méthode de front-tracking comporte déjà un maillage lagrangien des interfaces, et la discrétisation actuelle des grandeurs à partir de bilans sur les volumes de contrôles la rapproche des méthodes VOF. Une telle convergence est peut-être le signe que l'on s'approche d'une formulation optimale pour ce type de problèmes...

3.2 Définition des grandeurs discrètes

Nous utiliserons les conventions de notation suivantes pour les grandeurs discrètes :

- les grandeurs discrétisées sur le maillage eulérien (fixe) sont notées avec une barre supérieure : pression \bar{P} , température \bar{T} , divergence de la vitesse $\bar{\nabla} \cdot \bar{v}$, etc.
- les grandeurs discrétisées sur le maillage lagrangien (des interfaces) sont notées avec un chapeau : vitesse \hat{v} , courbure \hat{c} , tension de surface $\hat{\sigma}$, flux de masse \hat{m} , etc.

3.2.1 Le maillage de l'interface



En deux dimensions, l'interface est définie par un maillage constitué de nœuds reliés par des segments. Par convention, les segments sont orientés de sorte que la vapeur se trouve à gauche (figure ci-contre). En trois dimensions, l'interface sera une réunion de triangles dont la normale est orientée vers la vapeur.

Pour le bon fonctionnement des algorithmes, le maillage doit vérifier certaines propriétés topologiques :

- deux segments d'interface ne se coupent jamais,
- soit les interfaces sont fermées, soit leurs extrémités (les nœuds n'ayant qu'un seul segment raccordé) sont situées sur un bord du domaine,
- les interfaces définissent donc des volumes fermés, on demande que toutes les interfaces définissant le bord d'un volume aient leurs normales orientées dans la même direction.

Ces propriétés assurent la cohérence topologique du maillage, en particulier la définition du contenu (gaz ou liquide) des volumes définis par les interfaces.

Les interfaces sont considérées comme une succession de segments. En particulier, on ne cherche pas à augmenter l'ordre de la méthode par l'utilisation de splines pour le calcul de l'indicatrice. En effet, les propriétés topologiques énoncées plus haut sont plus faciles à vérifier avec l'utilisation des segments. Les algorithmes sont plus faciles à mettre en œuvre et plus robustes. Si cette méthode simple donne des résultats satisfaisants, on peut penser qu'en trois dimensions, un maillage en triangles n'ayant pas plus de propriétés de régularité conviendra aussi. Au vu des difficultés rencontrées dans la gestion des maillages surfaciques en trois dimensions, il semble judicieux de privilégier les méthodes les plus simples et les plus robustes.

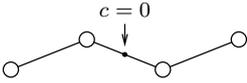
Définitions

On appellera Γ l'ensemble des interfaces et E un élément d'interface (segment en 2D et triangle en 3D).

Nous utiliserons quelques fois la notion de «portion d'interface connexe complète». La connexité signifie que l'on peut passer d'un nœud à n'importe quel autre de la portion d'interface en traversant des éléments de proche en proche. On parle de portion complète si pour tout élément de la portion, ses voisins y sont aussi. Ainsi, si une portion complète a des bords, ces derniers sont forcément sur un bord du domaine.

3.2.2 Courbure des interfaces

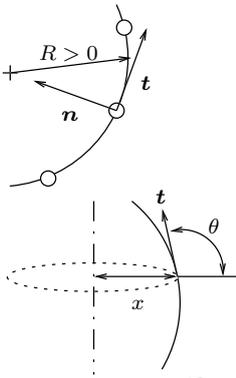
La courbure est calculée aux nœuds du maillage surfacique. Ce choix est impératif pour que la tension de surface qui en résulte n'admette que la solution «courbure constante» pour solution stationnaire du problème. Si on choisissait de discrétiser la courbure aux centres des segments, elle serait nulle pour le profil d'interface représenté ci-contre et ce profil serait une solution numérique stationnaire.



On peut envisager deux formulations de la courbure discrète :

- une formulation fondée sur une interpolation géométrique,
- une formulation fondée sur la différentielle de l'énergie d'interface.

Formulation géométrique



La première est la plus intuitive en deux dimensions : on utilise la définition géométrique de la courbure

$$c(s) \doteq \frac{\partial t}{\partial s} \cdot n \quad (3.2)$$

où s est l'abscisse curviligne en paramétrage normal. Traçons le cercle passant par le point de l'interface et ses deux voisins. La courbure bidimensionnelle est l'inverse signé du rayon R du cercle (courbure positive si le centre du cercle est dans la vapeur, négative sinon). En géométrie axisymétrique, il faut ajouter la courbure dans l'autre direction qui s'écrit $c_2 = \sin \theta / x$ (figure ci-contre).

Formulation énergétique

La deuxième définition est à la fois plus élégante, plus rigoureuse et s'étend directement au calcul en trois dimensions. Elle fait l'objet d'un long développement où l'on discute de la discrétisation des forces interfaciales et des courants parasites en 3.3.

N'ayant pas eu le temps de réaliser la mise en œuvre de cette méthode, les résultats numériques présentés dans ce mémoire sont obtenus avec l'approche géométrique du calcul de la courbure.

3.2.3 Relations de passage conservatives entre le maillage eulérien et le maillage lagrangien

Plusieurs étapes de l'algorithme nécessitent de passer d'une grandeur définie aux nœuds des interfaces à une grandeur définie sur le maillage fixe et réciproquement. On voudra écrire des bilans exacts sur ces grandeurs et nous avons besoin d'une définition rigoureuse des opérateurs d'interpolation. On définit ci-dessous des opérateurs d'interpolation et les relations de conservation qu'ils vérifient. Ces définitions sont très simples mais leur mise en forme est un peu technique et reportée en annexe D.1

On note $\bar{\mathcal{G}}$ l'opérateur permettant de passer d'une grandeur surfacique à une grandeur volumique, et $\hat{\mathcal{G}}$ l'opérateur réciproque. Pour des champs discrets \hat{f} et \bar{f} , on note :

$$\hat{f} = \hat{\mathcal{G}}(\bar{f}) \quad (3.3)$$

$$\bar{f} = \bar{\mathcal{G}}(\hat{f}) \quad (3.4)$$

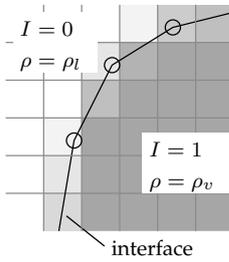
Remarque importante : ces opérateurs ne sont pas inverses l'un de l'autre. Si l'on passe d'une grandeur surfacique à une grandeur volumique, puis à nouveau à une grandeur surfacique, l'intégrale est conservée mais les valeurs aux nœuds subissent une diffusion numérique due aux interpolations successives :

$$\hat{G}(\bar{G}(\hat{f})) \neq \hat{f} \quad (3.5)$$

La propriété la plus importante vérifiée par ces opérateurs est la relation de conservation suivante, où Γ représente une portion connexe complète d'interfaces et Ω l'ensemble des éléments du maillage eulérien traversés par Γ :

$$\int_{\Gamma} \tilde{f}(x) ds = \int_{\Omega} \bar{f}(\Omega) d\Omega \quad (3.6)$$

3.2.4 Indicatrice de phase et masse volumique



L'indicatrice discrète \bar{I} d'un élément de volume Ω est définie comme la fraction du volume de l'élément occupée par la phase gazeuse. C'est donc le taux de vide moyen dans l'élément. La masse volumique $\bar{\rho}$ d'un élément est la masse volumique moyenne dans cet élément, définie par :

$$\bar{\rho} \doteq \frac{1}{V_{\Omega}} \int_{\Omega} \rho d\Omega \quad (3.7)$$

On a les relations suivantes :

$$\bar{\rho} = \rho_v \bar{I} + \rho_l (1 - \bar{I}) \quad (3.8)$$

$$\bar{I} = \frac{\bar{\rho} - \rho_l}{\rho_v - \rho_l} \quad (3.9)$$

L'indicatrice est calculée en fonction de la position des nœuds de l'interface par un algorithme géométrique exact. L'algorithme est identique à celui proposé par Popinet [65], sauf que nous n'utilisons que les segments de l'interface et non une interpolation par splines.

3.2.5 Discrétisation de la vitesse et de la pression

Choix d'une formulation en vitesse ou en quantité de mouvement

Nous disposons d'une discrétisation de la masse volumique, au travers de l'indicatrice.

Il s'agit maintenant de choisir si on discrétise la vitesse v ou la quantité de mouvement ρv . Il s'agit en fait de faire le choix de privilégier la conservation du volume ou la conservation de la quantité de mouvement.

Dans le premier cas, on définit la vitesse discrète sur une face comme la moyenne de la vitesse sur cette face et au cours du pas de temps. La condition d'incompressibilité est alors très facile à écrire et se traduit de manière exacte en termes de variables discrètes :

$$\overline{\nabla \cdot v} = 0 \Leftrightarrow \forall \Omega, \int_{\partial\Omega} \bar{v} \cdot \bar{n} ds = 0 \quad (3.10)$$

En revanche, un bilan de masse local et la conservation de la quantité de mouvement sont beaucoup plus compliqués à obtenir. On peut cependant écrire un bilan de masse global, comme on le verra par la suite. Il faut pour cela définir

la valeur de la quantité de mouvement discrète $\overline{\rho v}$ à partir des autres grandeurs discrètes.

Si l'on choisit de discrétiser la quantité de mouvement $\overline{\rho v}$, sa conservation est facile à obtenir (il suffit d'écrire sa variation sous forme de flux au bord des volumes de contrôle) et un bilan de masse exact peut être écrit. En revanche, la condition d'incompressibilité devient ambiguë localement, dans les régions où la masse volumique varie. En effet, on doit évaluer la vitesse par une formule du type :

$$\bar{v} \hat{=} \frac{\overline{\rho v}}{\bar{\rho}} \quad (3.11)$$

Pour illustrer les problèmes liés à cette discrétisation, considérons un problème dont la solution est un champ de vitesse \bar{v} uniforme. On discrétise la quantité $\overline{\rho v}$ qui est donc discontinue aux interfaces. Les différents éléments du schéma numérique (opérateurs de diffusion et de convection notamment) introduisent des erreurs numériques lors du traitement de cette grandeur discontinue, en particulier une diffusion numérique. Si on tente ensuite de calculer une vitesse \bar{v} en divisant par $\bar{\rho}$, la vitesse n'est plus uniforme.

Une telle erreur aurait des conséquences fâcheuses en front-tracking. Elle augmenterait d'ailleurs avec le rapport de masse volumique. Les interfaces ne seraient pas transportées sans déformation même si la solution du problème est un champ de vitesse uniforme. Cela implique que l'on modifie l'énergie de surface des interfaces, ce qui conduit à des courants parasites ou des instabilités numériques (voir à ce propos le schéma de transport des interfaces en 3.4.3).

Il n'est pas exclu que l'on puisse construire un schéma numérique de transport de $\overline{\rho v}$ qui ait de bonnes propriétés, mais le choix retenu pour l'instant est d'utiliser une discrétisation de la vitesse.

Discrétisation

Dans la mise en œuvre actuelle, la discrétisation de la vitesse et de la pression est de type «marker and cell». La pression est discrétisée au centre des volumes de contrôle Ω_x et Ω_y . Dans la formulation classique on donne les définitions suivantes pour la vitesse :

- les faces verticales portent une composante de vitesse horizontale \bar{v}_x ,
- les faces horizontales portent une composante de vitesse verticale \bar{v}_y ,
- et en 3D, on définit de même la troisième composante de vitesse.

Les composantes sont supposées constantes sur les volumes de contrôle Ω' centrés sur chaque face. La vitesse a alors les deux interprétations suivantes :

$$\bar{v}_x = \int_{\Gamma_x} \mathbf{v} \cdot \mathbf{x} \, ds \quad (3.12)$$

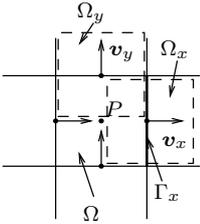
$$\bar{v}_x = \frac{1}{\rho} \int_{\Omega_x} \rho \mathbf{v}_x \, d\Omega \quad (3.13)$$

La première permet d'écrire le bilan de masse conservatif sur Ω et de définir l'incompressibilité du fluide sur les équations discrètes (hors changement de phase, voir plus loin) :

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = 0 \quad (3.14)$$

La deuxième permet d'écrire un bilan de quantité de mouvement discret conservatif, à condition que $\bar{\rho}$ soit constant.

Si la masse volumique n'est pas constante dans le temps, l'écriture des bilans devient très compliquée. Avec le schéma en temps explicite utilisé actuellement, le bilan n'est respecté qu'approximativement dans les éléments où la masse volumique varie.



3.2.6 Discrétisation de l'énergie interne

Là encore, il faut choisir la grandeur discrète pour représenter l'énergie interne du fluide. Une discrétisation de l'énergie permet d'écrire facilement un schéma conservatif, ce qui semble important dans le cas du changement de phase. Dans ce cas, le calcul du flux de chaleur de la loi de Fourier et de l'évaporation implique une estimation de la température en fonction de l'énergie interne. Or tout comme avec la quantité de mouvement, on doit pour cela diviser l'énergie par une grandeur qui tend vers zéro dans la vapeur. Une mauvaise estimation de cette grandeur peut conduire à des températures non bornées, en violation du deuxième principe de la thermodynamique.

Si on discrétise la température au contraire, le deuxième principe est facile à vérifier (il conduit aux critères de stabilité en temps des schémas explicites), mais la conservation de l'énergie est plus difficile à assurer dans les régions où ρc_P varie.

La formulation actuelle utilise une discrétisation de la température et n'est donc pas conservative en énergie. On pose :

$$\bar{T} \triangleq \frac{\int_{\Omega} \rho c_P T d\Omega}{\int_{\Omega} \rho c_P d\Omega} \quad (3.15)$$

De façon cohérente avec cette définition, la capacité calorifique de l'élément s'écrit :

$$\overline{\rho c_P} \triangleq \frac{\int_{\Omega} \rho c_P d\Omega}{V_{\Omega}} = \rho_v c_{P_v} \bar{T} + \rho_l c_{P_l} (1 - \bar{T}) \quad (3.16)$$

3.2.7 Transfert de chaleur et de masse aux interfaces

Température de saturation

D'après les équations continues utilisées, la température de saturation locale dépend de la courbure des interfaces et s'exprime en fonction des pressions de part et d'autre de l'interface. On rappelle l'équation 1.76 :

$$\begin{aligned} T_{sat} = T_{sat}(P), \quad \text{avec } P &= P_v + \frac{\rho_v}{\rho_l - \rho_v} \sigma c + \frac{1}{2} P_r \\ &= P_l + \frac{\rho_l}{\rho_l - \rho_v} \sigma c - \frac{1}{2} P_r \end{aligned} \quad (3.17)$$

Avec la demie-somme des deux expressions de la pression, on obtient la relation suivante :

$$P = \frac{1}{2} \left(P_v + P_l + \frac{\rho_l + \rho_v}{\rho_l - \rho_v} \sigma c \right) \quad (3.18)$$

Or, à l'équilibre, le champ de pression discret \bar{P} vérifie l'équation 3.69 construite à partir des termes sources de tension de surface :

$$\bar{P} = \bar{\kappa} \bar{I} - \bar{\rho} \bar{\phi} + P_0, \quad \text{avec } \begin{cases} \bar{\kappa} = \sigma c + (\rho_v - \rho_l) \phi = \text{constante} \\ P_0 = \text{constante} \end{cases} \quad (3.19)$$

De cette propriété, on déduit une expression de la pression dans le liquide et dans la vapeur de part et d'autre de l'interface :

$$P_l = P_0 - \rho_l \phi = \bar{P} - \bar{\rho} \bar{\phi} - \kappa \bar{I} - \rho_l \phi \quad (3.20)$$

$$P_v = P_0 - \rho_v \phi + \kappa = \bar{P} - \bar{\rho} \bar{\phi} - \kappa \bar{I} + \rho_v \phi + \kappa \quad (3.21)$$

Cette expression est symbolique car la définition exacte de ϕ n'est pas précisée (la seule valeur connue est celle de $\bar{\kappa}$, dont on sait qu'elle est constante à l'équilibre). Remplaçons maintenant les expressions de P_l et P_v dans l'équation 3.18 :

$$P = \bar{P} + \bar{\rho}\bar{\phi} - \kappa\bar{I} + \frac{1}{2} \left(\kappa - (\rho_v + \rho_l)\phi + \frac{\rho_l + \rho_v}{\rho_l - \rho_v} \sigma c \right) \quad (3.22)$$

$$= \bar{P} + \bar{\rho}\bar{\phi} - \kappa\bar{I} + \kappa \quad (3.23)$$

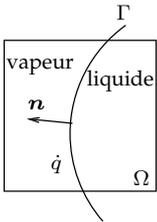
Cette propriété suggère d'utiliser l'expression suivante, exacte à l'équilibre, de la température de saturation en fonction des champs discrets \bar{P} , \bar{I} et $\bar{\kappa}$:

$$\overline{T_{sat}} \hat{=} T_{sat}(P), \quad \text{avec } P \hat{=} \bar{P} + \bar{\rho}\bar{\phi} + (1 - I)\bar{\kappa} \quad (3.24)$$

Cette équation paraît très simple à mettre en œuvre. De plus, si $\bar{\kappa}$ est constante, le système discret peut-être simultanément à l'équilibre mécanique et à l'équilibre thermique. En effet, d'une part le champ de vitesse nul est solution du système (voir 3.3) ce qui correspond à l'équilibre mécanique, et d'autre part $\overline{T_{sat}}$ est constant donc le champ de température constant $T = T_{sat}$ est une solution stationnaire du système d'équations (en présence de gravité, ce résultat n'est pas immédiat sur le système discret). Malheureusement, elle introduit un couplage extrêmement fort entre l'équation de température et l'équation de quantité de mouvement. Sans un traitement particulier (traitement implicite de la variation de température de saturation), le schéma numérique est très instable et nous n'avons pas encore abordé ce problème. Les calculs présentés dans ce mémoire utilisent donc une valeur constante de la température de saturation.

Enthalpie de changement de phase

On définit maintenant la puissance volumique de changement de phase sur un volume de contrôle Ω . C'est l'intégrale du flux de chaleur des phases vers les interfaces contenues dans ce volume :

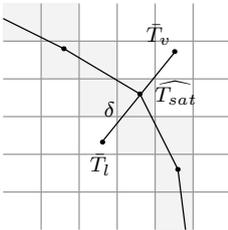


$$\bar{h} \hat{=} \frac{1}{V_\Omega} \int_{\Gamma \cap \Omega} \dot{q} ds \quad (3.25)$$

Dans la formulation continue des équations, le flux \dot{q} s'exprime à partir du flux de chaleur de part et d'autre de l'interface :

$$\dot{q} = -k_l \nabla T_l \cdot \mathbf{n} + k_v \nabla T_v \cdot \mathbf{n} \quad (3.26)$$

On peut construire un équivalent discret de cette formulation et calculer un flux de chaleur \hat{q} discrétisé aux nœuds de l'interface de la façon suivante (c'est la méthode employée par Duquennoy [21] et [76]) :



$$\hat{q} \hat{=} k_l \frac{\hat{T}_l - \widehat{T_{sat}}}{\delta} + k_v \frac{\hat{T}_v - \widehat{T_{sat}}}{\delta} \quad (3.27)$$

Cette méthode a plusieurs inconvénients :

- il faut interpoler la température au-delà de l'interface, ce qui pose problème près des bords du domaine,
- il faut ensuite construire explicitement un terme source pour l'énergie sur le maillage fixe et ce terme source peut conduire à des incohérences (par exemple le transfert de chaleur d'une phase à l'autre alors que physiquement l'interface doit être à T_{sat}),
- le contrôle précis du flux de chaleur près des lignes de contact est compliqué.

Pour ces raisons, on lui préfère une formulation différente, plus proche peut-être des raisonnements VOF. À partir de la température discrète \bar{T} d'un élément, on reconstruit un modèle de sous-maille du champ de température continu dans l'élément en utilisant la position des interfaces. De ce champ de température, on déduit la valeur du flux de chaleur \dot{q} et de l'enthalpie de changement de phase \hat{h} .

Le modèle de sous-maille mis en œuvre pour l'instant est simple et peu précis. On modélise le flux de chaleur \dot{q} à l'interface comme

$$\dot{q} \hat{=} \frac{k (\bar{T} - \overline{T_{sat}})}{\delta_R + \delta} \quad (3.28)$$

où k est la conductivité thermique du liquide, δ_R l'épaisseur équivalente de résistance d'interface et δ une dimension caractéristique égale au quart de la taille de l'élément Ω (cette valeur permet de retrouver le flux de chaleur moyen lorsque l'interface traverse un élément de volume de part en part).

On écrit ensuite la puissance volumique de changement de phase sous la forme suivante :

$$\bar{h} \hat{=} \frac{\dot{q} \cdot \text{surface}(\Gamma \cap \Omega)}{\overline{V_\Omega}} \quad (3.29)$$

La variation de température \bar{T} qui en résulte en un pas de temps Δt est :

$$\Delta \bar{T} = - \frac{\bar{h}}{\rho c_P} \Delta t \quad (3.30)$$

Il convient donc de majorer cette valeur pour assurer la stabilité en temps du schéma (pour que la température ne passe pas d'une valeur supérieure à T_{sat} à une valeur inférieure). On impose :

$$|\bar{h}| \leq \overline{\rho c_P} |\bar{T} - \overline{T_{sat}}| \Delta t \quad (3.31)$$

On a choisi de privilégier le transfert de chaleur dans le liquide, ce qui convient pour les calculs du chapitre suivant. Pour être plus précis, il faudrait explorer le champ de température des mailles voisines pour déterminer quelle est la part du flux de chaleur provenant du liquide et de la vapeur. Une autre solution consiste à discrétiser deux champs de température — un pour le liquide et un pour la vapeur — à l'image des méthodes moyennées.

Un modèle encore plus fruste peut être utilisé : on utilise une conductivité thermique infinie dans l'élément. Ainsi, les éléments contenant une interface ont toujours une température $\bar{T} = \overline{T_{sat}}$. La précision spatiale de ce modèle n'est pas beaucoup plus faible que celle du précédent (il est consistant et d'ordre 1 en espace) mais le flux de chaleur est discontinu en temps lorsque l'interface pénètre un nouvel élément. Ces discontinuités provoquent des à-coups de vitesse et de pression qui rendent les calculs difficilement exploitables.

Flux de masse aux interfaces

On voudrait définir le transfert de masse volumique sur le maillage eulérien comme suit :

$$\bar{m} \hat{=} \frac{1}{\overline{V_\Omega}} \int_{\Omega \cap \Gamma} \dot{m} ds \quad (3.32)$$

Puisque $\dot{q} = \mathcal{L} \dot{m}$, la relation entre \bar{h} et \bar{m} s'écrit :

$$\bar{m} = \frac{\bar{h}}{\mathcal{L}} \quad (3.33)$$

Toutefois, pour des raisons de stabilité (numérique) de l'énergie de tension interfaciale, il est nécessaire de réduire les irrégularités du champ \bar{h} . Le flux de masse \bar{m} servira en effet à définir la divergence discrète du champ de vitesse pour l'équation de quantité de mouvement (voir 3.2.8). L'irrégularité de \bar{h} se traduira donc par une irrégularité du champ de vitesse et donc de la géométrie des interfaces.

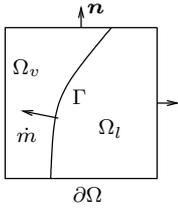
Nous avons constaté des instabilités du profil des interfaces dans certains cas, qui ont pu être réduites par un léger filtrage spatial du flux de masse. Ce filtrage consiste à passer de façon conservative de \bar{m} à \hat{m} , puis à nouveau à \bar{m} . Le flux total est conservé mais il subit une diffusion numérique suffisante pour résoudre ce problème. De plus, on ajoute au flux de masse \hat{m} la contribution singulière \hat{m}_s des lignes de contact, et à \bar{m} la contribution \bar{m}_f de l'évaporation des films de liquide en paroi.

L'expression des flux de masse sur les deux maillages est donc la suivante :

$$\hat{m} \hat{=} \frac{1}{\mathcal{L}} \hat{\mathcal{G}}(\bar{h}) + \hat{m}_s \quad (3.34)$$

$$\bar{m} \hat{=} \bar{\mathcal{G}}(\hat{m}) + \bar{m}_f \quad (3.35)$$

3.2.8 Divergence discrète de la vitesse



On considère un élément Ω du maillage eulérien de bord $\partial\Omega$ traversé par une interface Γ . On note Ω_l le volume occupé par le liquide et Ω_v le volume occupé par la vapeur. On a la relation suivante pour le champ de vitesse continu :

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, ds = \underbrace{\int_{\Omega_l} \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\Omega}_{=0} + \underbrace{\int_{\Omega_v} \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\Omega}_{=0} + \int_{\Gamma} (\mathbf{v}_v - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n} \, ds \quad (3.36)$$

$$= \int_{\Gamma} \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) ds \quad (3.37)$$

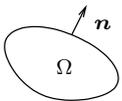
Cette propriété des équations continues se traduit sous la forme suivante, où l'on définit la divergence discrète de la vitesse dans l'élément Ω :

$$\overline{\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}}(\Omega) \hat{=} \bar{m} \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) \quad (3.38)$$

Le schéma numérique de projection assure alors la propriété suivante du champ de vitesse discret quel que soit le volume Ω réunion d'éléments du maillage eulérien :

$$\int_{\partial\Omega} \bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} \, ds = \overline{\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}}(\Omega) \bar{V}_{\Omega} \quad (3.39)$$

3.2.9 Variation de volume

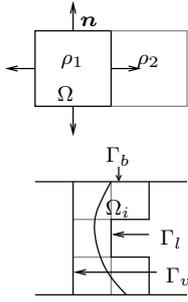


Considérons un volume de fluide Ω de bord $\partial\Omega$ dans l'espace continu. En utilisant l'équation 3.9, la variation du volume de gaz dans ce volume s'écrit :

$$\partial_t \int_{\Omega} I \, d\Omega = \frac{1}{\rho_v - \rho_l} \partial_t \int_{\Omega} \rho \, d\Omega = -\frac{1}{\rho_v - \rho_l} \int_{\partial\Omega} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, ds \quad (3.40)$$

En s'inspirant de cette équation, on définit la grandeur discrète suivante sur les éléments du maillage eulérien, où la valeur de ρ reste à définir :

$$\bar{V}' \hat{=} \frac{1}{(\rho_l - \rho_v) \text{volume}(\Omega)} \int_{\partial\Omega} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, ds \quad (3.41)$$



Pour la suite, on veut que V' vérifie la propriété globale suivante pour un ensemble d'éléments Ω_i contenant une interface (on sépare les frontières de Ω_i en trois domaines, selon que la frontière est en contact avec un élément plein de liquide, de vapeur ou mixte) :

$$\int_{\Gamma_l} \rho_l \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds + \int_{\Gamma_v} \rho_v \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds + \int_{\Gamma_b} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds = (\rho_l - \rho_v) \int_{\Omega_i} V' d\Omega \quad (3.42)$$

Pour obtenir cette propriété, la masse volumique ρ sur une face doit être calculée de la façon suivante en fonction des masses volumiques ρ_1 et ρ_2 des éléments voisins :

$$\rho_1 = \rho_l \quad \text{ou} \quad \rho_2 = \rho_l \Rightarrow \rho \hat{=} \rho_l, \quad (3.43)$$

$$\rho_1 = \rho_v \quad \text{ou} \quad \rho_2 = \rho_v \Rightarrow \rho \hat{=} \rho_v, \quad (3.44)$$

sinon

$$\rho \hat{=} (\rho_l + \rho_v)/2. \quad (3.45)$$

Le choix fait pour le troisième cas n'est pas impératif et on a même intérêt à utiliser une meilleure approximation de la masse volumique moyenne sur la face. Il n'a cependant pas d'incidence sur les propriétés de conservation que l'on veut obtenir.

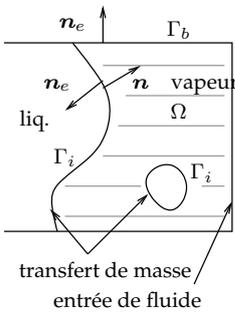
Remarque : cette valeur de la masse volumique aux faces est spécifique au calcul de V' (on utilise une autre expression pour les bilans de quantité de mouvement).

3.2.10 Bilan de masse des phases

Le but de cette démonstration un peu technique est d'obtenir une condition géométrique sur le déplacement des nœuds de l'interface pour que le bilan de masse des inclusions soit respecté exactement. Comme nous l'avons mentionné au début du chapitre, cette propriété est un ingrédient essentiel et non trivial de la méthode numérique. La démonstration commence par la définition du bilan de masse continu.

Définition du bilan de masse des phases

On veut assurer la conservation de la masse des phases dans la formulation discrète des équations. Pour un domaine $\Omega(t)$ borné par des interfaces mobiles Γ_i et des bords fixes Γ_b et ne contenant qu'une seule phase de masse volumique ρ , le bilan continu s'écrit



$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega(t)} \rho d\Omega = \underbrace{\int_{\Gamma_i} -\dot{m} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_e ds}_{\text{transfert de masse}} - \underbrace{\int_{\Gamma_b} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds}_{\text{entrée de fluide}} \quad (3.46)$$

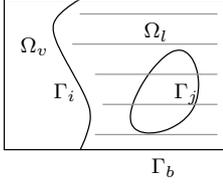
où \mathbf{n} est la normale aux interfaces dirigée vers la vapeur et \mathbf{n}_e est la normale extérieure au domaine Ω . En divisant par ρ (constant dans les phases), on obtient une équation équivalente qui exprime le bilan de volume des phases :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega(t)} d\Omega = \partial_t \text{vol.}(\Omega) = \int_{\Gamma_i} -\frac{\dot{m}}{\rho} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_e ds - \int_{\Gamma_b} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds \quad (3.47)$$

Le volume Ω des interfaces discrétisées est calculable exactement, de même que l'intégrale du débit volumique sur les bords et du flux de masse sur les interfaces. On cherche à exprimer une condition locale sur le déplacement des interfaces pour que le bilan discret global soit vérifié.

Bilan de volume d'une interface

Considérons une portion d'interface connexe Γ_i complète (si cette surface a des bords, ils sont situés sur un bord du domaine fluide). Cette interface divise le fluide en deux parties Ω_l et Ω_v désignées en fonction de la phase directement adjacente à l'interface, chaque volume contenant éventuellement d'autres interfaces Γ_j . Pour chacun des deux volumes, on considère la somme des variations de volume 3.47 des phases qu'il contient. Les interfaces Γ_j intérieures au volume contribuent pour deux termes au bilan, une fois pour le liquide et une fois pour la vapeur. Le bilan total s'écrit (par exemple pour le volume Ω_l) :

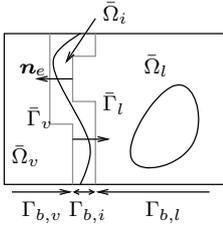


$$\partial_t \text{vol.}(\Omega_l) = \int_{\Gamma_i} -\frac{\dot{m}}{\rho_l} ds - \int_{\Gamma_b} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds + \int_{\Gamma_j} \left(-\frac{\dot{m}}{\rho_l} + \frac{\dot{m}}{\rho_v} \right) ds \quad (3.48)$$

Considérons les deux derniers termes de cette somme. Le dernier a une contrepartie discrète exacte donnée par l'équation 3.38 :

$$\int_{\Gamma_j} \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) ds - \int_{\Gamma_b} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds = \int_{\bar{\Omega}_l} (\nabla \cdot \mathbf{v}) d\Omega - \int_{\Gamma_b} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds \quad (3.49)$$

Le bilan de masse discret 3.39 ne s'applique qu'à un domaine borné par des faces du maillage. Considérons donc les volumes discrets $\bar{\Omega}_v$, $\bar{\Omega}_l$ et $\bar{\Omega}_i$ représentés sur la figure ci-contre. Le bilan discret appliqué à $\bar{\Omega}_v$ et $\bar{\Omega}_l$ donne, par exemple sur $\bar{\Omega}_l$:



$$\int_{\Gamma_j} \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) ds - \int_{\Gamma_{b,l}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds = \int_{\bar{\Gamma}_l} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds \quad (3.50)$$

Utilisons cette expression dans l'équation 3.48. Le bord Γ_b se décompose en $\Gamma_{l,b}$ (pris en compte dans le bilan discret) et $\Gamma_{b,i} \cap \Gamma_b$ qui n'est pas pris en compte.

$$\partial_t \text{vol.}(\Omega_l) = \int_{\Gamma_i} -\frac{\dot{m}}{\rho_l} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_e ds + \int_{\bar{\Gamma}_l} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds + \int_{\Gamma_{b,i} \cap \Omega_l} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds \quad (3.51)$$

$$= -\partial_t \text{vol.}(\Omega_v) = - \int_{\Gamma_i} \frac{\dot{m}}{\rho_v} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_e ds - \int_{\bar{\Gamma}_v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds + \int_{\Gamma_{b,i} \cap \Omega_v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds \quad (3.52)$$

Les intégrales sur $\Gamma_{b,i}$ n'ont pas de contrepartie discrète exacte (le domaine d'intégration est une fraction de maille qui change au cours du pas de temps), sauf si la vitesse $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e$ est explicitement nulle (condition aux limites de paroi fixe par exemple). Ainsi, le bilan discret de volume des phases est exact seulement si les lignes de contact sont situées sur des bords fermés du domaine. Supposons pour la suite que c'est le cas.

Expression du bilan de volume discret d'une interface

En multipliant $\partial_t \text{vol.}(\Omega_l)$ par ρ_l et $\partial_t \text{vol.}(\Omega_v)$ par ρ_v et en sommant, on a :

$$\rho_v \partial_t \text{vol.}(\Omega_v) - \rho_l \partial_t \text{vol.}(\Omega_v) = \rho_l \int_{\bar{\Gamma}_l} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds + \rho_v \int_{\bar{\Gamma}_v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_e ds \quad (3.53)$$

Enfin, en utilisant la propriété 3.42 :

$$\partial_t \text{vol.}(\Omega_v) = \int_{\bar{\Omega}_i} V' d\Omega \quad (3.54)$$

Comme les vitesses discrètes sont constantes au cours d'un pas de temps Δt , on a :

$$\Delta \text{vol.}(\Omega_v) = \Delta t \int_{\bar{\Omega}_i} V' d\Omega \quad (3.55)$$

Pour assurer la conservation du volume des phases, il faut donc s'assurer que la variation de volume géométrique de chaque portion d'interface connexe au cours du pas de temps est égale à l'intégrale discrète de V' . Pour cela, on attribue à chaque nœud d'interface une variation de volume V'_i , à l'aide des relations de passage conservatives. Le déplacement de chaque nœud devra alors contribuer à la variation de volume qui lui est associée (voir plus loin l'algorithme de transport des interfaces).

Conclusion sur le bilan de volume

On a obtenu une condition géométrique sur le déplacement des interfaces et les vitesses sur le maillage fixe pour respecter le bilan de masse exact des phases. Cette condition utilise uniquement la grandeur locale V' pour le maillage fixe. On a essentiellement utilisé deux ingrédients :

- le bilan exact de volume sur le champ de vitesse discret dans les phases, procuré par le schéma de projection (équation 3.39),
- et la répartition conservative des flux de masse \dot{m}_i , sur les volumes contenant les interfaces.

Le bilan à partir de la variation de volume V' est semi-local : les V' et le déplacement de chaque nœud ne dépendent que des vitesses eulériennes sur un voisinage du nœud. On n'a cependant pas de propriété de bilan local. En particulier, on ne peut pas écrire l'équation idéale suivante sur la variation de l'indicatrice au cours du pas de temps, qui est l'équivalent discret de l'équation 3.40 :

$$\Delta \int_{\Omega} I \, d\Omega = - \frac{\Delta t}{\rho_v - \rho_l} \int_{\partial\Omega} \rho v \cdot \mathbf{n} \, ds \quad (3.56)$$

Cette propriété très intéressante nécessiterait plusieurs ingrédients dont au moins les deux suivants :

- une expression exacte de V' , notamment dans l'expression 3.45 (le calcul «exact» est à la base des méthodes VOF, et sa construction est loin d'être triviale),
- un transport des interfaces qui respecte exactement la variation de volume V' élément par élément (il faudrait pour cela que l'interface ait suffisamment de nœuds, au moins un par élément, et cette condition est contradictoire avec le critère de stabilité de la tension de surface qui impose exactement l'inverse).

En fait, une telle propriété oblige pratiquement à utiliser la formulation VOF et même ainsi, elle est difficile à obtenir (voir [7]).

Cet algorithme présente cependant deux avantages par rapport à une correction globale telle que celle mise en œuvre par Juric [76] :

- on obtient non seulement une conservation globale exacte du volume, mais aussi une conservation «quasi-locale»,
- il tient implicitement compte des flux de masse aux entrées du domaine et des variations de volume des autres interfaces du domaine.

3.3 Les forces interfaciales et les courants parasites

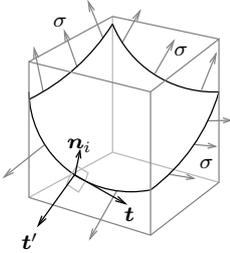
La discrétisation des forces interfaciales est une étape très importante de la méthode numérique. De nombreuses implémentations des méthodes de front-tracking et des méthodes VOF souffrent de champs de vitesse parasites à cause d'une inconsistance dans la discrétisation de ces forces. Une étape décisive vers la résolution de ce problème a été franchie par Jamet *et al.* [42]. Leur étude apporte un éclairage nouveau sur le problème par une interprétation physique : les

courants parasites témoignent d'une inconsistance dans le bilan d'énergie du système discret. Les approches précédentes consistaient à tester différentes formulations des équations continues et à discrétiser celles-ci avec des schémas de plus en plus précis. Effectivement, cette démarche permet de réduire de plus en plus l'intensité des courants parasites, mais jamais de les annuler. Au lieu de chercher à augmenter la précision de la discrétisation, Jamet suggère de s'intéresser à la définition précise d'un bilan d'énergie discret. Cette démarche permet d'aboutir à un schéma numérique sans aucun courant parasite pour la méthode du second-gradient.

Nous allons suivre une démarche très similaire : la méthode proposée est fondée sur la définition de l'énergie mécanique discrète du système, et sur l'assurance que cette énergie décroît si le système est isolé. Les seules solutions stationnaires d'un tel système ont alors un champ de vitesse nul.

3.3.1 Discrétisation classique et interprétation des courants parasites

La discrétisation des forces interfaciales



Dans les méthodes fondées sur un maillage eulérien, l'expression classique des forces interfaciales s'obtient par un bilan de force sur un volume de contrôle (voir figure ci-contre). On calcule le bilan des forces exercées par l'interface à l'extérieur de Ω sur le bord de ce volume. L'interface exerce une force linéique σ dirigée dans la direction du vecteur \mathbf{t}' sur le volume de contrôle, où

- le vecteur \mathbf{n} est la normale sortante au bord du volume Ω ,
- le vecteur \mathbf{n}_i est la normale unitaire à l'interface (sens indifférent),
- le vecteur \mathbf{t} est défini par $\mathbf{t} = \mathbf{n}_i \times \mathbf{n} / |\mathbf{n}_i \times \mathbf{n}|$,
- et $\mathbf{t}' = \mathbf{t} \times \mathbf{n}_i$.

La force totale exercée par l'interface sur le volume de contrôle s'écrit comme une intégrale linéique sur le bord de l'interface

$$\overline{\mathbf{f}}_\sigma \hat{=} \frac{1}{V_\Omega} \int_{\partial\Omega \cap \Gamma} \sigma(\mathbf{x}) \mathbf{t}' dl \quad (3.57)$$

où la tension de surface σ peut éventuellement varier le long du contour. On exprime les forces interfaciales sous la forme d'une force de volume, de sorte qu'elles apparaissent comme un second membre dans les équations de Navier-Stokes discrètes :

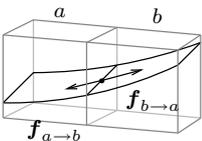
$$\overline{\nabla \cdot \mathbf{v}} = 0 \quad (3.58)$$

$$\partial_i \overline{\rho v_i} + \overline{\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \times \mathbf{v})} + \overline{\nabla P} - \overline{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^D} = \overline{\mathbf{f}}_\sigma + \overline{\rho \mathbf{g}} \quad (3.59)$$

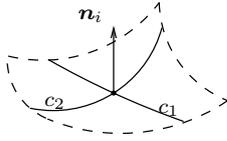
Tout le problème de la discrétisation réside dans l'écriture de la valeur du terme $\overline{\mathbf{f}}_\sigma$. La formulation discrète peut s'appuyer sur deux approches :

- une approche que l'on pourrait qualifier d'«intégrale», où on évalue numériquement l'intégrale de contour,
- une approche «différentielle», où on calcule une approximation de cette intégrale par un développement limité du profil de l'interface.

Dans la première on calcule une intégrale de la force pour chaque face de l'élément de volume à partir de la géométrie des interfaces. On s'arrange pour que les bilans soient conservatifs, c'est-à-dire que la force exercée par les interfaces de l'élément b sur l'élément a soit exactement l'opposé de la force exercée par a sur b . Dans ce cas l'intégrale discrète du terme $\overline{\mathbf{f}}_\sigma$ sur une interface fermée est nulle et le schéma est globalement conservatif en quantité de mouvement.



Dans la deuxième approche, on transforme cette intégrale en utilisant une approximation à l'ordre 2 de la géométrie de l'interface. À partir d'un point de



l'interface, on évalue la normale n_i à l'interface et les courbures principales c_1 et c_2 relativement à n_i . On peut montrer (voir par exemple [6]) qu'au premier ordre par rapport au diamètre du volume Ω , l'intégrale 3.57 s'écrit

$$\overline{f_\sigma} = \frac{\text{surface}(\Omega \cap \Gamma)}{\overline{V_\Omega}} (\sigma (c_1 + c_2) n_i + \nabla_s \sigma) \quad (3.60)$$

où $\nabla_s \sigma$ désigne le gradient de σ le long de la surface (c'est un vecteur dirigé dans le plan tangent à l'interface).

On trouve dans la littérature un grand nombre de variantes fondées sur des combinaisons de ces deux approches. La plus connue est peut-être la méthode CSF (Continuous Surface Force [8]).

Une interprétation des courants parasites

Les courants parasites se manifestent sous la forme de solutions des équations discrètes où un champ de vitesse stationnaire stable s'installe autour des interfaces alors qu'aucune énergie n'est apportée au système. La figure 4.1(d) du chapitre suivant représente le champ de vitesse autour d'une bulle de vapeur au repos dans un domaine fermé avec une discrétisation de type CSF de la tension de surface.

Nous proposons d'interpréter ces courants parasites de la façon suivante : *Les courants parasites viennent du fait que le système discrétisé ne peut pas tendre vers une géométrie des interfaces telle que le champ de vitesse nul soit une solution stationnaire stable des équations discrètes.* On a identifié deux causes possibles à ce phénomène :

- soit une géométrie d'équilibre n'existe pas (le système n'a alors aucune chance de la rejoindre),
- soit l'algorithme de transport des interfaces ne permet pas de rejoindre cette position d'équilibre.

Pour éliminer les courants parasites, les conditions doivent être réunies pour éviter ces deux cas de figure. On analyse maintenant les implications de ces conditions...

3.3.2 Existence de l'équilibre mécanique

Propriétés du terme source de tension de surface à l'équilibre

On examine d'abord les conditions nécessaires pour que l'état d'équilibre existe.

Supposons qu'il existe une géométrie discrétisée des interfaces telle qu'un champ de vitesse nul soit solution des équations de Navier-Stokes. L'équilibre mécanique du système discret à vitesse nulle est caractérisé par l'équation de quantité de mouvement où l'on retire tous les termes qui dépendent de la vitesse :

$$\begin{aligned} \partial_t \overline{\rho \mathbf{v}} + \overline{\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v})} + \overline{\nabla P} - \overline{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^D} &= \overline{f_\sigma} + \overline{\rho \mathbf{g}} \\ \Rightarrow \overline{\nabla P} &= \overline{f_\sigma} + \overline{\rho \mathbf{g}} \end{aligned} \quad (3.61)$$

Il reste donc un équilibre entre le gradient discret de la pression, les termes de tension de surface et la gravité.

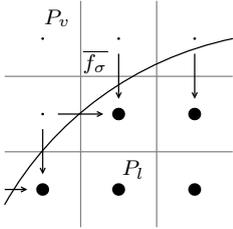
Or, un champ vectoriel discret quelconque n'est pas le gradient d'un champ scalaire, il faut pour cela que son rotationnel soit nul. Les conditions pour que le second membre soit exactement égal au gradient discret d'un champ scalaire ne sont généralement pas remplies si on combine les approches citées précédemment pour calculer $\overline{f_\sigma}$. C'est en particulier le cas pour le second membre calculé

par la méthode CSF et c'est l'une des raisons pour lesquelles cette méthode produit des courants parasites.

Pour résoudre le problème des courants parasites, il faut donc obligatoirement que le second membre soit exactement le gradient discret d'une fonction scalaire à l'équilibre (autrement dit, son rotationnel discret doit être nul à l'équilibre).

Une telle propriété a déjà pu être obtenue dans d'autres méthodes. Popinet et Zaleski [66] proposent un algorithme de front-tracking très semblable au nôtre. Leur approche de la tension de surface est de type «intégrale» et ils introduisent une correction du terme source \overline{f}_σ pour annuler les courants parasites. Le terme correctif semble fondé sur un raisonnement heuristique : ils modifient le calcul du gradient de pression de sorte que la pression discrétisée au centre des volumes de contrôle ne prenne que deux valeurs :

- la valeur P_l de la pression dans le liquide si le centre de l'élément se trouve dans le domaine liquide,
- la valeur P_v de la pression dans la vapeur si le centre de l'élément se trouve dans la vapeur.



Cette méthode est fondée sur l'hypothèse que la pression dans chaque phase est constante à l'équilibre, et que le saut de pression est donné par la relation de Laplace. Elle ne semble donc pas convenir en présence de gravité. Le champ de pression obtenu à l'équilibre est schématisé sur la figure ci-contre. Cette méthode assure que l'état d'équilibre existe : si on place au départ le système dans un état où la courbure des interfaces est constante, alors le champ de vitesse reste strictement nul.

Juric [44] a récemment employé une méthode très similaire qui conduit exactement à la même solution à l'équilibre. Sa démarche consiste à transformer le second membre \overline{f}_σ par une méthode qui elle aussi semble issue d'un raisonnement heuristique. L'effet de cette correction est légèrement différent sur les systèmes hors équilibre mais l'état d'équilibre final est exactement le même que dans l'approche de Popinet et Zaleski.

Ces deux approches assurent l'existence d'un état d'équilibre du système en l'absence de gravité. Elles n'assurent cependant pas que le système tend vers cet état s'il est hors équilibre au départ.

Notre discrétisation du terme source

Les deux approches précédentes ne tiennent pas compte du terme de gravité. Or le terme de gravité ρg n'est pas le gradient d'un scalaire, même au sens discret (sauf si $\rho = \text{constante}$). Seule la somme $\overline{f}_\sigma + \rho g$ s'écrit comme un gradient à l'équilibre. Il faut donc discrétiser ces deux termes ensemble pour espérer parvenir à un équilibre du système discret.

L'expression du second membre de l'équation de quantité de mouvement continue peut s'écrire sous la forme suivante

$$\overline{f}_\sigma + \rho g = \sigma (c_1 + c_2) \nabla I + \nabla_s \sigma - \rho \nabla \phi \quad (3.62)$$

$$= \sigma (c_1 + c_2) \nabla I + \nabla_s \sigma + \phi \nabla \rho - \nabla(\rho \phi) \quad (3.63)$$

$$= (\sigma (c_1 + c_2) + (\rho_v - \rho_l) \phi) \nabla I + \nabla_s \sigma - \nabla(\rho \phi) \quad (3.64)$$

$$= \kappa \nabla I + \nabla_s \sigma - \nabla(\rho \phi), \quad \text{avec } \kappa = \sigma (c_1 + c_2) + (\rho_v - \rho_l) \phi \quad (3.65)$$

où le gradient de l'indicatrice et le gradient de la masse volumique sont pris au sens des distributions, et où le potentiel ϕ des forces de pesanteur est défini par la relation suivante :

$$\mathbf{g} = -\nabla \phi \quad (3.66)$$

Nous proposons d'utiliser cette expression pour obtenir la forme discrète du se-

cond membre :

$$\boxed{\overline{f_\sigma} + \overline{\rho g} \hat{=} \overline{\kappa} \overline{\nabla I} + \overline{\nabla_s \sigma} - \overline{\nabla(\overline{\rho \phi})}} \quad (3.67)$$

La grandeur σ_c qui apparaît dans κ n'est pas naturellement définie sur le maillage eulérien. La courbure est plutôt une propriété géométrique du maillage des interfaces que l'on peut calculer aux nœuds ou au centre des éléments. On se propose donc de définir une grandeur $\hat{\kappa}$ sur les nœuds du maillage surfacique comme

$$\boxed{\hat{\kappa}(\mathbf{x}_i) \hat{=} \hat{\sigma} \hat{c} + (\rho_v - \rho_l) \hat{\phi}} \quad (3.68)$$

où la courbure aux nœuds \hat{c} et le potentiel $\hat{\phi}$ restent à définir. On définit ensuite sa valeur sur le maillage eulérien par un opérateur d'interpolation. Ainsi, si $\hat{\kappa}$ est constante, que σ est constante et que la vitesse est nulle, alors $\overline{\kappa}$ est constant, le système discret est à l'équilibre et on a :

$$\overline{\nabla P} = \overline{\kappa_0} \overline{\nabla I} - \overline{\nabla(\overline{\rho \phi})} \Rightarrow \overline{P} = \overline{\kappa_0} \overline{I} - \overline{\rho \phi} + \text{constante} \quad (3.69)$$

Nous avons donc montré la propriété suivante : *si le second membre est discrétisé sous la forme 3.67, que $\hat{\kappa}$ est constante et que $\hat{\sigma}$ est constante, alors la vitesse nulle est une solution du système discret.* La condition que $\hat{\kappa}$ soit constante est donc suffisante pour avoir un équilibre mécanique.

Il nous reste maintenant à vérifier s'il existe une géométrie des interfaces telle que $\hat{\kappa} = \text{constante}$. Cette assertion n'est pas triviale et fait l'objet de la démonstration de la section suivante, où nous découvrirons que l'élimination des courants parasites impose encore d'autres contraintes bien plus sévères. Avant d'aborder cette démonstration, considérons les points faibles de cette première étape de la discrétisation des forces d'interfaces.

Inconvénients de la discrétisation proposée

Le terme source proposé est en équilibre avec le gradient de pression si les $\hat{\kappa}_i$ sont constants. Plus généralement il est en équilibre si chaque portion d'interface a des valeurs constantes de $\hat{\kappa}_i$, ce qui permet d'avoir un équilibre entre des bulles de rayons différents dans un même domaine. Cependant, dès que deux interfaces ont une face voisine commune du maillage eulérien, l'équilibre n'est possible que si les deux interfaces ont la même courbure. Par exemple, deux bulles très proches et de rayons différents ne peuvent pas être à l'équilibre si elles traversent un même élément du maillage eulérien.

Si les $\hat{\kappa}_i$ ne sont pas constants sur une même interface, alors l'intégrale des termes de tension de surface n'est pas nulle en général, même si l'interface est fermée et en l'absence de gravité. Le terme discret de tension de surface n'est donc pas conservatif pour la quantité de mouvement totale. Cette non-conservation se traduit sur le premier cas-test du chapitre suivant par un déplacement des bulles dans un liquide au repos si l'interface n'est pas initialement à l'équilibre.

3.3.3 Condition d'existence de la géométrie d'équilibre

Existence et caractérisation de la géométrie d'équilibre

Le problème à résoudre consiste maintenant à trouver une expression de $\hat{\kappa}$ telle que le système tende vers un état d'équilibre. Le problème devient très simple si on introduit la notion d'énergie mécanique discrète du système : le second membre $\overline{f_\sigma} + \overline{\rho g}$ représente une force volumique. Cette force produit un travail lorsque le fluide se déplace. Or, l'énergie correspondant à ce travail est

de l'énergie mécanique qui est échangée entre les interfaces et le fluide. Lorsque les interfaces se déforment, elles échangent de l'énergie mécanique avec le fluide, et cet échange est conservatif. Pour supprimer les courants parasites, il suffit d'assurer que le schéma numérique respecte au sens discret la conservation de cet échange d'énergie ou au minimum d'assurer que le bilan d'énergie n'est pas positif.

Pour calculer un bilan d'énergie mécanique, nous avons besoin de définir celle-ci pour le système discret. L'énergie mécanique du système peut être décomposée en deux contributions :

- l'énergie cinétique du fluide,
- l'énergie potentielle, elle-même composée de l'énergie potentielle de pesanteur des phases et de l'énergie de surface des interfaces.

On définit donc l'énergie potentielle u du système comme la somme de l'énergie de surface et de l'énergie potentielle de pesanteur. On se place dans un domaine borné Ω . Dans le cas d'une interface discrétisée par une réunion d'éléments $\Gamma = \bigcup E$ (segments ou triangles), on utilise la définition physique usuelle de l'énergie de surface et de l'énergie de pesanteur :

$$u \doteq \int_{\Gamma} \sigma ds + \int_{\Omega} \rho \phi d\Omega, \quad \text{avec } -\nabla\phi = \mathbf{g} \quad (3.70)$$

À l'aide du maillage surfacique des interfaces sur lequel repose la méthode de front-tracking, cette énergie potentielle discrète peut être évaluée de façon exacte.

On montre (voir annexe D.2) que si on fixe le nombre de nœuds du maillage et si on impose la conservation du volume des phases (système fermé à l'équilibre thermique), alors cette énergie potentielle a un minimum et il existe un maillage qui réalise ce minimum (il n'est cependant pas unique). Soient x_i les positions des nœuds de ce maillage particulier. Physiquement, ce maillage représente un équilibre stable à vitesse nulle des interfaces (c'est le «maillage d'équilibre»). Si on place le système dans cette position, que la vitesse du fluide est nulle et que le bilan de l'échange d'énergie entre les interfaces et le fluide est négatif ou nul, le fluide ne peut recevoir d'énergie des interfaces car celles-ci sont dans leur état d'énergie minimal. La vitesse reste donc nulle.

Cherchons une caractérisation du minimum de l'énergie. Comme u est différentiable par rapport à la position des nœuds x_i , la différentielle de l'énergie à volume imposé est nulle pour ce maillage d'équilibre. Écrivons cette différentielle en ajoutant un multiplicateur de Lagrange L pour la contrainte de volume imposé. On a la propriété suivante : si la différentielle de l'énergie à volume imposé est nulle, alors il existe un scalaire L tel que pour tout déplacement des nœuds du maillage, on a

$$du = \sigma d\left(\int_{\Gamma} ds\right) + d\left(\int_{\Omega} \rho \phi d\Omega\right) + L d\left(\int_{\Omega} (1 - I) d\Omega\right) \quad (3.71)$$

où le dernier terme mesure la variation de volume de la phase liquide. La différentielle de l'énergie totale est la somme des différentielles pour le déplacement de chaque nœud d'interface :

$$\exists L, \forall i, \quad \frac{du}{dx_i} = \underbrace{\sigma \frac{d}{dx_i} \left(\int_{\Gamma} ds\right)}_{\text{énergie de surface}} + \underbrace{\frac{d}{dx_i} \left(\int_{\Omega} \rho \phi d\Omega\right)}_{\text{énergie de pesanteur}} + \underbrace{L \frac{d}{dx_i} \left(\int_{\Omega} (1 - I) d\Omega\right)}_{\text{énergie de volume}} \quad (3.72)$$

Attention : la constante L est la même pour l'ensemble des nœuds du maillage surfacique. La différentielle de chaque intégrale est une forme linéaire. Pour chaque forme linéaire D il existe un vecteur \mathbf{n} tel que $D(\mathbf{x}) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}$. La variation de l'énergie potentielle totale lors du déplacement d'un nœud s'écrit donc

sous la forme suivante :

$$\exists L, \forall i, \quad du = \sigma D_i^s(dx_i) + D_i^\phi(dx_i) + L D_i^V(dx_i) \quad (3.73)$$

$$= \sigma \mathbf{n}_i^s \cdot d\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_i^\phi \cdot d\mathbf{x}_i + L \mathbf{n}_i^V \cdot d\mathbf{x}_i \quad (3.74)$$

$$= \left(\sigma \mathbf{n}_i^s + \mathbf{n}_i^\phi + L \mathbf{n}_i^V \right) \cdot d\mathbf{x}_i \quad (3.75)$$

Les vecteurs \mathbf{n}_i ne sont pas unitaires : ils sont dimensionnels, mais ils déterminent chacun en un certain sens une direction normale à l'interface. Pour le maillage d'équilibre, la différentielle du est nulle pour tout déplacement $d\mathbf{x}_i$. Il est donc caractérisé par l'égalité suivante :

$$\exists L, \forall i, \quad \sigma \mathbf{n}_i^s + \mathbf{n}_i^\phi + L \mathbf{n}_i^V = 0 \quad (3.76)$$

Cette condition un peu abstraite trouve cependant une interprétation physique très simple...

Interprétation de la condition d'équilibre : définition de la courbure

Supposons pour commencer que le potentiel de pesanteur est nul. Pour un petit déplacement $d\mathbf{x}_i$ d'un nœud, la variation d'énergie de surface du maillage est :

$$du_\sigma = \sigma d \left(\int_\Gamma ds \right) = \sigma D_i^s(dx_i) = \sigma \mathbf{n}_i^s \cdot d\mathbf{x}_i \quad (3.77)$$

Lors du déplacement, cette énergie de surface est échangée avec le fluide à travers le travail des forces de tension de surface. Or, ce travail est tout simplement égal au travail du saut de pression de Laplace $P_v - P_l = \sigma c$ lors du déplacement. Pour une interface discrète, la courbure c n'a pas le même sens que pour une interface continue. On écrit cependant le saut de pression sous cette forme car le calcul conduira à une interprétation de la valeur de c dans le cas discret.

Le travail des forces de tension de surface est le produit du saut de pression de Laplace par le volume de fluide déplacé, qui est aussi la variation de volume de la phase liquide. L'énergie reçue par le fluide s'écrit donc :

$$du_V = (P_v - P_l) d \left(\int_\Omega (1 - I) d\Omega \right) = \sigma c D_i^V(dx_i) = \sigma c \mathbf{n}_i^V \cdot d\mathbf{x}_i \quad (3.78)$$

Le bilan d'énergie entre l'interface et le fluide est respecté si la somme $du_\sigma + du_V$ est nulle, soit :

$$\mathbf{n}_i^s = -c \mathbf{n}_i^V \quad (3.79)$$

La courbure c apparaît donc comme le rapport entre deux grandeurs différentielles : c'est le rapport entre la variation locale de surface et la variation locale de volume si on déplace un nœud de l'interface. Cette analogie conduit à poser la définition suivante de la courbure \hat{c} au nœud \mathbf{x}_i , que l'on adapte pour qu'elle prenne un sens même si les deux vecteurs ne sont pas colinéaires :

$$\hat{c}(\mathbf{x}_i) \hat{=} - \frac{\mathbf{n}_i^s \cdot \mathbf{n}_i^V}{\mathbf{n}_i^V \cdot \mathbf{n}_i^V} \quad (3.80)$$

Appliquons cette définition à la condition d'équilibre 3.76. Si le potentiel de gravité est nul, cette condition s'énonce :

$$\begin{aligned} \exists L, \forall i, \quad \mathbf{n}_i^s &= -\frac{L}{\sigma} \mathbf{n}_i^V \\ \Leftrightarrow \forall i, \quad \mathbf{n}_i^s \text{ et } \mathbf{n}_i^V &\text{ sont colinéaires et } \hat{c}(\mathbf{x}_i) = \frac{L}{\sigma} = \text{constante} \end{aligned} \quad (3.81)$$

On retrouve une propriété très semblable à la condition d'équilibre des équations continues : si les interfaces sont à l'équilibre, alors la courbure \hat{c} est constante. Notre approche énergétique montre la relation qui existe entre l'expression de la courbure, l'énergie potentielle du système et son état d'équilibre. L'énergie potentielle correspondant à la définition proposée 3.80 est très facile à évaluer numériquement et correspond exactement à la définition physique de l'énergie potentielle.

Le multiplicateur de Lagrange L apparaît maintenant comme le saut de pression à l'interface. Le lien avec la physique est évident : lorsque le volume des phases change, l'échange d'énergie mécanique entre les phases et les interfaces résulte du travail des forces de pression sur les interfaces. C'est le produit du saut de pression par le volume déplacé, soit la variation de volume de la phase liquide :

$$du = L d \left(\int_{\Omega} (1 - I) d\Omega \right) = (P_v - P_l) dV \quad (3.82)$$

L'extension de la définition de $\hat{\kappa}$ au cas où la gravité est non nulle est assez naturelle. On pose :

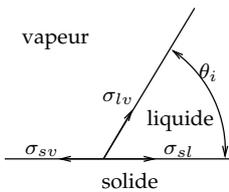
$$\hat{\kappa}(\mathbf{x}_i) \hat{=} - \frac{(\sigma \mathbf{n}_i^s + \mathbf{n}_i^\phi) \cdot \mathbf{n}_i^V}{\mathbf{n}_i^V \cdot \mathbf{n}_i^V} \quad (3.83)$$

La définition ci-dessus peut être mise en œuvre exactement dans une méthode numérique : chaque vecteur \mathbf{n}_i est assez facilement calculable si le maillage des interfaces est constitué de triangles.

La propriété demandée pour κ est remplie : si le maillage coïncide avec le maillage d'équilibre, alors cette grandeur est constante et le système discret est à l'équilibre, et on a montré que le maillage d'équilibre existe. Il existe donc une solution du problème sans courant parasite.

On voit que la définition de la courbure κ est intimement liée aux états d'équilibre du système. Cette approche est radicalement différente de celle adoptée dans la méthode CSF : au lieu de chercher à atteindre une approximation aussi proche que possible de la géométrie d'équilibre de problème continu, on décide que la géométrie d'équilibre n'a pas réellement d'importance. L'état d'équilibre obtenu n'est donc contrôlé qu'à travers la formulation de l'énergie potentielle discrète que l'on a choisie. Il se trouve qu'avec le choix naturel que nous avons fait pour l'évaluation de l'énergie discrète, l'état d'équilibre ressemble à celui du problème continu : en deux dimensions et en l'absence de gravité, les géométries d'équilibre sont des polygones réguliers qui tendent vers le cercle si on raffine le maillage.

Extension à la définition de la courbure aux lignes de contact



Ce formalisme a l'avantage de s'étendre naturellement aux lignes de contact en utilisant l'équation de Young-Dupré : étant donnée l'énergie de surface σ_{sl} et σ_{sv} des interfaces liquide-solide et liquide-vapeur, on peut calculer à la ligne de contact la différentielle de l'énergie interfaciale de l'ensemble des interfaces (y compris avec la paroi) par rapport au déplacement de la ligne de contact, et obtenir ainsi une valeur de la courbure discrète à la ligne de contact. Si la condition aux limites est un angle de contact imposé θ_i , on en déduit facilement la valeur de $\sigma_{sv} - \sigma_{sl}$ par le modèle de Young-Dupré :

$$\sigma \cos \theta_i = \sigma_{sv} - \sigma_{sl} \quad (3.84)$$

Malheureusement, cette formulation ne permet pas d'assurer facilement que

le système évolue vers l'équilibre. C'est un cas particulier que nous traiterons dans la partie suivante.

3.3.4 Condition de convergence vers l'équilibre

Nous avons écrit une condition nécessaire pour que l'équilibre existe (les forces de tension de surface et de gravité doivent être le gradient d'un scalaire à l'équilibre). Nous avons d'autre part construit explicitement un second membre tel que cette propriété soit vérifiée. Nous avons caractérisé le lien existant entre la définition de la courbure et l'état d'équilibre en utilisant l'énergie potentielle du système.

Nous avons donc d'une part une condition suffisante pour avoir un équilibre discret, condition qui s'écrit

$$\hat{\kappa}_i = \text{constante} \quad (3.85)$$

et d'autre part une condition nécessaire pour que l'équilibre soit stable, c'est-à-dire un minimum local de l'énergie potentielle du système :

$$\exists L, \forall i, \quad \sigma \mathbf{n}_i^s + \mathbf{n}_i^\phi + L \mathbf{n}_i^V = 0 \quad (3.86)$$

La première impose une seule relation scalaire par nœud, ce qui laisse deux degrés de liberté pour les positions de chaque nœud.

La deuxième condition est beaucoup plus contraignante que la première. Elle impose une égalité vectorielle sur la position de chaque nœud du maillage. Autrement dit, il n'y a pour un graphe de connectivité donné qu'une seule position possible des nœuds qui vérifie cette propriété.

On peut en tirer les conclusions suivantes :

- Pour être certain d'atteindre un minimum local de l'énergie potentielle du maillage, il faut que la position des nœuds converge vers une unique solution déterminée par l'équation 3.86.
- Si le déplacement des nœuds est contraint par d'autres conditions (par exemple si on impose une contrainte sur qualité du maillage), on risque de se trouver dans une position où le minimum ne peut pas être atteint.

Supposons par exemple que l'on impose au maillage de vérifier un critère sur l'intervalle entre les nœuds. La minimisation de l'énergie potentielle peut conduire à ce qu'au cours du déplacement des nœuds, le critère de qualité ne soit plus vérifié. Il faut alors changer le graphe de connectivité ou même replacer des points. Si cette opération diminue l'énergie potentielle, on converge bien vers un minimum. Si par contre l'énergie potentielle augmente, le système peut se mettre à osciller indéfiniment entre plusieurs graphes de connectivité, à la recherche d'un minimum qui ne vérifie pas le critère de qualité du maillage.

Critère de qualité du maillage

Peut-on pour autant se passer d'un critère de qualité? En fait un tel critère est nécessaire pour que le maillage puisse converger vers le minimum. On veut en effet rendre égaux les $\hat{\kappa}_i$, dont le nombre est égal au nombre de nœuds. Pour cela, il faut que les déplacements de tous les nœuds x_i soient indépendants. Or ces déplacements sont des fonctions du champ de vitesse discret \tilde{v} sur le maillage eulérien, et plus précisément des composantes de la vitesse sur les faces qui encadrent les nœuds x_i . Si le nombre de nœuds x_i est supérieur au nombre de faces du maillage eulérien impliquées dans le déplacement des points, alors les variations des $\hat{\kappa}_i$ ne peuvent pas être indépendantes et il est impossible d'atteindre un état où les $\hat{\kappa}_i$ sont égaux.

Voici une autre façon d'envisager le problème : nous avons vu que la courbure $\hat{\kappa}$ agit sur le maillage eulérien après une interpolation qui la met sous la forme de $\bar{\kappa}$. Si le nombre de faces où l'on discrétise $\bar{\kappa}$ est inférieur au nombre de valeurs $\hat{\kappa}$, alors il existe forcément des combinaisons non constantes de $\hat{\kappa}$ telles que les $\bar{\kappa}$ sont constants (on peut penser à un système linéaire ayant moins d'équations que d'inconnues). De telles combinaisons correspondent à des variations à hautes fréquences des $\hat{\kappa}$ car l'interpolation $\bar{\kappa}$ agit comme un filtre passe-bas. Le système est à l'équilibre sans avoir atteint le minimum d'énergie. Dans ce cas, des oscillations de hautes fréquences peuvent se développer et persister sur l'interface car elles n'échangent pas d'énergie avec le fluide.

Pour être certain que les déplacements des nœuds sont indépendants, leur intervalle doit être supérieur à la taille des éléments du maillage eulérien. On ajoute un facteur de sécurité à ce critère, et on pose la définition et le critère suivant, sur le rapport entre les dimensions δ_{lag} des éléments du maillage lagrangien et δ_{euler} du maillage eulérien :

$$\boxed{\text{intervalle_noeuds} = \delta_{lag}/\delta_{euler} < 0.7} \quad (3.87)$$

Cette valeur est le résultat de tests réalisés en 2D, et peut être interprétée comme l'inverse du diamètre des éléments (la diagonale des mailles eulériennes), de sorte qu'il n'y a jamais deux nœuds du maillage lagrangien dans un même maille eulérienne.

L'algorithme de conservation de la qualité du maillage doit être suffisamment souple pour qu'un minimum d'énergie du maillage puisse être atteint en vérifiant ce critère. En pratique, il faut autoriser un intervalle assez large de valeurs de $\delta_{lag}/\delta_{euler}$.

Cas particulier des lignes de contact

Les lignes de contact posent un problème particulier car leur déplacement n'est pas indépendant : dans l'algorithme de transport (voir 3.4.4), le déplacement des lignes de contact est lié au déplacement des autres nœuds de l'interface. Si on calcule une valeur de $\hat{\kappa}$ aux lignes de contact indépendamment des $\hat{\kappa}$ aux autres nœuds, l'équilibre ne peut plus être atteint : il y a plus de variables $\hat{\kappa}_i$ que de degrés de liberté x_i indépendants. On ne peut donc plus rendre simultanément constants tous les $\hat{\kappa}_i$. C'est pourquoi on choisit d'attribuer aux nœuds des lignes de contact la même valeur $\hat{\kappa}$ que le premier point de l'interface. En quelque sorte, les lignes de contact sont toujours considérées comme «localement à l'équilibre».

Bilan d'énergie mécanique et schéma temporel

Nous avons obtenu une formulation du second membre qui assure l'existence d'un état d'équilibre mécanique dont l'énergie est minimale. Il reste maintenant à vérifier que le bilan d'énergie lors de l'échange entre les interfaces et le fluide est négatif ou nul. S'il est négatif, le schéma numérique est dissipatif et les oscillations des interfaces sont amorties même en l'absence de viscosité du fluide. L'idéal est de parvenir à un schéma aussi proche que possible de la conservation exacte de l'énergie lors de cet échange.

Le schéma temporel le plus simple est un schéma explicite : on évalue la courbure au pas de temps n , on en déduit les forces de tension de surface et ces forces supposées constantes au cours du pas de temps agissent sur le fluide pendant un temps dt . À l'issue de ce pas de temps, on obtient une vitesse différente du fluide et on déplace les nœuds de l'interface par un algorithme de transport. Pour vérifier le signe du bilan d'énergie, il faut comparer le travail des forces interfaciales

au cours du pas de temps à la variation d'énergie des interfaces effectivement obtenue. Il est évident qu'un tel bilan n'est pas signé si on utilise un schéma explicite. La preuve en est que le schéma d'ordre un (testé dans le chapitre suivant) peut être instable. Nous avons mis en œuvre un schéma semi-implicite, où la courbure est calculée en utilisant une estimation de la position des nœuds au pas de temps suivant. Ce schéma est très nettement plus dissipatif que le premier car le bilan d'énergie est nettement négatif. Pour réaliser des études fines sur la turbulence par exemple, il faudrait mettre en œuvre un schéma temporel dont le bilan d'énergie soit négatif et le plus proche possible de l'équilibre.

3.3.5 Conclusion sur les courants parasites

Notre approche de la tension de surface et des courants parasites est très différente de celle que l'on peut trouver dans la littérature pour ce type de méthodes. Dans la lignée des travaux de Jamet *et al.* [42], nous proposons de fonder la discrétisation des forces interfaciales sur l'échange d'énergie entre le fluide et les interfaces.

Cette nouvelle interprétation des forces interfaciales conduit à une expression de la courbure des interfaces et du second membre très simple à mettre en œuvre en trois dimensions, et qui résout *a priori* le problème des courants parasites même en présence de gravité.

Malheureusement, la démonstration conduit à une liste de contraintes à respecter pour que la méthode numérique soit exempte de courants parasites :

- la finesse du maillage des interfaces est limitée par la finesse du maillage eulérien : pas plus d'un point d'interface par maille eulérienne,
- le schéma temporel doit assurer que le bilan de l'échange d'énergie entre les interfaces et le maillage est négatif,
- le minimum strict de l'énergie d'interface ne peut être atteint que si le maillage n'est pas trop contraint, par exemple par des critères de qualité.

Nous verrons qu'il est facile de mettre en œuvre une méthode numérique où les courants parasites sont très atténués. L'élément le plus important a déjà été exploré par Popinet et Zalesky et par Juric en utilisant des approches différentes : il s'agit d'assurer l'existence d'un équilibre discret. Cependant, pour garantir l'absence de courants parasites dans tous les cas, il faut d'une part inclure la gravité et d'autre part obtenir un schéma de transport qui assure la décroissance de l'énergie mécanique.

3.4 Discrétisation des équations

3.4.1 Système d'équations discret sur le maillage eulérien

Le système d'équations discret prend la même forme que celui proposé par Duquennoy [21]. Les inconnues du système sont la vitesse \bar{v} et la température \bar{T} (plutôt que la quantité de mouvement et l'énergie). La discrétisation spatiale s'écrit sous la forme suivante :

$$\overline{\nabla \cdot \bar{v}} = \bar{m} \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) \quad (3.88)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{v} = \dot{\bar{v}} = -\overline{\nabla \cdot (\bar{v} \times \bar{v})} - \frac{1}{\bar{\rho}} \overline{\nabla P} + \overline{\nabla \cdot \tau^D} + \overline{\mathbf{f}_\sigma} + \overline{\rho \mathbf{g}} \quad (3.89)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{T} = \dot{\bar{T}} = -\overline{\nabla \cdot (\bar{T} \bar{v})} + \frac{1}{\bar{\rho} c_P} \overline{\nabla \cdot (k \nabla \bar{T})} - \frac{\bar{h}}{\bar{\rho} c_P} \quad (3.90)$$

La discrétisation en temps utilise un schéma de type «Euler explicite» et une méthode de projection pour obtenir l'équation 3.88.

3.4.2 Opérateurs de diffusion et de convection

Les opérateurs de diffusion et de convection prennent une forme particulière dans les cellules de l'interface. Nous ne sommes pas parvenus à écrire proprement ces opérateurs et un important travail reste à faire sur ce point. Nous avons néanmoins identifié les problèmes suivants :

- Sur le terme de dissipation visqueuse de l'équation 3.89 : en présence d'un changement de phase, ce terme doit être traité de façon particulière pour ne pas donner lieu à des pressions non physiques aux interfaces.
- L'opérateur de convection de cette équation doit lui aussi être traité de façon particulière, notamment par l'ajout d'un terme en $v\nabla \cdot v$, mais l'obtention d'un état stationnaire satisfaisant s'est révélée très difficile, notamment sur le cas-test décrit en 4.1.2.
- Le terme de diffusion de la chaleur de l'équation 3.90 doit être corrigé en fonction du modèle de sous-maille de \bar{h} décrit en 3.2.7, notamment si on tente d'obtenir une approximation à l'ordre 2 de ce modèle.
- Enfin, l'opérateur de convection de l'équation de température est sans doute la cause principale de l'erreur sur le bilan d'énergie. Son écriture sous la forme $\nabla \cdot (\bar{T}\bar{v}) + \bar{T}\nabla \cdot \bar{v}$ est en effet désastreuse pour le bilan d'énergie (erreur de plus de 100% sur l'échange d'énergie entre le fluide et les interfaces). Le remède utilisé dans les calculs du chapitre suivant consiste à négliger la convection dans les éléments contenant des interfaces. Le bilan d'énergie est alors respecté de façon plutôt satisfaisante lorsque la valeur du nombre de Péclet n'est pas trop grande (voir le cas-test 4.1.2 du chapitre suivant).

Il est évident que ces problèmes devront être résolus avant d'espérer pouvoir réaliser des calculs réellement quantitatifs. Même si nous pouvons quantifier au cas par cas l'erreur sur le bilan d'énergie, il semble que la seule façon raisonnable d'aborder le problème soit de construire une méthode numérique qui soit conservative en énergie (du moins pour l'énergie interne du fluide, car il n'y a guère que les méthodes spectrales capables de conserver l'énergie mécanique).

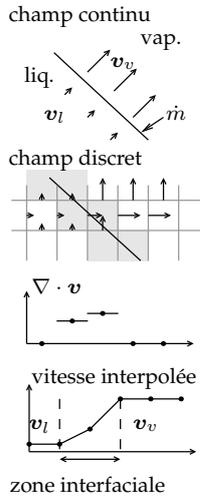
A priori, pour obtenir un schéma conservatif en temps, il faut que les dérivées en temps $\dot{\bar{v}}$ et $\dot{\bar{T}}$ utilisent la valeur de la masse volumique ρ^{n+1} au pas de temps suivant, ce qui implique l'utilisation d'un schéma implicite.

3.4.3 Transport des interfaces

L'algorithme de transport des interfaces doit vérifier en particulier les propriétés suivantes :

- il doit être stable vis-à-vis de l'énergie mécanique (énergie d'interface plus énergie cinétique du fluide),
- il doit respecter le bilan de masse des phases,
- il doit respecter les conditions aux limites pour les interfaces (lignes de contact),
- la vitesse des interfaces doit localement respecter la condition aux limites 1.69.

Informations disponibles pour le transport



Dans une formulation continue, la seule équation sur la vitesse des nœuds est une équation de bilan de masse à travers l'interface :

$$\rho_l (\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{n} = \rho_v (\mathbf{v}_v - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{n} = \dot{m} \quad (3.91)$$

Pour utiliser cette équation, il faut donc obtenir une estimation de v_l et de v_v , vitesses du liquide et de la vapeur à l'interface. Or le champ de vitesse eulérien discret ne porte pas ces informations. La figure ci-contre représente la divergence de la vitesse due au changement de phase et la valeur de la vitesse à proximité d'une interface. Elle montre que la vitesse de la vapeur et la vitesse du liquide doivent être évaluées à l'extérieur des interfaces, là où la divergence de la vitesse est nulle. Le déplacement des nœuds ainsi obtenu n'a aucune chance de vérifier le bilan de masse exact.

Celui-ci est cependant accessible grâce aux propriétés énoncées en 3.2.10. On peut même utiliser la «semi-localité» de la grandeur V' pour déplacer les nœuds du maillage lagrangien sans autre information. L'utilisation de la seule grandeur V' pour transporter le maillage s'est cependant révélée très instable pour la tension de surface. Par exemple, lors du transport d'une interface par un champ de vitesse uniforme, l'approximation de la masse volumique de l'équation 3.45 produit une variation de volume localement inexacte (bien que globalement conservative). La vitesse de déplacement des nœuds déduite de V' n'est plus uniforme. Ainsi, si on transporte une interface initialement circulaire dont l'énergie de surface est minimale, les vitesses non uniformes des nœuds déforment l'interface ce qui augmente l'énergie mécanique du système. Incidemment, l'utilisation de la grandeur V' pour calculer le déplacement des interfaces s'apparente très fortement aux mécanismes mis en œuvre dans la méthode VOF. On comprend donc les difficultés que l'on y rencontre pour éliminer les courants parasites.

Pour assurer la meilleure stabilité de l'énergie interfaciale, le champ des vitesses des nœuds d'interface doit être le plus régulier possible. Le transport sera donc essentiellement confié à une méthode d'interpolation des vitesses sur le maillage fixe. La grandeur V' permet de corriger le bilan de masse par une petite altération de la vitesse interpolée.

La méthode retenue comporte donc deux étapes :

- le calcul d'une estimation de la vitesse normale des nœuds intérieurs des interfaces (sans les lignes de contact) en utilisant la méthode d'interpolation mise en œuvre par Duquennoy [21],
- la correction de la vitesse des nœuds pour respecter exactement le bilan de masse des interfaces.

Estimation de la vitesse des interfaces

En l'absence de changement de phase, le champ de vitesse réel est continu et la vitesse des interfaces est égale à la vitesse du fluide. Il suffit donc d'interpoler le champ de vitesse discret aux nœuds de l'interface.

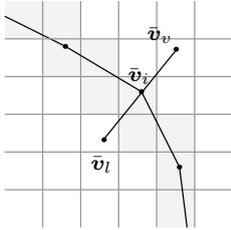
En présence de changement de phase, la vitesse v_i des interfaces peut être obtenue de deux façons différentes à partir de l'équation 1.69 :

$$\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_l \cdot \mathbf{n} - \dot{m} / \rho_l \quad (3.92)$$

$$= \mathbf{v}_v \cdot \mathbf{n} - \dot{m} / \rho_v \quad (3.93)$$

L'expérience montre que si ρ_v est faible et en présence d'un transfert de masse, l'estimation de la vitesse à partir de l'équation 3.93 n'est pas très régulière car la

vitesse de la vapeur est très supérieure à la vitesse des interfaces. La solution retenue consiste à privilégier l'expression 3.92. L'expression de la vitesse interpolée est la suivante



$$\hat{v}_i \cdot \mathbf{n} = \frac{\rho_l \bar{v}_l \cdot \mathbf{n} - \dot{m} + \rho_v \bar{v}_v \cdot \mathbf{n} - \dot{m}}{\rho_l + \rho_v} \tag{3.94}$$

$$\hat{v}_i \times \mathbf{n} = \bar{v}_i \times \mathbf{n} \tag{3.95}$$

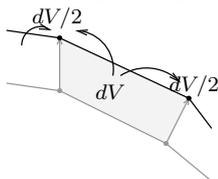
où \bar{v}_i , \bar{v}_l et \bar{v}_v représentent respectivement la vitesse eulérienne interpolée au nœud d'interface, dans le liquide et dans la vapeur. Les points l et v d'interpolation sont situés sur la normale à l'interface, à une distance de $\sqrt{2}$ fois la largeur des mailles eulériennes.

À proximité du bord du domaine, les points d'interpolation peuvent se trouver en dehors du domaine. Dans ce cas, on utilise une seule des deux expressions de la vitesse. Si aucune n'est applicable, l'étape de correction du bilan de masse se charge du transport.

Correction du bilan de masse

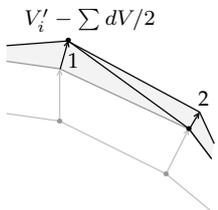
La grandeur \bar{V}' calculée en 3.2.9 représente la variation de volume de gaz dans les éléments du maillage eulérien. Cette grandeur est transférée sur les nœuds par la relation conservative décrite en 3.2.3 et on appelle \hat{V}' la grandeur aux nœuds.

transport par interpolation



La conservation globale de la masse des phases est obtenue si le déplacement des nœuds produit une variation de volume $\hat{S}(x_i) \hat{V}'_i$ pour chaque nœud, où $\hat{S}(x_i)_i$ est la surface associée au nœud (voir 3.2.3).

correction de volume

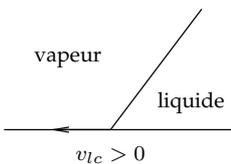


Lors de l'étape précédente, le volume engendré par chaque segment est attribué aux deux nœuds voisins (c'est l'aire du quadrilatère ci-contre en 2D, et un volume de révolution en géométrie axisymétrique). La correction consiste à déplacer les nœuds dans la direction normale de sorte que la variation totale de volume soit égale à V'_i nœud par nœud. Pour cela, on déplace le nœud 1, puis le volume pour le nœud 2 est calculé avec la nouvelle position du nœud 1. Le déplacement exact des nœuds dépend donc un peu de l'ordre dans lequel on les parcourt.

Tous les volumes sont calculés en utilisant des expressions exactes (opération simplifiée par l'approximation par segments des interfaces). Le bilan de masse des phases est donc respecté à la précision machine dans cette étape de transport.

3.4.4 Dynamique des lignes de contact

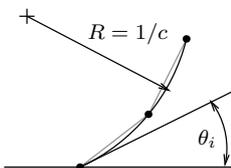
Conventions



On appelle vitesse de la ligne de contact v_l sa vitesse de déplacement dans le plan de la paroi, dans la direction normale à la ligne de contact et positive si elle est dirigée vers la vapeur.

L'angle de contact θ_i discret est l'angle entre la paroi et la tangente au cercle passant par les trois premiers points de l'interface.

La courbure c est l'inverse du rayon du même cercle. Elle est positive si l'angle de contact augmente avec la distance à la ligne de contact (cette convention est cohérente avec celle que l'on utilise habituellement de mesurer l'angle de contact dans le liquide).



L'algorithme de déplacement des lignes de contact fournit la position de la ligne de contact au pas de temps suivant en fonction de la position des deux points suivants. Il agit sur la ligne de contact et sur le premier point pour vérifier

- la loi de comportement de l'angle de contact,
- la conservation du volume.

Modèle numérique de l'angle de contact

Le modèle de ligne de contact le plus complet est caractérisé (outre la distance caractéristique de couplage, donnée par la longueur du premier segment de l'interface) par une relation entre la vitesse de la ligne de contact, l'angle de contact, la température de la paroi et éventuellement l'épaisseur du film de liquide déposé si le démouillage n'est pas total. Tous les modèles, y compris les plus simples, s'écrivent sous la forme d'une fonction implicite :

$$f(\theta, v_l, T_s) = 0 \quad (3.96)$$

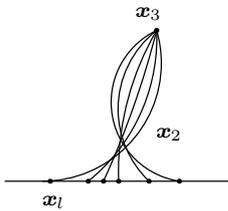
Le déplacement des lignes de contact comporte deux étapes :

- la détermination de la vitesse de déplacement de la ligne de contact,
- la détermination de l'épaisseur du film de liquide éventuellement déposé en paroi.

Dans la première étape, on cherche la vitesse de déplacement de la ligne de contact et l'angle de contact de façon à vérifier les deux contraintes suivantes :

- la fonction f s'annule,
- la variation de volume est égale à \hat{V}' .

À une vitesse v_l donnée correspond une position x_l de la ligne de contact au pas de temps suivant. L'angle de contact dépend de la position du deuxième et du troisième point de l'interface (notés x_2 et x_3). Pour un couple (θ_i, v_l) , on détermine donc un unique couple de points (x_l, x_2) tel que la vitesse de la ligne de contact et l'angle de contact prennent les valeurs imposées.



La variation de volume des interfaces impose une première relation entre θ_i et v_l . Une famille de profils d'interface vérifiant une telle condition est représentée ci-contre. Pour respecter la variation imposée de volume, l'angle de contact diminue lorsque le point de contact avec la paroi s'éloigne vers la gauche (pour $v_l > 0$). Inversement, θ_i augmente lorsque le point de contact se déplace vers la droite. À volume imposé, l'angle de contact $\theta_V(v_l)$ est donc une fonction décroissante de la vitesse de la ligne de contact.

Quant à la fonction f , si on la met sous une forme explicite $\theta_f(v_l)$, l'angle de contact apparaît généralement comme une fonction croissante de la vitesse.

La figure 3.1 représente les deux fonctions $\theta_V(v_l)$ et $\theta_f(v_l)$ sur un même graphique. Le couple (θ_i, v_l) à l'intersection des deux courbes est la solution du problème.

La méthode retenue pour résoudre numériquement ce problème consiste à réaliser une dichotomie sur la vitesse v_l . La fonction f est construite de sorte que $f(\theta_i, v_l) > 0$ si le point (θ_i, v_l) est au-dessus ou à gauche de la courbe, et $f(\theta_i, v_l) < 0$ dans le cas inverse. Pour chaque valeur de v_l on calcule explicitement $\theta_V(v_l)$ puis $f(\theta_V(v_l), v_l)$, si le résultat est positif, on augmente la vitesse, sinon on la diminue jusqu'à converger vers le point d'intersection. La monotonie des deux fonctions assure l'unicité de la solution.

Après convergence, si l'angle de contact est nul, on évalue l'épaisseur du film de liquide à l'aide du modèle proposé dans la première partie (voir 2.1.4).

3.4.5 Transfert de masse et de chaleur à la ligne de contact

En présence de lignes de contact, les conditions aux limites usuelles de température et de flux imposé doivent être redéfinies. Dans ce cas la formulation utilisée

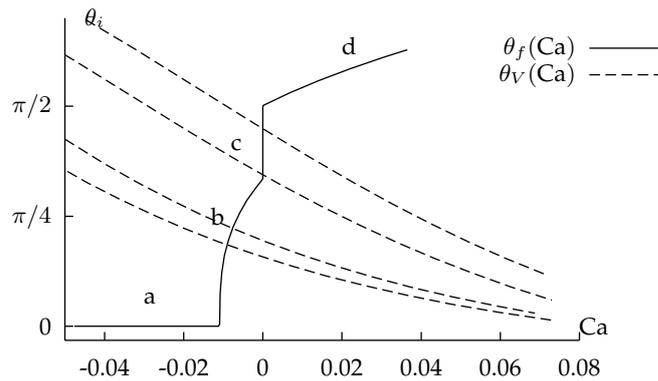


Figure 3.1 – Relations entre la vitesse de la ligne de contact (exprimée en nombre de capillarité Ca) et l'angle de contact θ_i . La fonction θ_v constitue la relation qui impose la variation de volume de l'interface, et la fonction θ_f constitue le modèle d'angle de contact dynamique. La branche a correspond à un démouillage partiel, un film de liquide restant sur la paroi. Les branches b et d correspondent à un angle de contact dynamique et la branche c à une hystérésis de l'angle de contact (ce modèle est celui que nous avons retenu pour l'angle de contact dynamique, voir 2.1.2). La figure comporte quatre courbes θ_v distinctes correspondant à différentes configurations initiales (positions initiales relatives de x_1 , x_2 et x_3).

habituellement n'est pas réaliste : une condition de température imposée correspond à une paroi de conductivité thermique infinie, et le flux singulier est plus élevé que le flux sur une paroi réelle. Avec la condition aux limites de flux de chaleur imposé au contraire, comme la paroi a habituellement une épaisseur nulle, il n'y a plus aucune singularité du flux de chaleur (celui-ci est constant, par définition de la condition aux limites). Dans un cas comme dans l'autre, la condition aux limites ne représente pas un problème physiquement réaliste. Nous allons donc dans un premier temps définir deux conditions aux limites, de température imposée et de flux imposé, et interpréter le transfert de chaleur singulier dans ces deux configurations. Nous allons ensuite montrer comment imposer ces conditions aux limites sur le problème discret.

Interprétation du flux de masse singulier

La modélisation de la ligne de contact du chapitre 2 permet d'obtenir le profil du flux de chaleur et du flux de masse à l'interface liquide-vapeur et à l'interface solide-liquide près des lignes de contact. On dit du flux de chaleur qu'il est singulier car sa valeur à petite échelle est de plusieurs ordres de grandeur supérieure à sa valeur loin des lignes de contact.

Considérons maintenant le problème macroscopique dans son ensemble, et plus particulièrement les conditions aux limites pour l'équation de la chaleur. On essaie toujours de modéliser ces dernières à partir de deux conditions aux limites «de base» :

- la condition aux limites de température imposée (condition de Dirichlet),
 - la condition aux limites de flux de chaleur imposé (condition de Neumann).
- Quel est l'effet du transfert de chaleur singulier sur le problème macroscopique ?

La première condition aux limites est exactement celle que nous avons considérée dans le chapitre 2. Ainsi, le modèle prédit le flux de chaleur et le flux de masse en fonction de la température de la paroi à une distance caractéristique s_{ext} de la ligne de contact (que l'on peut choisir comme étant l'épaisseur de la paroi ou encore la taille caractéristique du maillage de la paroi). À température de paroi imposée, la singularité du flux de chaleur a pour effet d'augmenter le flux de chaleur et le transfert de masse dans le système par rapport à une situation sans ligne de contact. Le

flux de chaleur dépend de l'épaisseur de la paroi. Comme une paroi infiniment mince à température imposée n'a pas vraiment de sens physiquement, on complètera toujours la température de la paroi par une conductivité thermique et une épaisseur.

La deuxième condition aux limites est plus difficile à relier au modèle de ligne de contact. On peut d'ailleurs être tenté de faire le raisonnement suivant : supposons que le flux de chaleur à la paroi est imposé. En régime stationnaire, ce flux traverse la paroi et est communiqué au fluide. Quelle que soit la répartition, singulière ou non, du flux de chaleur à la ligne de contact, cette énergie passe dans le liquide. Quelle différence cela fait-il alors de tenir compte de la singularité du flux de chaleur ?

Coefficient d'échange à la ligne de contact

Pour répondre à cette question, il est commode d'exprimer le transfert de chaleur sous la forme d'un *coefficient d'échange*. Supposons que l'on puisse localement faire l'hypothèse d'un régime stationnaire de transfert thermique : le champ de température est alors constant dans le référentiel associé à la ligne de contact, donc la puissance communiquée par la paroi au liquide est intégralement transférée à l'interface sous forme d'évaporation. Le flux de chaleur et le flux de masse sont équivalents.

Nous avons vu au chapitre 2 qu'à un angle de contact donné, le flux de chaleur \dot{q} à la paroi est proportionnel à la surchauffe $T_{ext} - T_{sat}$ de la paroi. Nous avons écrit le flux sous une forme adimensionnelle \tilde{q} qui conduit à l'expression suivante

$$\dot{q}(s) = \tilde{q}(s) k_l \frac{T_{ext} - T_{sat}}{s_{ext}} \quad (3.97)$$

où \tilde{q} dépend de la géométrie de l'interface. Cette écriture suggère que l'on pourrait définir un coefficient d'échange local $h(s)$ entre la paroi et le liquide de la façon suivante :

$$\dot{q}(s) = h(s) (T_{ext} - T_{sat}), \quad \text{avec } h(s) \hat{=} \tilde{q}(s) \frac{k_l}{s_{ext}} \quad (3.98)$$

Le flux de chaleur intégré jusqu'à l'échelle s_{ext} par mètre linéaire de ligne de contact s'exprime en fonction d'un coefficient d'échange global H de la façon suivante :

$$Q = \int_0^{s_{ext}} \dot{q}(s) ds = H (T_{ext} - T_{sat}), \quad \text{avec } H \hat{=} \int_0^{s_{ext}} h(s) ds \quad (3.99)$$

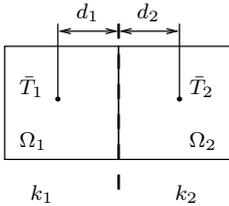
L'effet de la singularité du flux de chaleur à la ligne de contact est maintenant facilement interprétable : pour un flux de chaleur total Q imposé, la singularité du flux de chaleur a pour effet d'augmenter le coefficient d'échange global H entre la paroi et les interfaces liquide-vapeur, et de diminuer la température de la paroi par rapport à une situation sans ligne de contact. De même que pour la condition aux limites de température imposée, une condition aux limites de flux imposé est assortie d'une épaisseur et d'une conductivité thermique de la paroi. On peut remarquer cependant que le modèle n'a vraiment de sens que si l'épaisseur choisie est inférieure à la taille des éléments du maillage : si elle est plus épaisse, la répartition du flux de chaleur dans la paroi parallèlement à la surface n'est pas correctement prise en compte. Dans ce cas, il faut modéliser la paroi et résoudre le problème de conduction dans celle-ci. Si la paroi est plus fine que la taille des mailles, le flux singulier est connu (il est égal au flux imposé). L'information essentielle apportée par le modèle dans ce cas est la température de la paroi, qui peut dans certains cas déterminer l'angle de contact.

Discrétisation des conditions aux limites

Dans une méthode numérique de type «volumes finis», le flux de chaleur s’écrit sous la forme d’un coefficient d’échange entre les volumes de contrôle. On appelle \bar{Q} l’intégrale du flux de chaleur sur une face séparant deux volumes Ω_1 et Ω_2 , et S la surface d’échange. On écrit la relation suivante :

$$\bar{Q} = \bar{h} S (\bar{T}_2 - \bar{T}_1) \tag{3.100}$$

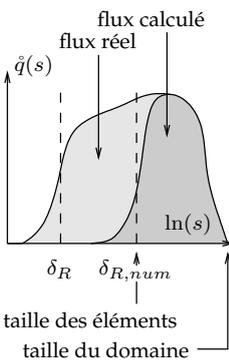
Le coefficient d’échange global $\bar{h} S$ est une grandeur qui dépend de la géométrie des deux volumes et de la conductivité thermique. Par exemple, dans la géométrie classique représentée sur la figure ci-contre, ce coefficient s’écrit comme suit :



$$\bar{h} = \left(\frac{d_1}{k_1} + \frac{d_2}{k_2} \right)^{-1} \tag{3.101}$$

Le raisonnement suivant est fondamental pour comprendre pourquoi le flux de chaleur singulier doit être explicitement introduit dans la méthode numérique : supposons que Ω_1 soit le bord d’une paroi solide. Si une interface liquide-vapeur se trouve dans l’élément Ω_2 et que l’on associe à cet élément une température $\bar{T}_2 = T_{sat}$, on obtient un coefficient d’échange h correspondant à une épaisseur d_2 de liquide sur la paroi. L’analogie suivante explique très bien le résultat obtenu : la méthode numérique est affectée d’une «résistance d’interface numérique» $R_{i,num}$: quelle que soit l’épaisseur du film de liquide en paroi, la méthode numérique prend en compte une épaisseur de liquide d_2 . La résistance d’interface numérique est donc caractérisée par une épaisseur équivalente $\delta_{R,num}$ égale à la moitié de la dimension des éléments du maillage (la notion d’épaisseur équivalente de résistance d’interface est expliquée en 1.1.2).

D’après les résultats obtenus en 2.2.2, le flux de chaleur singulier obtenu par la méthode numérique est donc amputé de la contribution des échelles comprises entre δ_R et $\delta_{R,num}$. L’ordre de grandeur de δ_R est d’une fraction de μm (voir figure 1.1). Si le problème macroscopique résolu a une dimension caractéristique de quelques mm, et le maillage une dimension caractéristique de $10 \mu\text{m}$, la différence entre $\delta_{R,num}$ et δ_R représente plus de deux décades. La figure 2.6 montre que le flux de chaleur intégré sur cet intervalle (et qui manque à la méthode numérique) peut être plus important que le flux de chaleur macroscopique (ce flux est représenté schématiquement sur la figure ci-contre, la représentation utilisée est expliquée au paragraphe 2.2.2). On sous-estime alors d’un facteur supérieur à 2 le flux de chaleur total ou le coefficient d’échange entre le fluide et la paroi.



- On peut envisager plusieurs approches pour corriger la méthode numérique :
- corriger le coefficient d’échange \bar{h} entre la paroi et le fluide par un modèle de sous-maille pour tenir compte de la singularité du flux de chaleur (on pose pour cela $\bar{h} = H/S$ pour la surface de l’élément de maillage où se trouve la ligne de contact, et où H est calculé à partir du modèle de ligne de contact),
 - ou corriger localement la valeur de \bar{m} aux interfaces pour tenir compte de la présence de la ligne de contact.

Si la première solution semble plus proche de la physique, la deuxième est préférable numériquement. En effet, il ne suffit pas de corriger \bar{h} dans les éléments de maillage contenant une ligne de contact pour obtenir automatiquement le bon flux de chaleur. Les mailles voisines sont elles-aussi affectées d’une erreur numérique liée à la discrétisation très grossière de l’épaisseur du film de liquide. C’est pourquoi la méthode retenue actuellement consiste à corriger l’intégrale du flux de chaleur sur une distance correspondant aux deux premiers nœuds du maillage surfacique, soit en moyenne 3 à 6 éléments du maillage eulérien. La méthode actuellement mise en œuvre comporte les étapes suivantes :

- le calcul du flux de chaleur discret Q_n non corrigé, intégré sur une distance correspondant à deux nœuds du maillage lagrangien :

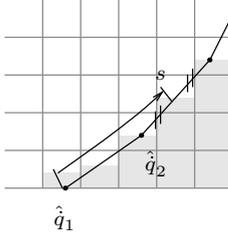
$$Q_n \hat{=} \hat{q}_1 \hat{S}_1 + \hat{q}_2 \hat{S}_2 \quad (3.102)$$

- le calcul du flux de chaleur théorique Q donné par le modèle de ligne de contact sur cette distance (l est la longueur de ligne de contact, soit 1 m en deux dimensions ou le périmètre du cercle en géométrie axisymétrique) :

$$Q_{th} \hat{=} l \int_0^s \hat{q}(s) ds \quad (3.103)$$

- la définition du flux de chaleur discret corrigé \hat{q} :

$$\hat{q}_1 \hat{=} \hat{q}_2 \hat{=} \frac{1}{\hat{S}_1 + \hat{S}_2} Q_{th} \quad (3.104)$$



Dans cette formulation, le flux de chaleur à la paroi est directement converti en transfert de masse sans passer par le fluide (l'énergie interne discrète du fluide n'est pas modifiée). On évite ainsi un certain nombre d'artefacts numériques comme une augmentation de la température du fluide au-dessus de la température de la paroi.

Cette méthode de correction est très générale et facilement applicable à d'autres méthodes numériques. Elle constitue en quelque sorte un modèle de sous-maille du transfert de chaleur à la paroi. La prise en compte d'un film de liquide en paroi pourrait être réalisée selon le même procédé : les films de liquide déposés sur la paroi lors de la croissance d'une bulle de vapeur ont typiquement une taille qui se mesure en μm et se prêtent bien à un traitement par un modèle de sous-maille.

Conclusion

La méthode numérique que nous avons mise au point constitue une avancée significative par rapport aux méthodes existantes sur les points suivants :

- Elle permet de traiter des problèmes diphasiques incompressibles avec changement de phase en assurant pratiquement une conservation exacte de la masse des phases (le seul point délicat reste la conservation de la masse lors des remaillages et des changements de topologie).
- Nous avons démontré que la discrétisation spatiale utilisée pour les forces d'interfaces permet d'annuler les courants parasites, y compris en présence de gravité, et nous avons montré comment étendre cette formulation à des calculs tridimensionnels.
- À notre connaissance, cette méthode est la seule à permettre le traitement aussi fin de la dynamique des lignes de contact et du transfert de masse et de chaleur.
- La méthode actuelle, bien que non conservative pour l'énergie interne du fluide, est bien plus précise que la méthode de filtrage proposée par Juric [76]. Elle permet notamment un contrôle précis du bilan d'énergie car le changement de phase et l'échange entre le fluide et les interfaces est confiné dans les éléments du maillage eulérien où passent des interfaces.
- Grâce à cette localisation précise des échanges, il est possible d'y mettre en œuvre des modèles de transfert singulier de masse et de chaleur aux lignes de contact.

Les inconvénients majeurs de la formulation actuelle sont :

- la non-conservation de la quantité de mouvement,
- la non-conservation de l'énergie interne,

- les contraintes très serrées imposées à la géométrie du maillage des interfaces en 3D,
- l'inexactitude de l'échange d'énergie mécanique entre les interfaces et le fluide dans le schéma temporel, qui ne permet pas d'achever la preuve que le problème des courants parasites a été entièrement résolu.

Toutefois, nous montrerons au chapitre suivant que l'on peut dans certains cas s'accommoder de ces inconvénients, en particulier dans les deux applications que nous allons présenter.

La méthode a été mise en œuvre dans le logiciel Trio-U, en deux dimensions et en géométrie axisymétrique. La courbure est actuellement calculée par une approximation géométrique qui ne produit pas de courants parasites à condition de respecter la contrainte de discrétisation des interfaces. Le remaillage est confié à une méthode d'interpolation par des fonctions «splines» qui ne conserve pas exactement le volume, mais dont la fréquence d'utilisation est limitée. Les changements de topologies sont réalisés par la méthode de reconstruction décrite par Juric [76].

Chapitre 4

Calculs numériques

Les calculs numériques présentés dans ce chapitre ont été réalisés à l'aide du logiciel Trio-U, dans lequel nous avons mis en œuvre les algorithmes décrits dans le chapitre précédent. Ce logiciel et la méthode de front-tracking peuvent être obtenus gratuitement après signature d'un accord de coopération avec le CEA. La prise en main n'est cependant pas triviale...

Ce chapitre est divisé en deux parties. La première est consacrée à des cas tests de validation de la méthode de front-tracking, dans laquelle on compare les résultats numériques à des résultats de référence fiables, obtenus soit par des solutions analytiques, soit par d'autres méthodes de calcul numérique. Dans la deuxième partie, la méthode est appliquée à une étude de la croissance d'une bulle de vapeur en paroi.

4.1 Validation de la méthode

Les calculs de validation de la méthode numérique constituent un résultat essentiel de ce travail. À cause des grandes difficultés rencontrées pour concevoir cette méthode et du nombre de compromis réalisés à toutes les étapes, il est essentiel de s'assurer que la méthode a bien les qualités requises pour résoudre correctement la physique des problèmes posés.

4.1.1 Problèmes isothermes

Courants parasites et relation de Laplace

La nouvelle méthode a été conçue en grande partie pour réduire les courants parasites. Le test suivant démontre que cet objectif a été atteint. Certains problèmes sont cependant apparus, que nous mettrons en évidence ici.

Le cas test considéré est celui d'une bulle de vapeur dans un liquide au repos en l'absence de gravité. Ce cas test est directement comparable au test de Christophe Duquennoy (voir [21], page 91). Les paramètres physiques sont détaillés sur la figure 4.1(a).

L'énergie cinétique montre une décroissance très rapide au début du calcul. Cette énergie est présente dès le début car la forme initiale de l'interface n'est pas parfaitement circulaire (l'interface est initialisée par reconstruction à partir

ρ_l	958.1	kg m^{-3}
ρ_v	0.5974	kg m^{-3}
μ_l	$282.2 \cdot 10^{-6}$	Pa s
μ_v	$12.28 \cdot 10^{-6}$	Pa s
σ	0.01	N m^{-1}
R	0.01	m

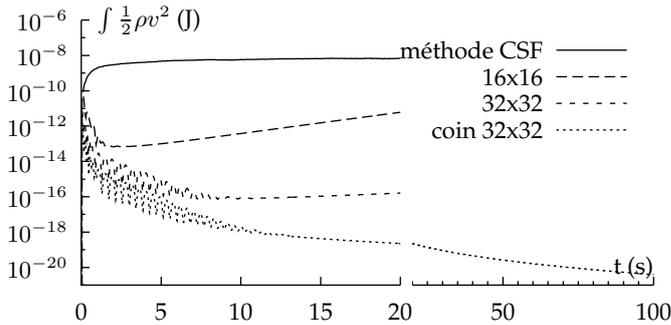
(a) Paramètres physiques et géométriques

Maillage	$P_v - P_l$ (Pa)	Rayon réel	Erreur
16x16	0.9777	9.737 mm	4.8 %
32x32	0.9937	9.931 mm	1.31 %
64x64	0.9984	9.981 mm	0.35 %

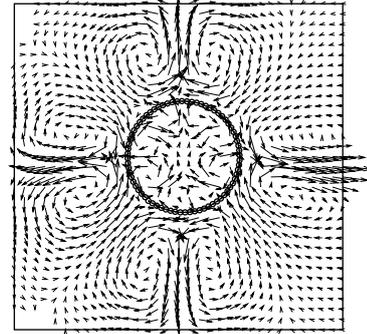
$$\text{Erreur} \hat{=} \frac{((P_v - P_l) - \sigma/R_{\text{réel}})}{(\sigma/R_{\text{réel}})}$$

$$R_{\text{réel}} \hat{=} \sqrt{\text{Volume de gaz}/\pi}$$

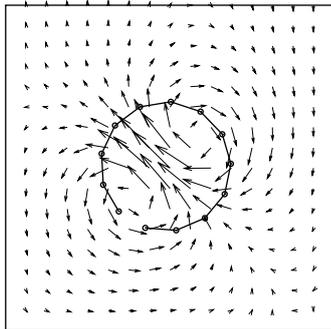
(b) Vérification de la relation de Laplace (le rayon réel de la bulle est déduit de son volume)



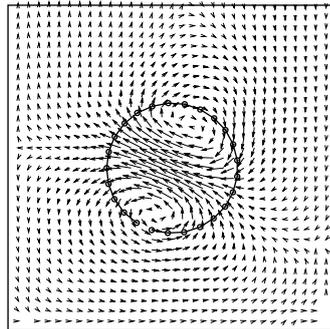
(c) Énergie cinétique



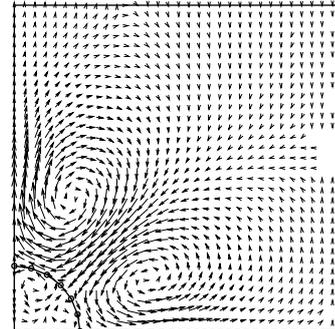
(d) Ancienne méthode (CSF)
Maillage 32x32, $t=10$ s,
 $v_{max} = 6 \cdot 10^{-3} \text{ m s}^{-1}$



(e) Maillage 16x16, $t=20$ s,
 $v_{max} = 2.6 \cdot 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$



(f) Maillage 32x32, $t=20$ s,
 $v_{max} = 1.2 \cdot 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$



(g) Bulle en coin, $t=100$ s,
 $v_{max} = 6 \cdot 10^{-9} \text{ m s}^{-1}$

Figure 4.1 – Test des courants parasites sur un calcul 2D : évolution de l'énergie cinétique du fluide et champ de vitesse résiduel.

de l'isovaleur d'une fonction discrétisée). Plus précisément, l'interface n'est pas à l'équilibre car les courbures discrètes évaluées aux nœuds de l'interface ne sont pas toutes égales. Les modes de vibration de haute fréquence sont atténués très rapidement, et le mode de vibration qui subsiste le plus longtemps est le mode de plus basse fréquence.

Après la phase de décroissance, l'énergie cinétique augmente à nouveau. Le champ de vitesse (figures 4.1(e) et 4.1(f)) correspond à une accélération de la bulle. Ce phénomène est lié à la somme non nulle des forces de tension de surface dans la nouvelle méthode. Nous estimons que ce phénomène n'est gênant que dans le cas où les inclusions sont pratiquement statiques et sans contact avec les bords. Cette situation ne se présentera pas dans les problèmes que nous traiterons. La figure 4.1(g) montre qu'une bulle en paroi est suffisamment contrainte pour que le champ de vitesse tende vers zéro. Le champ de vitesse résiduel résulte alors de

l'amortissement visqueux du champ de vitesse initial.

Ce cas test permet aussi de quantifier la précision de la relation de Laplace. La figure 4.1(b) montre l'erreur relative sur le saut de pression en fonction de la précision du maillage. On a une convergence à l'ordre 2. Le rayon de la bulle effectivement calculée est défini à partir du volume de gaz et est légèrement inférieur au rayon spécifié au départ. La méthode de construction des interfaces (à partir d'une isovaleur), ne garantit pas en effet une conservation exacte des volumes.

Dans un problème comme celui-ci, où la capillarité et l'inertie dominent la dynamique de l'écoulement, la nouvelle méthode permet un gain de temps appréciable en comparaison de l'ancienne (d'une part à cause de la discrétisation plus grossière des interfaces et d'autre part parce que la nouvelle méthode ne résout pas un problème de Poisson pour calculer l'indicatrice). Le nouvel algorithme parvient à 20 s de temps physique en 45s de calcul avec 1200 pas de temps de 16 ms, alors qu'il faut 16 minutes à l'ancienne méthode et 16000 pas de temps de 1.25 ms pour arriver au même point (maillage 32x32).

Ondes capillaires

Ce test a déjà été réalisé par Duquennoy [21] sur l'ancienne méthode de front-tracking. Il permet de vérifier le couplage entre la tension de surface et l'inertie du fluide et consiste à simuler l'oscillation d'une interface bidimensionnelle de forme sinusoïdale. Il permet de quantifier la dissipation du schéma numérique et d'identifier des critères de stabilité sur le pas de temps ou sur le maillage. Le couplage lui-même est validé en comparant la fréquence d'oscillation à une solution analytique de référence (tirée d'une publication de Prosperetti [68]).

Les caractéristiques du cas test sont détaillées sur la figure 4.2. Les calculs effectués avec différents pas de temps et différents maillages montrent que la dissipation de l'énergie de surface dépend essentiellement du pas de temps et peu du maillage. Dans notre approche, le pas de temps a été sensiblement augmenté grâce à l'augmentation de l'intervalle entre les nœuds du maillage d'interface. L'augmentation du pas de temps s'accompagne d'une dissipation beaucoup plus rapide de l'énergie de surface en comparaison de celle obtenue par Duquennoy. Pour retrouver un niveau de dissipation faible, il suffit donc de diminuer le pas de temps.

En règle générale, la méthode est stable pour un rapport de discrétisation $\Delta_{eul}/\Delta_{lag}$ de 0.6. Or sur le maillage le plus grossier on peut voir se développer une légère instabilité avec le schéma explicite. Le schéma semi-implicite ne permet pas d'augmenter significativement le pas de temps par rapport au schéma explicite et il est beaucoup plus dissipatif. Il permet cependant d'éliminer certaines instabilités du schéma explicite.

Gravité

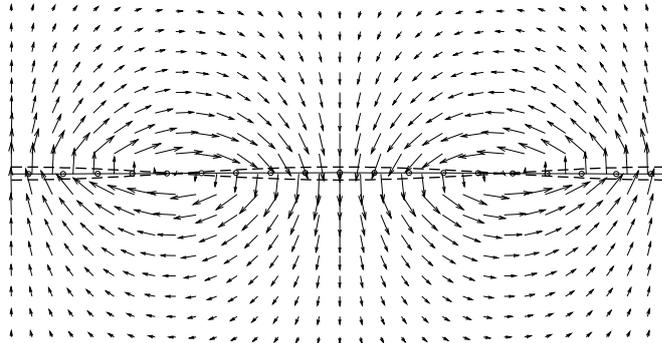
Ce cas test est conçu pour valider le couplage entre la tension de surface et la gravité. Il permet notamment de vérifier que ce couplage ne donne pas lieu à des courants parasites. On fait croître une bulle en paroi basse par injection de fluide à une vitesse très faible. La bulle prend une forme hémisphérique puis se déforme progressivement sous l'effet de la pression hydrostatique. On compare le profil obtenu à une solution obtenue par intégration numérique de l'équation différentielle du profil. Ce test permet de vérifier la conservation du volume des phases et la précision des profils d'équilibre des interfaces.

La solution de référence $(x(s), y(s), \theta(s))$ est calculée par intégration numé-

$\rho_l = \rho_v = 1$
 $\mu_l = \mu_v = 0$
 $\sigma = 1$
 domaine $l = 2, h = 1$
 interface $y = 0.01 \cdot \cos 2\pi x$

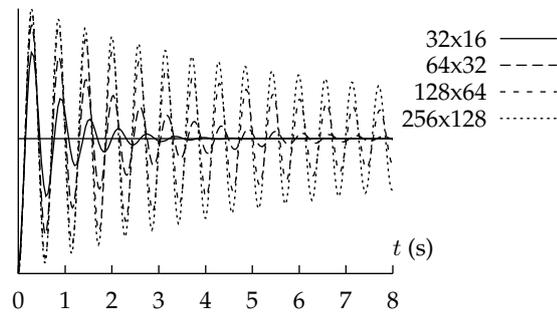
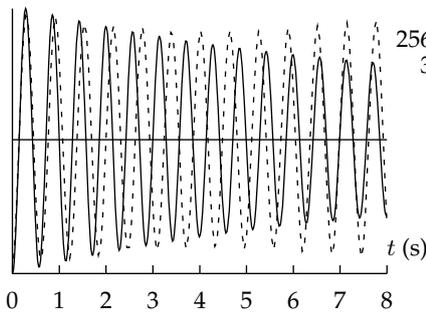
Pulsation théorique (d'après [68]) :
 $\omega_0 = 2 \pi^{3/2} \text{ s}^{-1}$

Pulsation obtenue sur le maillage
 256x128, méthode explicite :
 $\omega = 0.99 \omega_0$



(a) Paramètres du test

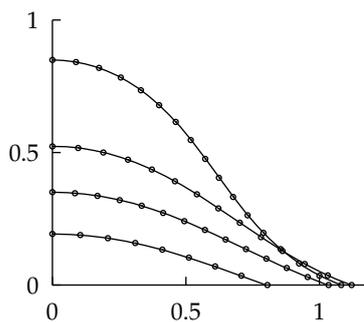
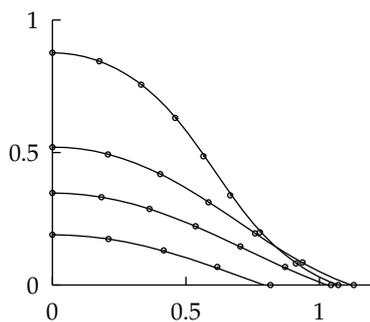
(b) Positions extrêmes de l'interface et champ de vitesse



(c) Amplitude du mode d'oscillation en fonction du temps (transport des interfaces par un schéma explicite)

(d) Amplitude du mode d'oscillation en fonction du temps (transport semi-implicite)

Figure 4.2 – Validation de la méthode de front-tracking sur le cas test de l'onde capillaire



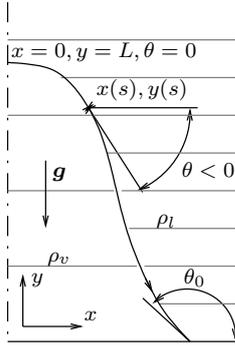
We	$\delta = 0.3$	$\delta = 0.6$
0.032	3.0%	0.65%
0.058	1.3%	0.22%
0.087	0.96%	0.12%
0.141	0.04%	0.02%

(a) Profils de l'interface, intervalle_nceuds=0.3

(b) intervalle_nceuds=0.6

(c) Précision obtenue

Figure 4.3 – Calcul avec $\rho_l = 1, \rho_v = 0.5, \sigma = 1, g = 12$ dans un domaine $L \times H = 1.5 \times 2$, maillage 30×40 , angle de contact $\theta_0 = 160^\circ$. Les lignes continues sont les solutions de références et les points représentent la position des nœuds du maillage de l'interface dans la solution numérique (le paramètre L utilisé pour les solutions de référence est la hauteur du premier nœud dans la solution numérique). Les nombres de Weber correspondant aux quatre profils sont reportés dans le tableau, ainsi que la précision relative sur l'abscisse de la ligne de contact. La convergence obtenue est d'ordre 2 et la précision obtenue avec seulement quelques points est déjà très intéressante.



rique de l'équation différentielle suivante :

$$x' = \cos \theta \quad (4.1)$$

$$y' = \sin \theta \quad (4.2)$$

$$-\theta' - \frac{\sin \theta}{x} = \frac{1}{\sigma} (\rho_l - \rho_v) g (y - y_0) \quad (\text{courbure moyenne}) \quad (4.3)$$

Le terme $\sin \theta / x$ est la deuxième courbure de l'interface liée à la symétrie de révolution. On adimensionnalise les longueurs par la hauteur L de la goutte pour obtenir le système suivant :

$$\tilde{x}' = \cos \theta \quad (4.4)$$

$$\tilde{y}' = \sin \theta \quad (4.5)$$

$$-\theta' - \frac{\sin \theta}{\tilde{x}} = \frac{1}{We} (\tilde{y} - \tilde{y}_0) \quad \text{avec } We \hat{=} \frac{\sigma}{L^2 g (\rho_l - \rho_v)} \quad (4.6)$$

Le paramètre y_0 est déterminé de sorte que le profil de la solution atteigne le plan $y = 0$ avec un angle de contact imposé $\theta = \theta_0$. Nous avons utilisé la désormais classique méthode de tir pour obtenir numériquement une solution de ce système qui servira de référence.

Les résultats du cas test sont présentés sur la figure 4.3. La précision obtenue est très bonne avec assez peu de points grâce à l'évaluation à l'ordre 2 de la courbure et de l'angle de contact. Cette précision est totalement indépendante de la finesse du maillage eulérien : le profil d'équilibre est uniquement déterminé par la courbure géométrique des interfaces et le potentiel de gravité évalué aux nœuds de l'interface. Il ne dépend donc d'aucune grandeur discrète du maillage fixe. La seule contrainte imposée par le maillage fixe est la stabilité du schéma de transport qui contraint le rapport de finesse des deux maillages. À l'issue de ce test, on ne décèle aucun champ de vitesse parasite.

4.1.2 Problèmes avec transfert de masse et de chaleur

Évaporation à une interface plane

Ce cas test permet de valider les aspects suivants :

- le couplage entre la conduction et la convection (en particulier le nombre de Péclet),
- le couplage entre la conduction dans les phases et le flux de chaleur aux interfaces,
- le couplage entre le flux de chaleur aux interfaces et les variations de volume des phases.

Les deux premiers points font l'objet d'un traitement non conservatif. On s'attend à ce que le bilan d'énergie ne soit pas parfaitement respecté. On s'attachera donc à quantifier cette erreur. Le dernier point fait quant à lui l'objet d'un traitement exact dans le schéma.

Le problème résolu est celui de l'évaporation d'un liquide surchauffé à une interface plane. On choisit une configuration telle que la résistance d'interface, les variations de pression et de température de saturation et l'inertie du fluide sont négligeables. L'interface se comporte donc comme une condition aux limites de température imposée $T = T_{sat}$, et si la température du liquide est uniforme $T = T_\infty$ à l'instant initial on a la solution analytique suivante du champ de température dans le liquide en fonction du temps

$$\frac{T(\delta) - T_{sat}}{T_\infty - T_{sat}} = \operatorname{erf} \left(\frac{1}{2} \frac{\delta}{\sqrt{\alpha t}} \right), \quad \text{avec } \alpha \hat{=} \frac{k_l}{\rho_l c_{Pl}} \quad (4.7)$$

où δ est la distance à l'interface liquide-vapeur. La densité de flux de chaleur à l'interface liquide-vapeur vérifie :

$$\dot{q}(t) = k_l \nabla T = \frac{k_l (T_\infty - T_{sat})}{\sqrt{\alpha t \pi}} \quad (4.8)$$

L'intégrale de cette densité de flux par rapport au temps est proportionnelle à la masse de liquide évaporé ou encore au déplacement de l'interface liquide-vapeur. Cette intégrale s'écrit :

$$\tilde{e}_{\dot{q}} = \frac{2 k_l (T_\infty - T_{sat})}{\sqrt{\alpha \pi}} \sqrt{t} \quad (4.9)$$

Pour adimensionnaliser cette équation, on choisit une dimension caractéristique δ_0 égale à 1/4 de la largeur du domaine et un temps caractéristique t_0 tel que la couche limite thermique soit d'épaisseur δ_0 , défini par

$$\frac{1}{2} \frac{\delta_0}{\sqrt{\alpha t_0}} = 1 \Rightarrow t_0 \hat{=} \frac{\delta_0^2}{4 \alpha} \quad (4.10)$$

On adimensionnalise la densité de flux de chaleur par sa valeur au temps t_0 :

$$\tilde{\dot{q}} \hat{=} \frac{\dot{q}}{\dot{q}_0}, \quad \dot{q}_0 \hat{=} \dot{q}(t_0) \Rightarrow \tilde{\dot{q}} = \frac{1}{\sqrt{\tilde{t}}} \quad (4.11)$$

Enfin, on adimensionnalise l'énergie surfacique $e_{\dot{q}}$ par l'intégrale de la densité de flux de chaleur sur une durée t_0 , soit :

$$\tilde{e}_{\dot{q}} \hat{=} \frac{e_{\dot{q}}}{\dot{q}_0 t_0} \Rightarrow \tilde{e}_{\dot{q}} = 2\sqrt{\tilde{t}} \quad (4.12)$$

Le bilan d'énergie interne du fluide que l'on doit obtenir si les équations du modèle sont correctement résolues s'écrit

$$\underbrace{\int_{\Omega} \rho c_P (T - T_\infty) d\Omega}_{\hat{=} e_\Omega S} + \underbrace{\int_0^t \dot{q} S dt}_{\hat{=} e_{\dot{q}} S} = 0 \quad (4.13)$$

où S est la surface d'interface. La valeur du nombre de Péclet indique si les termes convectifs sont dominants dans le problème. On l'évalue en utilisant la vitesse relative de la vapeur par rapport à l'interface et la longueur caractéristique δ_0 (le facteur 4 est ajouté par commodité, de sorte que le nombre de Péclet soit égal à la vitesse adimensionnelle)

$$\text{Pe} \hat{=} \frac{v \delta_0}{4 \alpha_l} = \frac{k_l (T_\infty - T_{sat}) \delta_0}{4 \sqrt{\alpha} t_0 \pi \rho_v \mathcal{L} \alpha_l} = v \frac{t_0}{\delta_0} = \tilde{v} \quad (4.14)$$

où la vitesse \tilde{v} est adimensionnée par la vitesse caractéristique δ_0/t_0 .

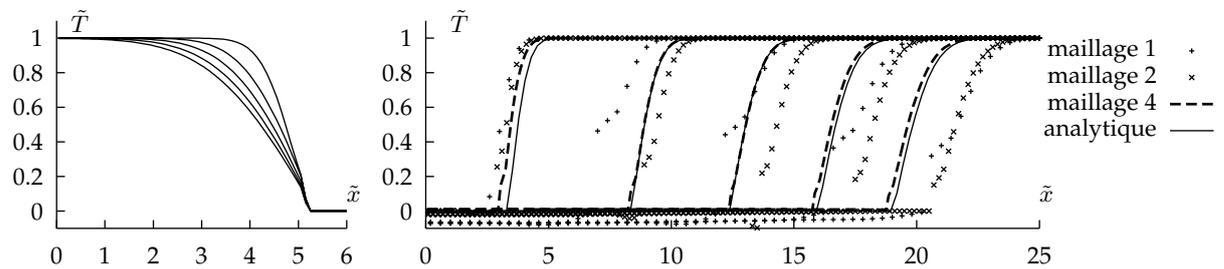
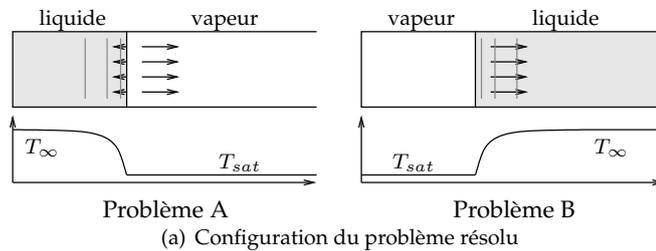
Le problème discret est résolu à partir d'un temps t non nul pour que le champ de température soit continu à l'instant initial. On a choisi de démarrer le calcul à l'instant $\tilde{t}_{\text{init}} = 0.64$. L'énergie $e_{\dot{q}}$ est évaluée à partir des résultats numériques en utilisant l'intégrale de l'indicatrice sur le domaine (la méthode numérique assure le bilan de masse exact des phases) :

$$\text{cas A :} \quad e_{\dot{q}} = \rho_l \mathcal{L} \int_{\Omega} -\bar{I}(t) + I(t_{\text{init}}) d\Omega \quad (4.15)$$

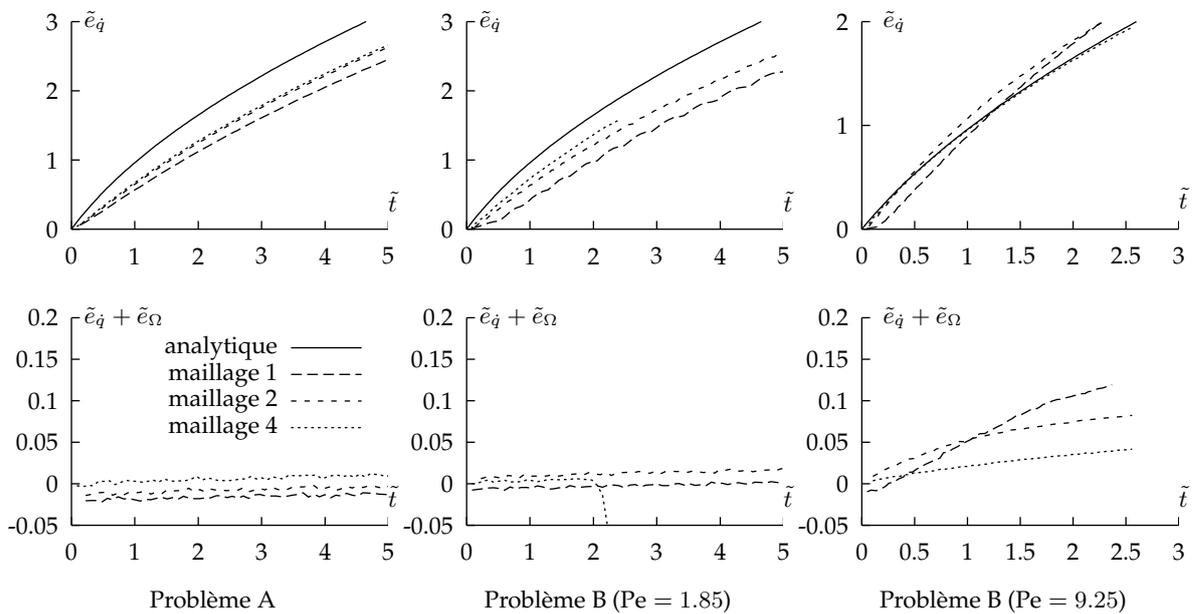
$$\text{cas B :} \quad e_{\dot{q}} = \rho_v \mathcal{L} \int_{\Omega} \bar{I}(t) - I(t_{\text{init}}) d\Omega \quad (4.16)$$

L'énergie e_Ω est évaluée en utilisant l'expression suivante :

$$e_\Omega = \int_{\Omega_{\text{liquide}}} \overline{\rho c_P} (\bar{T} - T_\infty) d\Omega \quad (4.17)$$



(b) Profils de température : à gauche pour le problème A aux temps $\tilde{t} \in \{0.137, 1.2, 2.28, 3.35, 4.43\}$, à droite pour le problème B et $Pe = 9.25$ aux temps $\tilde{t} \in \{0.069, 0.60, 1.13, 1.68, 2.21\}$.



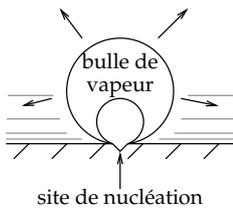
(c) Différence entre l'expression analytique de l'énergie surfacique e_q (qui mesure aussi le déplacement de l'interface) et le calcul numérique (en haut), et bilan d'énergie totale (en bas). Le calcul sur le problème B avec $Pe = 1.85$ a développé une instabilité au cours du déplacement de l'interface.

Figure 4.4 – Cas-test de l'évaporation d'un liquide surchauffé : schémas de principe et résultats numériques.

Le schéma de principe et les résultats numériques sont représentés sur la figure 4.4. Les calculs ont été menés sur trois maillages différents pour lesquelles la couche limite thermique a une épaisseur initiale de 3, 6 et 12 mailles respectivement. Ces résultats appellent les commentaires suivants :

- L'erreur sur le flux de chaleur est relativement importante, comprise entre 2 et 10% selon la finesse du maillage. Cette erreur est liée d'une part à la discrétisation relativement grossière de la couche limite thermique (entre 4 et 20 éléments de volumes) et d'autre part à la faible précision du modèle de sous-maille de conduction, qui ne tient pas compte pour l'instant de la position des interfaces à l'intérieur des mailles.
- L'erreur sur le bilan d'énergie est inférieure à 1% lorsque la valeur du nombre de Péclet est inférieure à 2. Lorsque le nombre de Péclet augmente, cette erreur est inversement proportionnelle à la finesse du maillage. Sur ce cas test, elle peut atteindre 10% s'il y a moins de 5 éléments de maillage dans la couche limite thermique. Elle peut être encore plus grande pour des vitesses d'interface plus élevées.

4.2 Simulation de l'ébullition



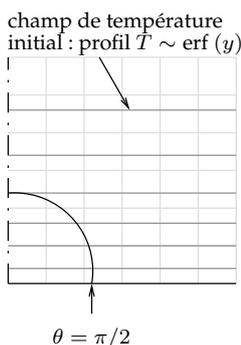
Dans cette partie, nous tentons d'appliquer la méthode de simulation numérique que nous avons développée à la simulation de la croissance d'une bulle de vapeur sur un site isolé. Les premiers résultats ont été présentés dans [55].

La gamme des problèmes accessibles actuellement reste très réduite : on ne peut simuler que des problèmes bidimensionnels et axisymétriques. C'est pourquoi la seule configuration d'ébullition en paroi que l'on puisse simuler est celle de la croissance d'une bulle isolée sur une paroi horizontale en l'absence de convection (figure ci-contre). Bien qu'il soit très spécifique, ce problème est fondamental pour l'étude de l'ébullition : il est en effet représentatif du cadre plus général de l'ébullition en paroi. De plus, de nombreuses expériences ont été réalisées dans une telle configuration, ce qui permettra de confronter le calcul à des résultats expérimentaux.

4.2.1 Définition du problème résolu

On cherche à reproduire par la simulation numérique la croissance d'une bulle de vapeur sur une paroi horizontale surchauffée dans un régime d'ébullition saturée. La bulle de vapeur croît sous l'effet du transfert de masse à l'interface. À partir d'une certaine taille, les forces de flottabilité arrachent la bulle à la paroi et elle se détache.

Définition des conditions initiales



Comme notre modèle ne comporte pas de mécanisme de nucléation, il est indispensable de définir une bulle de vapeur au départ. Le calcul démarre avec le profil de bulle de vapeur représenté ci-contre. Le rayon minimal des bulles que l'on peut décrire est déterminé par la finesse du maillage eulérien : ce rayon est d'environ deux fois la taille des éléments. Comme le rayon au détachement est de l'ordre de 1 mm et que le nombre de mailles ne peut dépasser de beaucoup la centaine dans chaque direction, le rayon initial de la bulle est de 10 μm ou plus.

Étant donnée la température de la paroi, on peut évaluer par ailleurs le rayon minimal des bulles de vapeur : ce rayon est tel que la bulle de vapeur soit en équilibre thermodynamique à la température de la paroi. Pour une pression

donnée du liquide P_l , la courbe de saturation donne la température de saturation $T_{sat} = T_{sat}(P_l)$. La relation de Laplace permet de calculer la pression dans la bulle de vapeur en fonction de la pression du liquide :

$$P_v = P_l + \frac{2\sigma}{R} \quad (4.18)$$

Par ailleurs, l'équation 1.46 relie la pression de la vapeur au rayon de courbure et à la pression de saturation (la courbure est multipliée par deux par rapport à l'équation en référence car l'interface est sphérique et non cylindrique) :

$$P_v = P_{sat}(T_s) - \frac{2\sigma}{R} \frac{\rho_v}{\rho_l - \rho_v} \quad (4.19)$$

Dans cette équation, la température T_s est la température de la bulle de vapeur, qui est égale à la température de la paroi. Enfin, la relation de Clausius-Clapeyron donne une estimation de la variation de la pression de saturation avec la température :

$$P_{sat}(T) - P_l = (T_s - T_{sat}) \frac{\rho_v \mathcal{L}}{T_{sat}} \quad (4.20)$$

On en déduit donc le rayon d'équilibre de la bulle de vapeur :

$$R = \frac{2\sigma}{\rho_v \mathcal{L}} \frac{\rho_l}{\rho_l - \rho_v} \frac{T_{sat}}{T_s - T_{sat}} \quad (4.21)$$

Pour une surchauffe de 1 K à 1 bar, le rayon d'équilibre des bulles de vapeur d'eau est égal à 30 μm environ. La taille initiale choisie pour le calcul a donc un ordre de grandeur raisonnable.

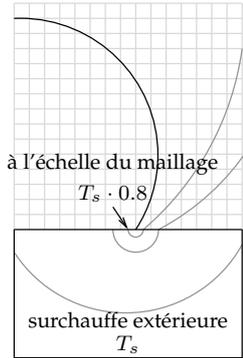
Le choix de la condition initiale pour le champ de température du fluide est un profil de couche limite thermique dont l'épaisseur correspond à un temps de propagation d'une fraction de seconde dans le liquide. En fait, ce profil n'a que très peu d'influence sur le résultat de nos simulations car l'essentiel du flux de masse est localisé aux lignes de contact. La température du liquide a donc assez peu d'importance tant qu'il n'est pas sous-refroidi.

Nous avons réalisé des calculs avec un liquide sous-refroidi, mais les résultats de ces calculs sont suspects (le schéma de sous-maille de convection et de diffusion semble faux en condensation, c'est un problème numérique important qui reste à résoudre). Nous ne présenterons donc que des simulations d'ébullition saturée.

Le champ de vitesse initial est choisi nul. Là encore, cette vitesse a peu d'influence sur le résultat car dans les conditions du calcul, l'état des bulles de vapeur est bien décrit par une succession d'états statiques : la forme des bulles de vapeur ne dépend pas de la vitesse de croissance.

Définition des conditions aux limites du problème

N'ayant pas à notre disposition une méthode numérique permettant de calculer le champ de température dans la paroi, les calculs ne sont pertinents que si cette température peut être considérée comme uniforme. On peut estimer la variation de la température de la paroi à l'aide du modèle de ligne de contact. Ce dernier est utilisé pour calculer le transfert de masse et de chaleur aux échelles inférieures à la taille du maillage, soit environ 10 μm . Au-dessus de cette échelle, il s'agit d'estimer l'erreur commise si on suppose que la température de la paroi est constante. Appliquons le modèle de ligne de contact aux échelles comprises entre 10 μm et 1 mm. Pour de l'eau sur du cuivre et un angle de contact de 15°, si la température est imposée à une distance de 1 mm, la surchauffe à une distance



de 10 μm de la ligne de contact est d'environ 20% inférieure à la surchauffe imposée à l'extérieur. Si on suppose que la température de paroi est constante, l'erreur commise est donc inférieure à 20% (en pratique, comme le problème macroscopique a une symétrie de révolution, l'erreur est bien plus faible que cette valeur obtenue pour un modèle bidimensionnel). La modélisation choisie pour la paroi représente donc approximativement un bloc de cuivre de grande épaisseur dont la température est supposée constante.

L'angle de contact est modélisé par les paramètres suivants :

- modèle de fluide partiellement mouillant avec hystérésis,
- angle de contact d'avancée de 90° ,
- angle de contact de recul de 15° à 30° selon les simulations (c'est un paramètre de cette étude)
- longueur de glissement de 0.1 nm.

L'angle d'avancée choisi correspond aux valeurs typiques que nous avons pu mesurer dans nos expériences. Nous verrons qu'il est très facile de prévoir l'effet de ce paramètre sur la croissance et le détachement des bulles de vapeur.

Enfin, le bord droit du domaine est modélisé par une condition aux limites de symétrie et le bord haut par une condition aux limites de pression imposée.

4.2.2 Résultats numériques

Nous avons exploré l'effet des paramètres suivants sur la vitesse de croissance et le diamètre au détachement des bulles de vapeur d'eau :

- la pression de travail (entre 1 bar et 140 bar),
- la température de la paroi (la surchauffe est de quelques K),
- l'angle de contact d'avancée et de recul,
- la taille initiale de la bulle de vapeur.

Description d'une première configuration

Le premier résultat concerne la croissance d'une bulle de vapeur à une pression de 1 bar, pour un angle de contact de recul de 15° et une surchauffe de 2 K. Les résultats sont représentés de façon synthétique sur la figure 4.5.

Il apparaît que le profil de l'interface est une succession d'états stationnaires : la forme de la bulle de vapeur est indépendante de la dynamique du système et dépend uniquement de l'équilibre entre la tension de surface et la gravité.

Le champ de température semble peu affecté par la croissance de la bulle. L'épaisseur de la couche de liquide surchauffé à la paroi ne change pas beaucoup au cours du calcul, de sorte que le flux de chaleur et le transfert de masse sont pratiquement nuls en dehors d'une région située à la base de la bulle de vapeur. Lors de la croissance, la bulle entraîne avec elle une couche de liquide surchauffé qui s'amincit de plus en plus à mesure que la surface de la bulle augmente.

Dans la région proche de la ligne de contact, le champ de température peut être modélisé par de la conduction pure.

Deuxième configuration : eau à 140 bar

Cette configuration correspond à la pression de fonctionnement du circuit primaire d'une centrale électronucléaire. La principale différence par rapport à la configuration précédente est la masse volumique de la vapeur qui est près de 150 fois plus élevée. Malgré la diminution d'un facteur deux de la chaleur latente de vaporisation, une telle différence a une conséquence immédiate sur la dynamique

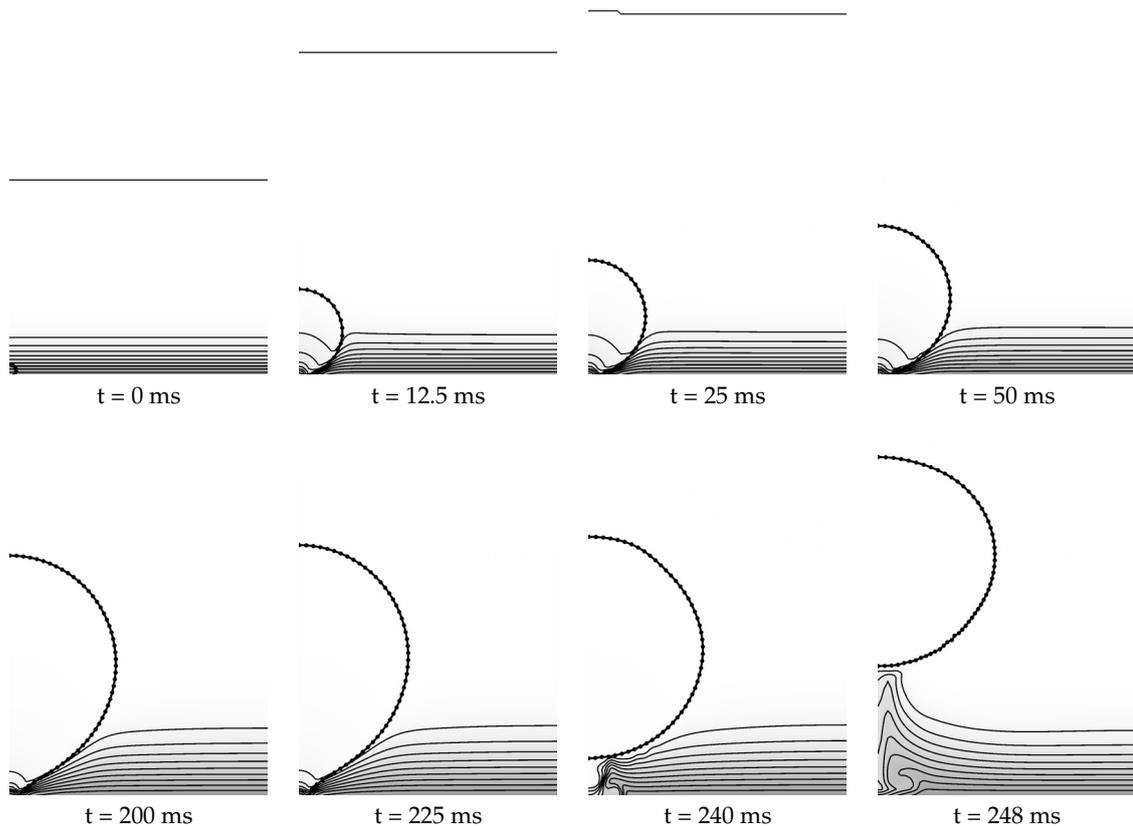


Figure 4.5 – Croissance d’une bulle de vapeur, 1 bar, surchauffe de paroi de 2 K. Profil d’interface et champ de température au cours des différentes phases de croissance (isothermes tous les 2 K). Le domaine représenté a une largeur de 2 mm. L’angle de recul est fixé à 15° et l’angle d’avancée à 100°

de la croissance des bulles : il faut beaucoup plus d’énergie pour produire une bulle de la même taille qu’à pression atmosphérique. Si le coefficient d’échange n’était pas modifié, il faudrait donc près de 75 fois plus de temps pour produire une bulle de la même taille.

Remarquons tout de suite que d’autres paramètres entrent en jeu, qui ont plutôt tendance à augmenter le coefficient d’échange et à diminuer le temps de croissance :

- la tension de surface est dix fois plus faible, ce qui diminue nettement le diamètre des bulles au détachement,
- la résistance d’interface est plus faible, ce qui augmente de 20 à 40% le coefficient d’échange et le flux de chaleur à la ligne de contact.

En tenant compte de l’ensemble de ces paramètres, on obtient un temps de croissance 20 fois plus long entre l’instant initial et le détachement pour la même surchauffe de paroi. Les calculs ont été menés avec une surchauffe de 20 K pour limiter le temps de calcul. Même ainsi, le temps physique nécessaire à la croissance et au détachement de la bulle est très long, près d’une demi-seconde.

Nous avons testé l’effet d’une variation de l’angle de contact de recul sur cette configuration. Les profils des interfaces et le champ de température à différents instants sont représentés sur la figure 4.6. L’angle de contact et la distance entre la ligne de contact et l’axe de symétrie (rayon de la tache sèche) en fonction du temps sont représentés sur la figure 4.7.

L’angle de recul de 15° n’est jamais atteint : au début de la phase de croissance, l’angle diminue à mesure que la bulle grossit. À partir d’une certaine taille, les

forces de flottabilité soulèvent la bulle et l'angle augmente à nouveau. Pendant tout ce temps, la ligne de contact reste à la même position. Enfin, lorsque l'angle de contact dépasse 90° , les forces de flottabilité ne sont plus compensées par la tension de surface et la bulle se détache.

Avec un angle de recul de 30° , la phase de croissance est un peu différente : au tout début de la croissance, l'angle diminue rapidement pour atteindre la valeur de 30° . Ensuite, à mesure que la bulle grossit, la ligne de contact recule et la valeur de l'angle de contact est constante. Pendant cette phase, le transfert de masse augmente car la longueur de la ligne de contact augmente. À partir d'une certaine taille, les forces de flottabilité soulèvent la bulle et l'angle de contact diminue à nouveau, de même que le transfert de masse. Lorsque l'angle dépasse l'angle d'avancée, la ligne de contact devient instable et la bulle se détache.

L'augmentation de l'angle de contact de recul a donc des effets contradictoires :

- elle entraîne une augmentation du rayon de la tache sèche, donc de la longueur des lignes de contact et du flux de chaleur,
- elle diminue le flux de chaleur par unité de longueur de lignes de contact (ce flux augmente quand l'angle de contact diminue),
- elle augmente la résultante des forces de tension superficielle qui maintiennent la bulle à la paroi et augmente donc le rayon de la bulle au détachement.

De ce point de vue, il n'est pas évident qu'une surface plus mouillante soit automatiquement associée à un meilleur coefficient d'échange en ébullition. Le problème vient du fait qu'en diminuant l'angle de contact, on diminue aussi la longueur des lignes de contact.

On peut aussi prévoir l'effet d'une diminution de l'angle d'avancée. La composante verticale de la force de tension de surface exercée par la bulle sur la paroi s'écrit

$$f = 2 \pi x \sin \theta \quad (4.22)$$

où x est le rayon de la tache sèche. Lorsque l'angle de contact augmente sous l'effet de la force de flottabilité, la bulle reste accrochée à la paroi car la résultante des forces de tension de surface augmente. En revanche, si l'angle de contact atteint l'angle d'avancée, la bulle se détache presque immédiatement : au lieu d'augmenter, la résultante des forces de tension de surface diminue car l'angle de contact est constant et la ligne de contact se rapproche de l'axe. Ainsi, la bulle se détache lorsque l'angle de contact atteint l'angle d'avancée ou la valeur de 90° . Sur l'exemple d'un angle de recul de 30° , on voit que l'angle de contact atteint 45° un peu avant 300 ms. Par conséquent, si l'angle d'avancée était de 45° au lieu de 90° , la bulle se détacherait après un temps deux fois plus court.

Ce résultat prouve que les deux angles d'avancée et de recul sont importants pour déterminer le diamètre et la fréquence de détachement des bulles de vapeur. L'angle de recul détermine d'abord le rayon de la tache sèche, puis ce rayon et l'angle d'avancée déterminent le volume de la bulle au détachement.

Troisième configuration : augmentation de la température de paroi

Jusqu'à présent, toutes les configurations étudiées pouvaient être modélisées par une succession d'états statiques : le champ de température est quasiment décrit par de la conduction pure à proximité de la paroi et le profil de la bulle de vapeur est indépendant de la vitesse. Or, si on augmente la température de la paroi, il arrive un moment où la dynamique de la ligne de contact produit une variation significative de l'angle de contact, jusqu'au point d'atteindre un angle de contact nul. Dans ce cas, un film de liquide est déposé sur la paroi et le mécanisme d'ébullition change complètement.

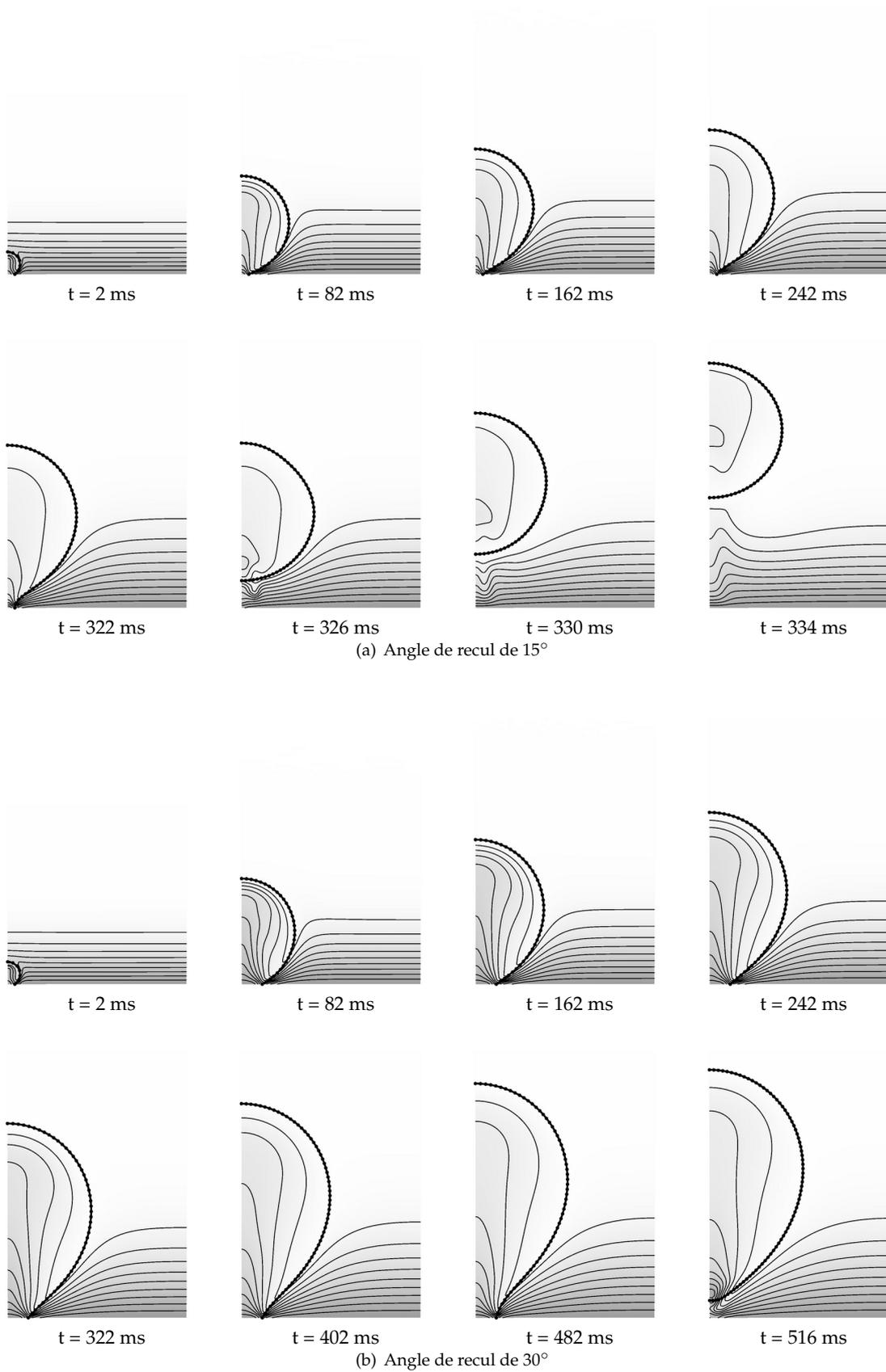


Figure 4.6 – Croissance d’une bulle de vapeur, 140 bar, surchauffe de paroi de 20 K. Profil d’interface et champ de température au cours des différentes phases de croissance (isothermes tous les 0.2 K). Le domaine représenté a une largeur de 1 mm.

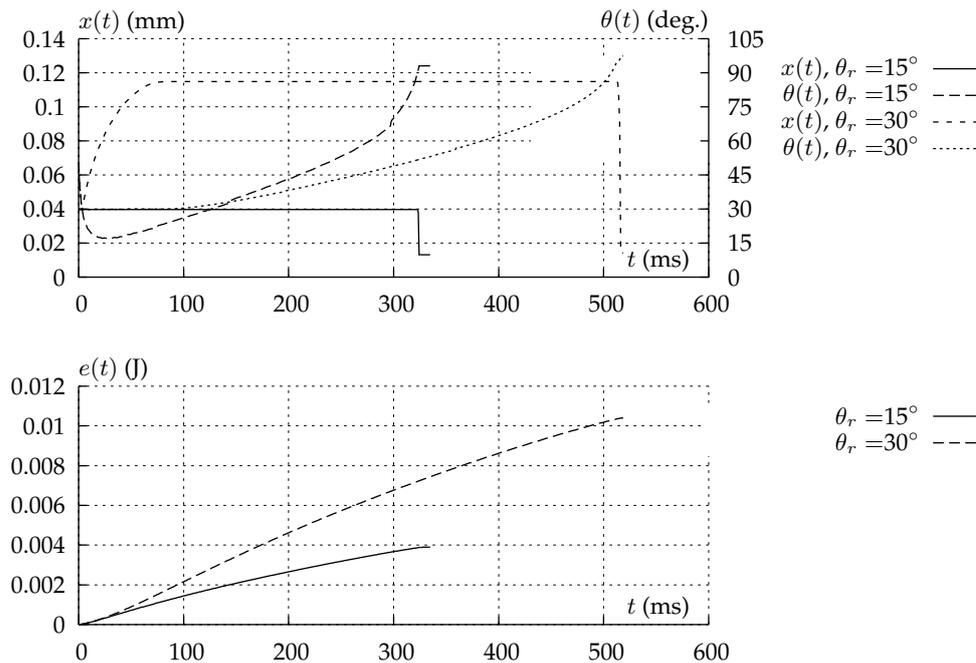


Figure 4.7 – Croissance d’une bulle de vapeur, 140 bar, surchauffe de paroi de 20 K. Abscisse $x(t)$ de la ligne de contact en fonction du temps, angle de contact $\theta(t)$ et enthalpie $e(t)$ utilisée pour vaporiser le liquide (intégrale de la puissance thermique aux interfaces entre l’instant initial et l’instant t).

La figure 4.8 représente le résultat d’une simulation de croissance d’une bulle de vapeur à 1 bar avec une surchauffe de 4 K, soit seulement deux fois plus que le premier résultat présenté. Dans ce cas, la ligne de contact est instable : l’angle de contact dynamique est suffisamment petit pour que le flux de chaleur augmente et rende instable la ligne de contact. La dynamique du phénomène est radicalement différente : en moins de 1 ms, la ligne de contact a parcouru les 2 mm du domaine de calcul et engendré un important volume de vapeur. Ce phénomène s’apparente à la formation de la micro-couche de la théorie de Cooper et Loyd [14]. Malheureusement, nous ne sommes pas encore en mesure de simuler ce phénomène de façon réaliste : le calcul est mené en supposant que l’angle de contact tend vers zéro, mais le flux de masse correspondant à la présence de la micro-couche sur la paroi n’est pas pris en compte. Ainsi, le flux de chaleur à la ligne de contact est sans doute surestimé car on suppose qu’il existe une vraie ligne de contact.

En revanche, on peut montrer que la taille initiale de la bulle de vapeur a une influence significative sur l’apparition de l’instabilité : si la bulle de vapeur a une grande taille au départ, le rapport de la longueur de la ligne de contact au volume de la bulle est petit. La vitesse de croissance est alors plus faible et l’instabilité peut ne pas démarrer. Plus la bulle est petite au départ, plus rapide est sa croissance dans les premiers instants et c’est à ce moment que l’instabilité peut éventuellement se déclencher.

Les expériences d’ébullition menées à la pression atmosphérique montrent que le coefficient d’échange thermique n’augmente significativement qu’à partir d’une surchauffe minimale de la paroi de quelques degrés. Il est probable que le processus de croissance que nous avons obtenu pour une surchauffe de 2 K ne soit donc pas représentatif du régime d’ébullition le plus courant. Ce dernier semble plutôt caractérisé par la formation d’une micro-couche, dont nous avons vu les prémices dans la dernière simulation étudiée.

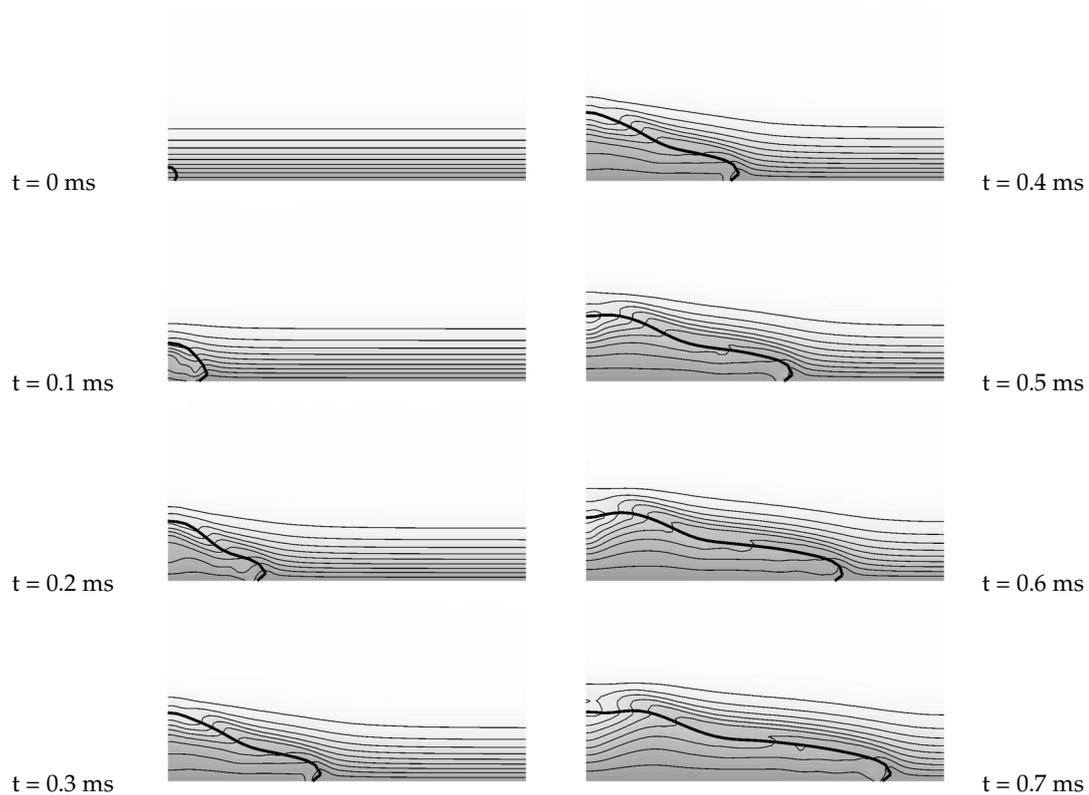


Figure 4.8 – Croissance d’une bulle de vapeur d’eau à 1 bar pour une surchauffe de paroi de 4 K et un angle de recul de 15° . Le débit de vapeur entraîne une grande vitesse de recul de la ligne de contact. L’angle de contact dynamique diminue, le flux de chaleur augmente et la ligne de contact recule encore plus vite. Ce phénomène correspond à la formation de la micro-couche, et n’est pas pris en compte par la simulation.

4.2.3 Discussion

La méthode numérique permet actuellement de simuler une configuration très particulière de l’ébullition : la croissance d’une bulle de vapeur sur une plaque horizontale en milieu saturé, pour des surchauffes telles que la ligne de contact se déplace à une vitesse inférieure à la vitesse maximale de démouillage.

Analyse de la croissance des bulles à basse pression

Ce régime semble peu probable à basse pression. La thèse de Fei Yan [92] fournit des données expérimentales sur la fréquence de détachement des bulles de vapeur sur un site isolé dans des conditions très similaires à celles que nous avons simulées. Les résultats obtenus sont cohérents avec nos simulations :

- pour des températures de surchauffe inférieures à 3 K, la fréquence de détachement est inférieure à 10 s^{-1} , elle est de l’ordre de 2 s^{-1} à 2 K,
- pour des surchauffes supérieures à 3 K, la fréquence de détachement augmente très rapidement jusqu’à plusieurs dizaines par seconde.

On peut en conclure qu’à basse pression, le régime d’ébullition que nous avons simulé pour une surchauffe de 2 K correspond à un cas très particulier peu probable en pratique. Comme la fréquence de détachement est très faible, le coefficient d’échange est faible lui aussi. Par conséquent, à flux imposé, la température de la paroi doit rapidement augmenter jusqu’à atteindre le régime d’ébullition avec formation d’une micro-couche, dont la nature instable produit un transfert de masse et un coefficient d’échange bien plus élevés.

Notre analyse de l'influence de l'angle de contact conduit à la conclusion suivante : si la surface est très mouillante, l'angle de contact de recul est plus faible. La vitesse maximale de recul de la ligne de contact est donc plus faible elle aussi et la formation de la micro-couche apparaît pour des surchauffes plus faibles. Une surface mouillante favorise donc l'augmentation du coefficient d'échange à des surchauffes plus faibles. Le même raisonnement s'applique pour des surfaces rugueuses, sur lesquelles l'angle de recul est souvent plus petit. En revanche, une fois que l'instabilité qui conduit à la formation de la micro-couche a démarré, le rôle de la ligne de contact devient négligeable.

Analyse de la croissance à haute pression

Le phénomène d'ébullition semble cependant très différent à haute pression. Dans ces conditions, il faut une très grande quantité d'énergie pour former le même volume de vapeur, à tel point qu'il semble peu probable que l'on puisse atteindre le régime instable de la ligne de contact. Il faudrait pour cela surchauffer la paroi de plusieurs dizaines de K. À haute pression une telle surchauffe est peut-être supérieure à la surchauffe thermodynamiquement admissible par le liquide. Nous n'avons pas observé non plus une diminution franche du diamètre des bulles au détachement. En effet, tandis que la tension de surface a été divisée par 10, les forces de flottabilité sont divisées par 2 en raison de la masse volumique plus faible du liquide. Le volume des bulles au détachement est donc divisé par 5 environ (pour un angle de contact et un diamètre de la tache sèche identiques), soit un facteur 1.8 seulement sur le diamètre des bulles.

Dans ce régime d'ébullition, le diamètre des bulles au détachement est fortement influencé par les angles de contact d'avancée et de recul. En particulier, il est très important de déterminer si l'angle d'avancée est faible (de l'ordre de quelques dizaines de degrés) ou élevé (supérieur à 90°). Selon le cas, la fréquence de détachement peut varier d'un facteur 2 ou plus. L'hystérésis de l'angle de contact semble donc avoir une influence significative sur le phénomène dans ce cas.

La raison pour laquelle le diamètre des bulles est souvent bien plus petit à haute pression est sans doute liée à la convection, qui arrache précocement les bulles à la paroi. Contrairement à l'ébullition à basse pression, la croissance des bulles est plus régulière car elle n'est pas liée à l'instabilité initiale et à la présence de la micro-couche. Il semble donc plus facile pour un écoulement cisailé d'arracher la bulle très tôt pendant la phase de croissance.

Cette analyse conforte l'hypothèse utilisée par Mann *et al.* [50] pour calculer le coefficient d'échange en ébullition : ils supposent que la forme de la bulle de vapeur est quasiment sphérique et le régime de transfert de chaleur purement conductif jusqu'au détachement de la bulle.

On peut remarquer que la température de surchauffe de la paroi utilisée pour ce calcul semble irréaliste : les corrélations courantes et les mesures concordent sur le fait que la température de surchauffe de la paroi ne devrait pas dépasser quelques K à haute pression, même lorsque le flux de chaleur est très élevé. Dans ces conditions, le temps de croissance devrait être nettement plus long, ce qui semble également irréaliste. La comparaison du calcul à des résultats expérimentaux devrait permettre de déterminer la raison de cette incohérence. Une partie significative de flux de chaleur à la paroi pourrait par exemple être emportée par le liquide sous la forme d'une surchauffe et convertie plus tard en changement de phase, bien après le détachement de la bulle.

Conclusion

La méthode numérique décrite dans le chapitre précédent fournit des résultats très prometteurs même s'ils ne sont pas encore réellement exploitables. Les validations réalisées sur différents cas tests et les résultats numériques sur l'ébullition donnent la mesure des progrès réalisés :

- un contrôle des courants parasites qui permet de simuler des systèmes de taille millimétrique à basse pression avec les paramètres physiques réels du fluide,
- une formulation rigoureuse de l'équilibre entre la tension de surface et la gravité qui assure que le détachement des bulles est reproduit avec une bonne précision,
- un contrôle du bilan de volume des phases qui permet enfin de relier précisément l'enthalpie fournie au système au volume de vapeur produit,
- un contrôle approximatif du bilan d'énergie interne du fluide,
- la prise en compte rigoureuse d'un modèle de ligne de contact.

Pourtant, la méthode n'a permis de simuler qu'une configuration très particulière de l'ébullition. Elle ne permet pas pour l'instant de simuler correctement la formation de la micro-couche, qui gouverne pourtant la dynamique de croissance de bulles de vapeur à basse pression. Il faut d'autre part ajouter aux simulations le calcul du champ de température dans la paroi, de façon à pouvoir prendre en compte des métaux moins conducteurs que le cuivre. Il sera alors réaliste d'étudier l'effet d'une condition de flux imposé sur une paroi relativement épaisse sur le détachement de plusieurs bulles. Enfin, l'étude de l'influence de la convection nécessite l'utilisation de simulations tridimensionnelles.

Les simulations nous ont éclairés sur l'importance de la ligne de contact dans le phénomène d'ébullition (cette analyse aurait pu être conduite sans la simulation, mais cette dernière fournit au moins des illustrations crédibles du phénomène). Il semble qu'à haute pression, la ligne de contact joue un rôle important en déterminant l'intensité du transfert de masse et de la force qui maintient la bulle accrochée à la paroi. À basse pression, l'influence de la ligne de contact semble limitée au démarrage de l'instabilité qui produit la micro-couche. Nous avons montré l'importance de l'angle de contact statique d'avancée, de l'angle de recul et de l'hystérésis. Pour prédire un coefficient d'échange en ébullition, il faut donc déterminer la valeur de ces paramètres en fonction de la pression.

Ces différents résultats sont prometteurs, mais avant d'espérer extraire des informations quantitatives des simulations, il est important d'améliorer encore la méthode numérique et surtout de valider le modèle de ligne de contact. Une fois le modèle de ligne de contact validé, on peut envisager de comparer le transfert de chaleur obtenu par la simulation à des valeurs mesurées expérimentalement. Une expérience d'ébullition saturée en vase à haute pression correspondrait idéalement à ces calculs, à condition de disposer d'informations supplémentaires sur la densité des sites de nucléation. Ces expériences sont cependant peu courantes : à haute pression, l'expérimentation porte surtout sur l'ébullition convective sous-saturée en canal.

Troisième partie

Validation expérimentale du modèle de ligne de contact

Chapitre 5

Validation expérimentale du modèle de ligne de contact

Dans ce chapitre, on présente le projet CESSIL de validation expérimentale du modèle de transfert singulier à la ligne de contact. L'acronyme CESSIL signifie Caractérisation de l'Evaporation Singulière Située à la Ligne de contact. L'expérience consiste à mesurer précisément le flux de chaleur lors de l'évaporation d'une goutte en atmosphère saturée. On y présente quelques calculs théoriques permettant le dimensionnement de l'expérience et on spécifie la précision requise pour les mesures. Dans la deuxième partie, on présente les premiers résultats expérimentaux obtenus avec une configuration simplifiée : une goutte d'eau posée sur une plaque plane.

5.1 Présentation du concept

5.1.1 Choix d'une configuration

Le but de cette expérience est de qualifier le modèle de transfert de masse et de chaleur singuliers à la ligne de contact pour une ligne de contact statique (et on espère pouvoir un jour valider le modèle dynamique). En un mot, ce modèle se traduit par une relation entre

- l'angle de contact,
- la température de la paroi et
- le transfert de masse et de chaleur.

Le modèle théorique comporte un grand nombre d'hypothèses et de simplifications qui rendent une vérification expérimentale indispensable. Les hypothèses qui risquent de rendre le modèle inopérant en pratique sont les suivantes :

- Paroi parfaitement plane : la présence de rugosités à la paroi agit sur l'angle de contact en induisant une hystérésis. Elle pourrait aussi avoir une influence significative sur le transfert de masse et de chaleur. Rappelons que les surfaces courantes ont rarement une rugosité moyenne inférieure à quelques μm , et que les transferts de masse et de chaleur sont significatifs à des échelles 10 à 100 fois plus petites.
- Fluide pur : nous n'avons pas tenu compte de la présence éventuelle d'impuretés dans le fluide. Or, s'il s'agit de surfactants comme c'est souvent le cas pour de l'eau, celles-ci se concentrent à la ligne de contact. La présence de molécules étrangères à la surface est connue pour modifier de façon très

importante la tension de surface et pour augmenter la résistance d'interface [51, 26].

- Résistance d'interface : le modèle de résistance d'interface n'est pas encore parfaitement validé à ce jour et une incertitude subsiste sur la valeur du coefficient d'évaporation. On montrera que celui-ci peut avoir un effet mesurable si les mesures sont conduites avec suffisamment de précision.
- Comportement général de la ligne de contact : l'expérience quotidienne montre que l'eau ne se comporte certainement pas comme un fluide parfaitement mouillant sur la plupart des métaux. On ne s'attend pas non plus à obtenir un angle de contact statique fixé mais plutôt une hystérésis assez importante de l'angle de contact. Au-delà, il est difficile de prédire le comportement de l'angle de contact. L'expérience fournira des informations sur l'influence de la rugosité, de l'état de surface chimique et éventuellement de la température sur l'angle de contact.

Dans cette expérience, on ne cherchera pas à vérifier le modèle dynamique mais uniquement le modèle statique. Nous verrons que les problèmes techniques liés à des mesures sur des lignes de contact statiques sont très nombreux. Dans un premier temps une mesure sur cette configuration apporterait de précieuses informations.

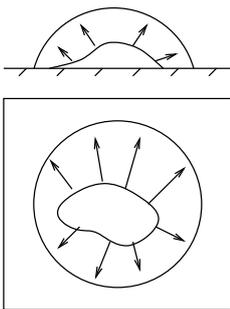
Les grandeurs physiques à mesurer

Nous avons vu dans la première partie que les grandeurs physiques qui interviennent dans le modèle sont :

- l'angle de contact macroscopique,
- la température de la paroi,
- le flux de chaleur et le flux de masse,
- les propriétés physiques des parois et du fluide,
- la longueur des lignes de contact et la géométrie des interfaces en général.

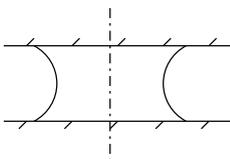
La nécessité de connaître ces grandeurs impose certaines contraintes sur la configuration choisie...

Une symétrie de révolution



Le flux de chaleur dépend entre autres de l'angle de contact et de la longueur des lignes de contact. Pour simplifier les mesures, il est commode d'assurer un angle de contact constant sur l'ensemble des lignes de contact et une géométrie des lignes de contact connue *a priori*. Ceci est obtenu plus facilement si la géométrie des interfaces est de révolution (une goutte par exemple). Par croissance ou décroissance du volume de la goutte, on amène l'angle de contact à sa valeur d'avancée ou de recul. Si ces valeurs sont stables et reproductibles, la ligne de contact a alors une géométrie parfaitement circulaire.

Une goutte entre deux pièces métalliques



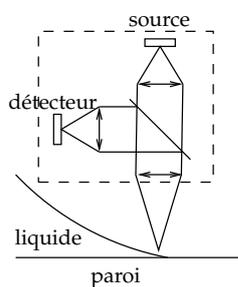
Le but de cette expérience est de caractériser le transfert de masse singulier. Or une goutte posée sur une plaque métallique offre une grande surface d'interface en comparaison de la longueur des lignes de contact. Pour augmenter la contribution relative des lignes de contact dans le transfert de masse total, il suffit de placer la goutte entre deux pièces métalliques chauffées. On diminue ainsi considérablement la surface d'interface et on double la longueur des lignes de contact.

Deux pièces coniques

Si la goutte est placée entre deux plaques planes, sa position n'est pas fixée et la mesure de l'angle de contact est rendue difficile par l'angle d'ouverture nul entre les plaques. C'est pourquoi il est judicieux d'utiliser deux pièces coniques pour le support de la goutte. La goutte sera alors centrée sur l'axe des cônes sous l'effet de la tension de surface et la mesure de l'angle de contact est grandement facilitée par la légère courbure de la surface métallique (voir plus loin, le paragraphe consacré à la mesure de l'angle de contact).

5.1.2 Méthode de mesure des différentes grandeurs

Mesure de l'angle de contact

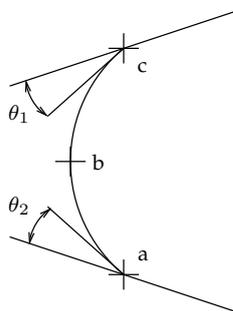


Il existe plusieurs méthodes pour mesurer l'angle de contact. Une méthode très précise consiste à utiliser un scanner optique qui mesure le profil de l'interface dans la direction normale. Ce principe est cependant relativement lent et encombrant (bien qu'il existe des systèmes conçus pour de grandes vitesses). Il n'est pas facile à mettre en œuvre si l'on cherche en même temps à limiter les pertes de chaleur et à assurer une saturation complète de l'atmosphère. Il n'est enfin pas adapté à la mesure de grands angles de contact.

Une autre méthode plus facile à mettre en œuvre expérimentalement et bien moins coûteuse consiste à observer le profil du ménisque de liquide par le côté à l'aide d'une caméra et d'un objectif agrandisseur. Il suffit de ménager une petite fenêtre pour permettre l'observation, ce qui facilite grandement le contrôle thermique de l'expérience. C'est la solution que nous retiendrons, au moins pour la première réalisation de l'expérience.

Ce choix a une conséquence importante sur le choix de la configuration : il empêcherait l'utilisation d'une ligne de contact rectiligne par exemple. Le choix d'utiliser deux pièces coniques se révèle au contraire très bien adapté à ce type de mesure.

Reste à résoudre le problème de la nature réfléchissante des surfaces. En incidence rasante, les surfaces métalliques et les interfaces liquide-vapeur se comportent comme des miroirs, même lorsque le métal n'est pas spécialement poli. Nous avons calculé à l'aide d'un logiciel de lancer de rayons l'image obtenue en observant de profil une goutte d'eau placée entre deux cônes métalliques (figure 5.1). L'éclairage en lumière parallèle ne permet pas de distinguer facilement la position de la ligne de contact. L'utilisation d'un disque lumineux de grand diamètre peut conduire à mal estimer la position de la ligne de contact et l'angle de contact car l'image du disque se réfléchit sur la surface métallique et l'interface et la frontière ombre-lumière ne correspond pas aux interfaces mais à l'image du bord du disque. La meilleure solution consiste à utiliser une étroite bande verticale, qui permet de limiter les réflexions parasites sur les interfaces tout en conservant la réflexion sur le métal. On localise ainsi au mieux la position de la ligne de contact.



Une fois une bonne image obtenue, il reste à évaluer l'angle de contact. Ceci peut être réalisé si on connaît *a priori* la forme de l'interface (soit un arc de cercle, soit une forme plus complexe si la gravité déforme l'interface). Il suffit alors de repérer la position des deux lignes de contact et celle du point médian pour en déduire les angles de contact (voir figure ci-contre).

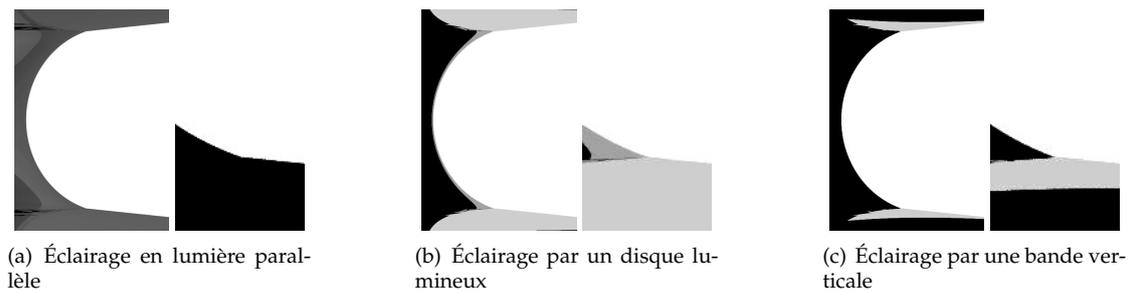


Figure 5.1 – Simulation de l’observation d’un profil de goutte entre deux cônes avec différents éclairages. La profondeur de champ du système optique n’est pas prise en compte.

Température de la paroi

D’après le modèle, le flux de masse et de chaleur dépend linéairement de la température caractéristique de la paroi, définie comme étant la température à une distance macroscopique fixée s_{ext} de la ligne de contact. En pratique, un capteur de température mesure une température moyenne sur le volume qu’il occupe et perturbe localement le champ de température. C’est pourquoi on n’envisage pas de placer le capteur près des lignes de contact, là où le gradient de température est le plus grand. Pour obtenir la meilleure précision possible, il faut au contraire placer le capteur loin des lignes de contact, en un point où le gradient de température est le plus faible et choisir un capteur le plus petit possible pour ne pas perturber le champ de température et minimiser le volume sur lequel on moyenne la température.

Le dilemme est le suivant : les capteurs réputés pour avoir la meilleure précision sont les sondes au platine et sont relativement encombrants. Les capteurs que l’on arrive le plus facilement à miniaturiser sont les thermocouples, mais les précisions de mesure standard sont bien plus faibles. La précision d’un appareil de mesure standard à thermocouple est de 1 K, et on arrive à trouver des systèmes allant jusqu’à 0.1 K en prenant quelques précautions. Avec le même effort, on obtient une précision 10 fois meilleure avec une sonde au platine. Le point commun de ces capteurs est la présence de fils électriques qui conduisent non seulement le courant mais aussi la chaleur. Pour minimiser les erreurs de mesures et les perturbations, il faut placer les fils parallèlement aux isothermes et utiliser des fils très fins qui conduisent peu la chaleur.

Des expériences préliminaires montrent qu’il est difficile de surchauffer l’eau de plus de 4 K tout en conservant une goutte stable. Ainsi, la plage de mesure de température se situe entre 100 et 104°C pour de l’eau à pression atmosphérique. Pour atteindre une précision relative de $\pm 1\%$ à 104°C, la température doit être connue à $\pm 0.04^\circ\text{C}$. Un autre paramètre important est la température de saturation du liquide. Le modèle prédit que le flux de masse et le flux de chaleur sont proportionnels à $T - T_{sat}$. Or, la température de saturation de l’eau est très sensible à la pression atmosphérique. Celle-ci varie habituellement entre 980 et 1030 hPa, produisant des variations de la température de saturation de plus de 1 K. On se propose de mesurer directement la température de saturation en même temps que les autres températures de l’expérience. Les thermocouples permettent naturellement une mesure différentielle de température. Il nous suffit de placer la «soudure froide» à la température de référence pour obtenir la différence de température entre la sonde et cette référence (voir le schéma de principe en annexe, figure E.2). Malgré tout, l’obtention d’une précision inférieure à ± 0.1 K avec des thermocouples pose de sérieuses difficultés. La plus importante est le très faible niveau des signaux électriques produits par un thermocouple, de l’ordre

de $40 \mu\text{V}/\text{K}$. Nous ferons part de l'expérience acquise dans ce domaine à l'occasion des essais préliminaires de CESSIL dans l'annexe E.

Flux de chaleur

Le flux de chaleur peut être mesuré indépendamment de deux façons différentes. La première méthode consiste à mesurer la puissance électrique fournie pour maintenir la température des pièces métalliques. Cette méthode est relativement facile à mettre en œuvre mais elle risque d'être imprécise à cause des pertes de chaleur du système. Un flux de chaleur non négligeable passe en effet probablement par les supports de fixation du système et par les différents câbles électriques (thermocouples et câbles d'alimentation électrique). Une évaluation de ces pertes est donc indispensable (il suffit de mesurer la puissance électrique nécessaire au maintien de la température alors que le système fonctionne à vide).

La deuxième approche permet de mesurer directement le transfert de masse aux interfaces : il suffit pour cela d'alimenter la goutte de liquide continuellement avec un débit tel que son volume soit stable. Dans ce cas, le débit de liquide est égal au débit de liquide qui s'évapore. Cette méthode risque d'être compliquée à mettre en œuvre car il faut asservir le débit de liquide à une mesure optique de la position des interfaces. De plus, il faut être en mesure de connaître précisément le débit de liquide injecté (le dispositif de régulation du débit doit être calibré).

Ces deux approches ont un inconvénient commun : le temps de réponse entre les variations du flux de chaleur à l'interface et la mesure de température est assez long. Il faut en effet asservir la puissance électrique de chauffage pour maintenir la température à une valeur de référence et le débit de liquide injecté pour maintenir le volume de la goutte et l'angle de contact.

Dans le premier cas, le temps de réponse est fourni par le temps de propagation de la chaleur entre l'interface et le thermocouple et entre le thermocouple et la résistance de chauffage. En tenant compte uniquement de la diffusivité du métal et en supposant que la distance entre les lignes de contact et le thermocouple est de 2 cm, on obtient un ordre de grandeur de 3 s pour du cuivre et de plus d'une minute pour de l'acier inoxydable ($k_s = 15 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$). La régulation de la puissance nécessaire à l'obtention d'un régime permanent doit donc avoir une constante de temps du même ordre de grandeur, et on obtient un ordre de grandeur de la durée de chaque mesure, qui est de plusieurs fois cette constante de temps.

Avec une mesure de débit, le même problème se pose : la régulation de la température ne peut être plus rapide que les durées mentionnées ci-dessus. S'ajoute à cette durée le temps nécessaire à la régulation précise du débit. Calculons la vitesse de déplacement des interfaces si le débit de liquide est nul. Pour de l'eau à pression atmosphérique sur du cuivre, à une température de surchauffe de 1 K et pour un angle de contact de 20° , le modèle prévoit un flux de chaleur intégré de 14 W par mètre de ligne de contact jusqu'à 1 mm de la ligne de contact. Dans l'hypothèse d'une goutte d'eau de 1 cm de diamètre et de 1 mm de hauteur en moyenne, le flux de chaleur pour les deux lignes de contact représente un peu moins de 1 W, ce qui correspond à un débit de liquide de $0.4 \mu\text{l s}^{-1}$. On en déduit que le rayon de la goutte diminue à une vitesse de $15 \mu\text{m s}^{-1}$. Supposons que le système de mesure optique de l'angle de contact fournisse la position de l'interface à $\pm 5 \mu\text{m}$. Le déplacement d du ménisque pendant une durée t est de $d = 15 t \mu\text{m}$, et l'incertitude sur le déplacement est de $\pm 10 \mu\text{m}$ (c'est une différence entre deux mesures). L'incertitude sur le volume de liquide évaporé diminue avec la durée de la mesure, elle atteint $\pm 1\%$ pour une durée de une minute environ. Pour diminuer cette durée, on peut soit augmenter le flux de chaleur (c'est-à-dire augmenter la température de surchauffe), soit diminuer la hauteur

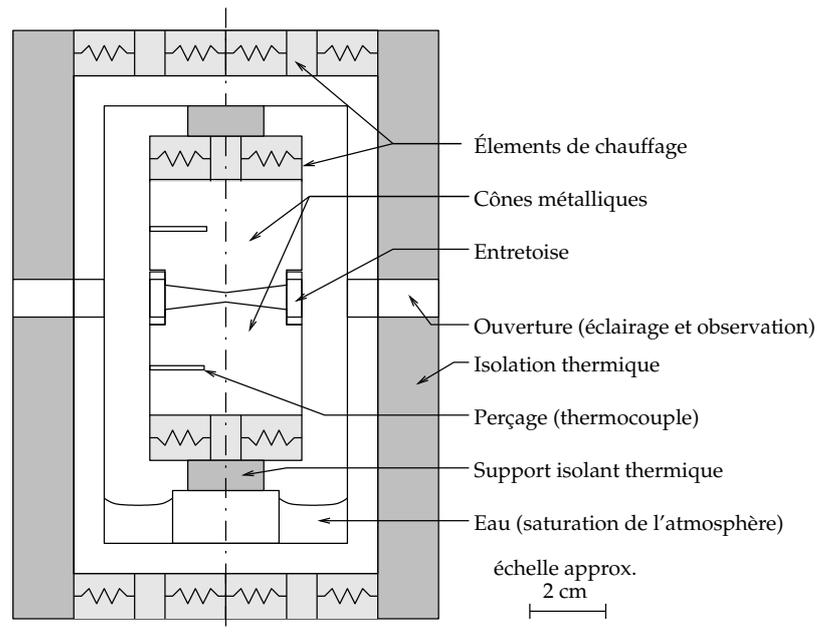


Figure 5.2 – Schéma de principe de l'expérience CESSIL.

de la goutte, soit améliorer la mesure optique de la position. En tous cas, la mesure précise du débit de liquide évaporé prend un temps relativement long de l'ordre de la minute.

5.1.3 Schéma de principe

À ce stade, la configuration du système est dictée par les contraintes suivantes :

- la goutte d'eau est placée entre deux pièces métalliques coniques chauffées,
- la température de ces pièces métalliques est mesurée en un point de référence connu et assez éloigné des lignes de contact,
- le système est placé dans une atmosphère de vapeur saturée,
- les pertes de chaleur sont réduites au minimum et quantifiables avec la précision demandée pour le flux de chaleur aux interfaces,
- la goutte d'eau doit pouvoir être alimentée en continu avec un débit connu.

La configuration proposée est représentée sur la figure 5.2. Elle se compose d'une coque extérieure destinée à maintenir la saturation de l'atmosphère autour de la goutte et à prévenir les pertes de chaleur. La température de la coque est régulée à une valeur proche de la température de saturation. Les pertes de chaleur entre les cônes métalliques et la coque sont donc proportionnelles à la différence de température entre ces deux pièces, tout comme le flux de chaleur aux lignes de contact. Ainsi, les pertes de chaleur représentent une fraction du flux de chaleur total indépendante de la température de surchauffe. Une façon simple d'obtenir cette régulation en même temps que la saturation de l'atmosphère consiste à ménager une cavité remplie d'eau au fond de la coque. La coque est chauffée à flux constant de façon à obtenir un faible débit de vapeur. Ce principe a été testé sur une géométrie plus petite et fonctionne bien à condition que la coque soit bien isolée thermiquement de l'extérieur et que le chauffage soit bien réparti de sorte qu'il n'y ait pas de point froid où la vapeur se condense.

Il reste une inconnue majeure dans ce schéma : comment injecter le liquide entre les cônes ? Nous avons envisagé de ménager un perçage au centre de l'un

des deux cônes et d'amener le liquide au centre au moyen d'un tube capillaire. Ce système s'avère extrêmement difficile à mettre au point. En effet, les deux cônes métalliques sont surchauffés par rapport à la température de saturation. Or, la moindre aspérité au contact avec le liquide a toutes les chances de piéger une bulle d'air ou de vapeur et de constituer ainsi un site de nucléation activé. Nos tentatives de raccorder proprement l'extrémité d'une aiguille à une plaque de cuivre ont pour l'instant échoué : le raccord ne peut être rendu propre, en partie sans doute en raison de la différence de dureté des deux métaux qui rend le polissage difficile (voir photo 5.13(f)). La seule alternative à l'injection à travers les cônes consiste à injecter le liquide par le côté. Cela signifie que l'on perce le ménisque de liquide en un point, ce qui risque de briser sa symétrie. Pour obtenir une perturbation minimale, le capillaire doit être le plus fin possible (l'extrémité d'une fibre de verre creuse pourrait convenir) et présente idéalement un angle de contact de 90° . Le verre n'est donc pas un bon candidat, à moins d'être rendu légèrement hydrophobe, mais dans ce cas le dépôt utilisé risque de se dissoudre à haute température et de faire perdre à l'eau sa pureté. Ce problème est pour l'instant le plus difficile à résoudre dans la configuration envisagée.

5.1.4 Calculs préliminaires et dimensionnement

Nous avons décrit un peu plus haut différentes méthodes de mesure des grandeurs qui interviennent dans le modèle : l'angle de contact, la température de la paroi, le flux de chaleur et le transfert de masse. Nous savons en particulier que la mesure de température aura lieu en un point assez éloigné de la paroi. Avec le premier schéma de l'expérience, nous sommes en mesure de simuler celle-ci et de prévoir la relation qui existe entre les grandeurs mesurées (température, flux de chaleur et angle de contact) et les grandeurs qui interviennent dans le modèle (notamment l'angle de contact microscopique et le coefficient d'accommodation). On cherche en particulier à déterminer la sensibilité des mesures aux différents paramètres et les sources d'erreurs de mesure.

Nous avons pour cela réalisé des simulations du transfert de chaleur stationnaire dans les cônes et le liquide. Le calcul est réalisé en géométrie axisymétrique sur un seul cône en supposant que le champ de température est symétrique dans les deux cônes.

Discussion sur les matériaux

Le choix des matériaux constitutifs des deux cônes métalliques est important. En pratique, il est intéressant d'explorer la gamme la plus étendue de conductivités thermiques. Le métal le plus conducteur que l'on puisse facilement obtenir est le cuivre (conductivité thermique de $390 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$). Il est facile à usiner car particulièrement mou, mais cela rend son polissage un peu délicat et il s'oxyde très rapidement. De plus, le perçage des trous pour les thermocouples s'annonce difficile. Heureusement, comme ce métal est un très bon conducteur de la chaleur, la température est relativement uniforme et on peut se contenter de perçages de plus grand diamètre.

À l'autre extrémité de la gamme de conductivité, l'acier inoxydable courant a une conductivité très faible de l'ordre de $15 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Beaucoup plus dur que le cuivre, nous n'avons pas encore tenté de le polir. Les gradients de température étant plus grands pour le même flux de chaleur, la position précise de la mesure de température et le diamètre des perçages sont des paramètres importants. Ce matériau est intéressant pour les applications industrielles en général et pour le domaine nucléaire en particulier : ses propriétés physiques sont assez proches de celles du Zircaloy, alliage à base de zirconium utilisé pour fabriquer les gaines de

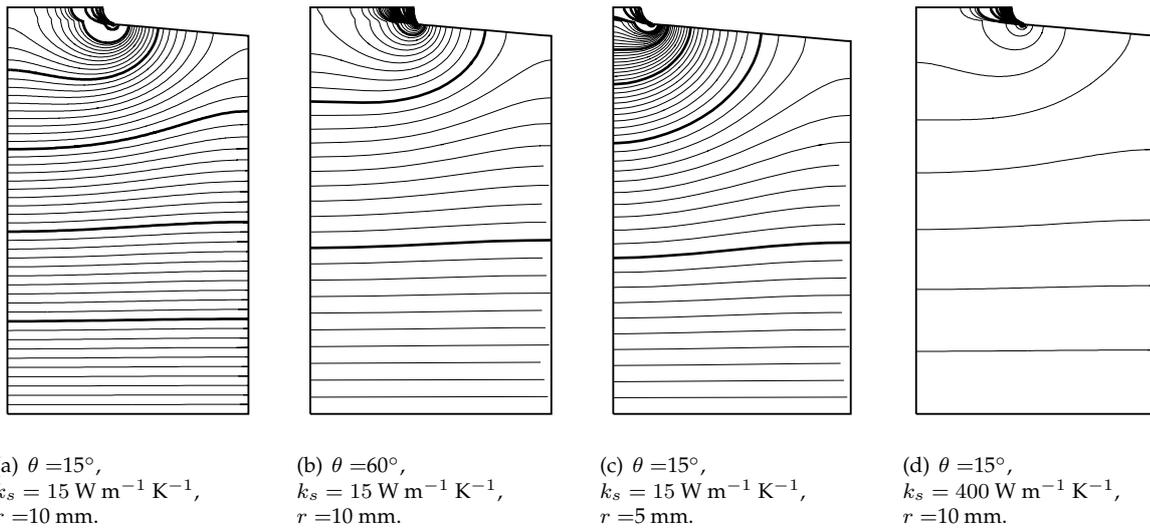
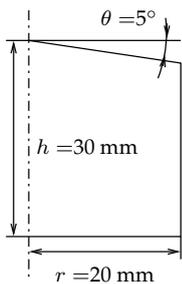


Figure 5.3 – Calcul du champ de température dans une pièce conique. On suppose que le flux de chaleur est nul sur le bord droit et la partie du bord supérieur en contact avec la vapeur. La température est imposée sur le bord bas. Le bord gauche est l'axe de symétrie de révolution et le bord haut du liquide un plan de symétrie. On étudie l'effet de la conductivité thermique du métal, de l'angle de contact et de la position de la ligne de contact sur le cône. Les isothermes sont tracées à des intervalles de 0.1 (traits épais) et 0.01 (traits fins). La température adimensionnelle est égale à 0 à la surface du liquide (température de saturation) et à 1 en bas de la pièce métallique.

combustible nucléaire.

L'acier courant est un matériau de conductivité thermique intermédiaire (soit $40 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$). Malheureusement il s'oxyde rapidement et de façon irrégulière (en un mot, il rouille), ce qui le rend difficile à utiliser. De plus, son étude semble peu intéressante (peu de procédés industriels utilisent des corps de chauffe en acier).

Étude du champ de température dans les pièces métalliques



Le calcul numérique fournit une première information très importante : la répartition du flux de chaleur et le champ de température dans les pièces métalliques. Cette information est importante pour déterminer la position optimale des thermocouples.

La figure 5.3 représente le champ de température adimensionnel pour différentes positions de la ligne de contact et pour deux matériaux différents (le cuivre et l'acier inoxydable), pour deux angles de contact différents et pour deux rayons différents de la goutte de liquide. La géométrie retenue pour les pièces métalliques est représentée ci-contre.

La position optimale du thermocouple dépend évidemment du champ de température : il faut placer le thermocouple en un point où le gradient de température est le plus faible, et si possible aligner le perçage sur les isothermes. Les figures montrent que le gradient de température dans le bloc métallique est le plus fort pour de l'acier inoxydable avec un angle de contact petit et une goutte de grand diamètre (le flux de chaleur est alors le plus élevé pour la conductivité du métal la plus faible). On voit qu'à une distance inférieure à la moitié du rayon du cône métallique, les isothermes sont très incurvées et se resserrent. L'endroit idéal pour placer un thermocouple est donc situé à une distance supérieure à un demi-rayon de la pièce métallique. L'observation plus précise des isothermes

montre que la température adimensionnelle décroît de 1 à 0.8 environ (soit 20%) sur une distance de 15 mm près du bord inférieur (figure 5.3(a)). La température adimensionnelle varie donc de 1.3% par millimètre. Ce chiffre permet d'évaluer la précision requise sur la position du thermocouple et son diamètre maximal. Si on vise une mesure de la température adimensionnelle à $\pm 1\%$, il faut placer le thermocouple avec une précision de ± 0.4 mm et le perçage doit avoir un diamètre maximal de 0.8 mm. Ce problème est beaucoup moins important dans le cuivre, où la température ne varie que de 0.2% par millimètre.

Sensibilité aux différents paramètres

Nous avons caractérisé la sensibilité de la mesure à la position verticale et au diamètre du thermocouple. Les autres paramètres importants qui influencent le modèle et la mesure sont les suivants :

- le coefficient d'accommodation,
- la conductivité thermique du métal,
- l'angle de contact microscopique,
- le rayon de la goutte,
- la température de surchauffe de la paroi.

D'après le modèle de ligne de contact, le flux de chaleur est pratiquement proportionnel à la température de surchauffe de la paroi. Si l'angle de contact microscopique est supérieur à une dizaine de degrés environ, les variations de l'angle de contact avec la température sont très faibles. On peut donc définir un coefficient d'échange entre la paroi et la goutte de liquide de la façon suivante. On pose

$$H \doteq \frac{Q}{T_c} \quad (5.1)$$

où Q est la puissance thermique totale apportée à la goutte par l'un des deux cônes et T_c la température de surchauffe du cône mesurée par le thermocouple au point de référence choisi (comme nous n'avons pas encore précisé la position de ce point, on définit pour l'instant T_c comme la valeur de la surchauffe imposée au bord inférieur de la pièce métallique). La surchauffe est définie par rapport à la température de saturation correspondant à la pression de la vapeur autour de la goutte. La figure 5.4 représente la valeur du coefficient d'échange H en fonction des différents paramètres ainsi que la variation relative de H par rapport à ces paramètres. On remarque immédiatement que le coefficient d'échange est très sensible à certains paramètres et peu à d'autres. D'autre part, la sensibilité à certains paramètres dépend parfois fortement de l'angle de contact ou de la conductivité thermique de la paroi.

Le graphique de la colonne de droite représente la sensibilité du coefficient d'échange au paramètre étudié. Par exemple, une sensibilité de 1 signifie que le coefficient d'échange est proportionnel à ce paramètre, un coefficient de -1 qu'il lui est inversement proportionnel et un coefficient de 0.5 qu'il est proportionnel à la racine carrée du paramètre. On en déduit l'influence de la précision de mesure de ce paramètre sur la précision de validation du modèle. Par exemple, pour un angle de contact de 7.5° sur de l'inox, la sensibilité de H à k_s est égale à 0.8. Donc, si la conductivité thermique de l'inox est connue à $\pm 1\%$ près, l'incertitude sur le coefficient d'échange H est de $\pm 0.8\%$. Il est donc nécessaire de connaître k_s avec précision. Au contraire, sur du cuivre, la sensibilité n'est plus que de 0.15. La conductivité thermique n'a donc pas besoin d'être connue avec une précision aussi grande que celle de l'inox. D'autre part, lorsque l'angle de contact est grand, la conductivité thermique du métal a moins d'importance (dans ce cas, le flux de chaleur est essentiellement limité par la conductivité thermique du liquide).

Le coefficient d'accommodation a une influence relativement faible sur le coefficient d'échange. D'autre part, son influence est jusqu'à trois fois plus impor-

tante sur le cuivre que sur l'acier. Il n'est donc pas impossible que l'on puisse déterminer indirectement la valeur du coefficient d'accommodation par cette expérience. On devrait au moins pouvoir déterminer en utilisant le cuivre si sa valeur est plutôt proche de 10^{-2} ou plutôt proche de 1.

Le rayon de la goutte a clairement l'influence la plus marquée sur le coefficient d'échange. Ceci pose un problème de mesure car ce rayon agit au travers de la longueur des lignes de contact : c'est cette longueur qu'il faut être en mesure de déterminer précisément. Or, si la symétrie de révolution de la goutte n'est pas assurée, la détermination du périmètre devient très difficile. Il est donc capital de maîtriser la géométrie des gouttes de liquide.

La température de la paroi influence un peu le coefficient d'échange aux petits angles de contact. Cet effet est purement géométrique : pour les petits angles de contact, le modèle prévoit une forte dépendance de l'angle de contact macroscopique avec la température de la paroi. Cet angle influence à son tour le flux de chaleur. L'expérience permettra de déterminer indirectement cette influence : il ne devrait pas être possible d'observer des angles de contact inférieurs à 7° environ si le métal est surchauffé de plus de 1 K à l'échelle de la micro-couche. Ceci est vérifiable sur le cuivre plus facilement que sur l'inox.

Enfin, l'angle de contact microscopique a relativement peu d'influence sur le coefficient d'échange si la conductivité thermique du métal est faible (inox) ou si l'angle est petit. Cela s'explique par la combinaison de deux effets contraires : pour une faible conductivité du métal, une diminution de l'angle de contact devrait augmenter le coefficient d'échange car l'épaisseur de liquide diminue. En revanche, comme le flux de chaleur à grande échelle augmente, la température de la paroi diminue plus rapidement (le coefficient λ augmente), et la contribution des petites échelles diminue. La mesure précise de l'angle de contact est donc très importante pour le cuivre et l'est beaucoup moins pour l'inox.

Calcul de l'incertitude sur le coefficient d'échange mesuré

À la différence des calculs précédents, l'angle de contact mesuré n'est pas l'angle de contact microscopique mais l'angle de contact macroscopique à la sortie de la micro-région. Pour un angle de contact macroscopique fixé, le coefficient H est indépendant de la température de surchauffe de la paroi. C'est pourquoi nous ne ferons pas figurer dans cette formule l'influence de la température sur le coefficient d'échange. Le flux de chaleur est le produit du coefficient d'échange par la température de surchauffe de la paroi. On peut donc relier l'incertitude sur le flux de chaleur à l'incertitude sur la mesure de température et aux incertitudes cumulées des différents paramètres qui interviennent dans le calcul du coefficient d'échange et que l'on a étudié précédemment.

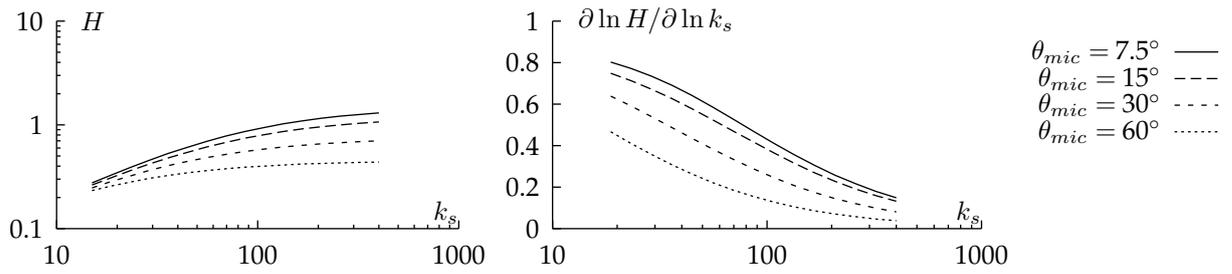
On peut résumer le calcul ainsi :

$$\begin{aligned} d \ln Q &= d \ln T_c + d \ln H \\ &= d \ln T_c + \epsilon_{k_s} d \ln k_s + \epsilon_f d \ln f + \epsilon_r d \ln r + \epsilon_{\theta_{macro}} d \ln \theta_{macro} \end{aligned} \quad (5.2)$$

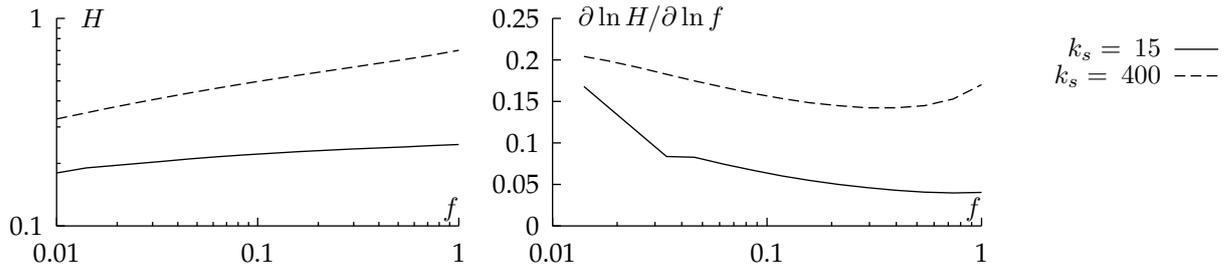
Les coefficients ϵ sont égaux aux sensibilités définies dans le paragraphe précédent. Ils dépendent essentiellement de la conductivité de la paroi et de l'angle de contact. Par exemple, pour du cuivre et un angle de contact de 60° , la variation relative du flux de chaleur total s'écrit :

$$d \ln Q = d \ln T_c + 0.05 d \ln k_s + 0.2 d \ln f + d \ln r + 0.75 d \ln \theta \quad (5.3)$$

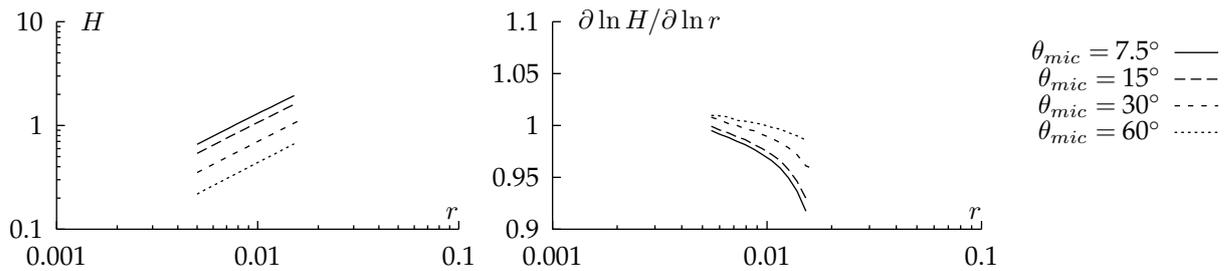
Les valeurs numériques sont lues sur la figure 5.4. Cette formule peut être utilisée pour déterminer l'un des paramètres en fonction des autres. Par exemple,



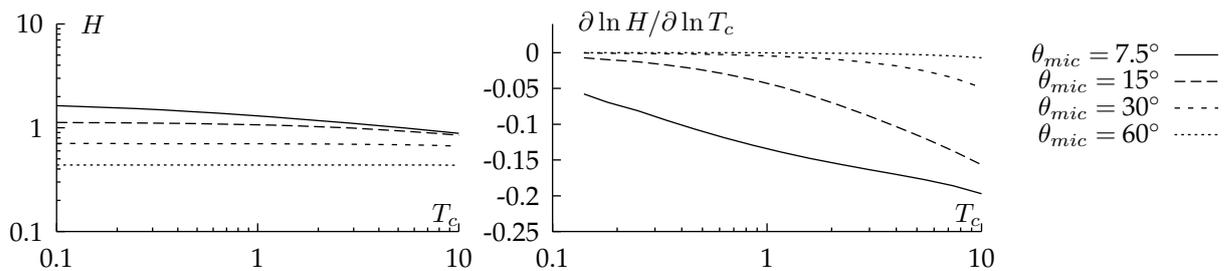
(a) Sensibilité à la conductivité thermique de la paroi k_s (échelle en $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$).



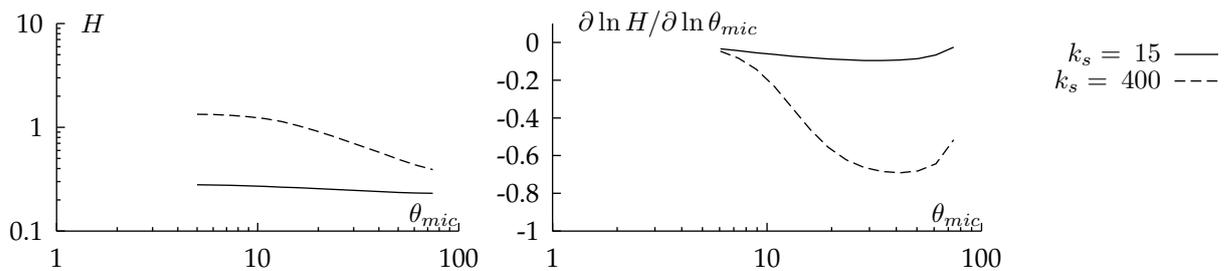
(b) Sensibilité au coefficient d'accommodation f (sans unité), calculé pour $\theta_{mic} = 30^\circ$.



(c) Sensibilité au rayon r de la goutte (échelle en m), calculé pour $k_s = 400 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$.



(d) Sensibilité à la température T_c (surchauffe de la paroi imposée au bord inférieur, exprimée en K), calculé pour $k_s = 400 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$.



(e) Sensibilité à l'angle de contact microscopique θ_{mic} (exprimé en degrés).

Figure 5.4 – Sensibilité du coefficient d'échange global H aux différents paramètres du modèle et de l'expérience. Le coefficient H est exprimé en W K^{-1} . Quand ce n'est pas précisé, le rayon de la goutte est de 10 mm et le coefficient d'accommodation égal à 1.

en supposant que le modèle est correct, on peut déterminer la valeur du coefficient d'accommodation à partir des résultats expérimentaux. L'incertitude sur le coefficient obtenu s'écrit :

$$d \ln f = \frac{1}{0.2} (d \ln Q + d \ln T_c + 0.05 d \ln k_s + d \ln r + 0.75 d \ln \theta) \quad (5.4)$$

En supposant que l'on connaisse avec une précision de $\pm 1\%$ le flux de chaleur mesuré Q , la température de surchauffe T_c , l'angle de contact θ , le rayon r et avec une précision de $\pm 5\%$ la conductivité thermique du cuivre, on peut alors déterminer avec une précision de $\pm 20\%$ la valeur du coefficient d'accommodation. Obtenir une telle précision sur ce paramètre permettrait de lever le doute sur la question du coefficient d'évaporation de l'eau. Malheureusement des mesures aussi précises sont peut-être hors de portée. En effet, à l'exception de la conductivité thermique du cuivre, toutes les autres mesures (angle de contact, température, flux de chaleur ou débit, périmètre de la goutte) devront être réalisées très minutieusement pour arriver à un tel résultat, et chacune pose des problèmes particuliers que nous avons déjà soulevés.

Nous n'avons pas encore mentionné l'influence de la conductivité thermique du liquide : le coefficient ϵ associé à ce paramètre est proche de l'unité, mais la conductivité thermique des fluides purs est une donnée souvent disponible avec une très bonne précision. Par ailleurs, nous n'avons pas étudié l'influence de la géométrie des pièces métalliques sur le résultat : pour l'inox, il est important de connaître précisément la position du thermocouple et les cotes des pièces. Pour le cuivre au contraire, ces données sont de moindre importance.

Conclusion sur le concept CESSIL

Cette étude préliminaire permet de mettre en évidence certaines contraintes sur l'expérience à réaliser pour valider le modèle de ligne de contact. Elle démontre qu'il est impératif de maîtriser les éléments suivants :

- la surchauffe de la paroi (différence entre la température de la paroi et la température de saturation),
- la puissance thermique fournie à la paroi ou le débit d'évaporation (l'acquisition simultanée des deux grandeurs permet évidemment de vérifier la cohérence des mesures),
- la longueur des lignes de contact,
- l'angle de contact,
- la conductivité thermique du métal et du liquide ainsi que la géométrie.

Nous savons donc que les techniques courantes de mesure de température, et de débit ne seront pas utilisables ou devront être poussées à leurs limites.

Par ailleurs, des difficultés techniques vont sans doute apparaître. Il faut en particulier résoudre les problèmes suivants :

- Comment obtenir une goutte stable de liquide surchauffé et éviter la nucléation à l'intérieur de ce volume ?
- Comment assurer une valeur constante et reproductible de l'angle de contact ? Cette question est sans doute intimement liée à l'état de surface des parois.
- Comment injecter le liquide sans perturber la forme des interfaces et le champ de température ?
- Comment assurer la parfaite saturation de l'atmosphère en vapeur d'eau et limiter les pertes de chaleur des pièces métalliques ?

C'est pour tenter de répondre à ces questions que nous avons commencé par réaliser quelques expériences préliminaires avant d'entamer la conception de l'expérience CESSIL proprement dite.

5.2 Résultats expérimentaux

Nous avons commencé à mettre en œuvre le concept présenté dans la partie précédente. Cette expérience comporte un grand nombre de points à vérifier et la phase de mise au point n'est pas terminée à l'heure où nous rédigeons ces lignes. Néanmoins, de petites expériences préliminaires ont été conduites pour vérifier différents aspects de l'expérience et du modèle. On présente ici certains résultats intéressants...

5.2.1 Mouillage d'une plaque chauffée : un effet inattendu

L'expérience repose sur l'existence d'une goutte stable de liquide surchauffé sur une plaque métallique. Or un liquide surchauffé est instable par nature. Le premier problème consiste donc à déterminer la surchauffe admissible d'une goutte sur une paroi métallique. Pour cela, nous utilisons une plaque métallique préparée (de sorte que l'état de surface soit connu et reproductible) et chauffée, sur laquelle on tente de poser une goutte d'eau. Le simple fait de poser la goutte a conduit à des observations surprenantes...

Les faits

Le phénomène observé est le suivant : considérons une plaque d'acier ou de cuivre, polie et chauffée à une température supérieure à 60 °C environ. L'expérience est réalisée à pression atmosphérique, à l'air libre. Si l'on apporte lentement sur cette plaque une goutte d'eau par un capillaire métallique en contact électrique avec la plaque chauffée, la goutte ne mouille pas la plaque. Elle se pose sur celle-ci en formant un angle de contact apparent de 180 degrés et peut être retirée de la plaque sans qu'aucune trace ne subsiste sur la plaque (voir figure 5.5). Une goutte posée sur la plaque peut y rester stable pendant une très longue durée (nous avons pu observer des gouttes stables pendant plus de vingt minutes). Si le contact électrique entre la plaque et le capillaire est rompu, la goutte d'eau mouille immédiatement la plaque avec un angle de contact souvent inférieur à 90 degrés. Le mouillage est irréversible et en éloignant le capillaire, la plus grande partie du volume de la goutte reste accrochée à la plaque.

Nous avons répertorié plusieurs façons de provoquer le mouillage irréversible de la plaque :

- la rupture du contact électrique entre la plaque et le capillaire,
- une température de plaque inférieure à une température critique comprise entre 50 et 60 °C suivant la nature du substrat et les conditions expérimentales,
- l'application entre la plaque et le capillaire d'une différence de potentiel suffisamment grande, de l'ordre de quelques volts,
- l'augmentation de la pression de la goutte sur la plaque,
- un état de surface dégradé de la plaque (présence d'oxydation ou forte rugosité),
- une vitesse d'approche trop grande de la goutte (supérieure à une fraction de millimètre par seconde) ou des vibrations sensibles,
- le fait de porter le capillaire métallique à une température supérieure à celle de la plaque.

Le phénomène a aussi été observé d'une façon un peu différente, en établissant le contact entre la goutte et la plaque par un brin de cuivre d'une fraction de millimètre (voir photographie de la figure 5.5(c)).

On a aussi pu observer un phénomène similaire mais très bref sur de l'aluminium poli. Dans les mêmes conditions que celles permettant d'observer une

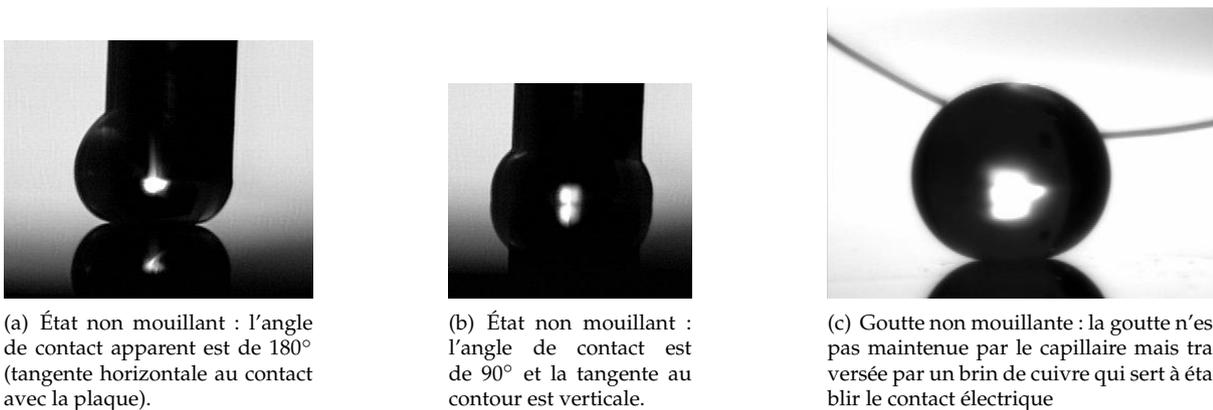


Figure 5.5 – Images vidéo de la goutte d'eau dans l'état non mouillant et mouillant. On distingue l'image en miroir de la goutte sur la plaque métallique.

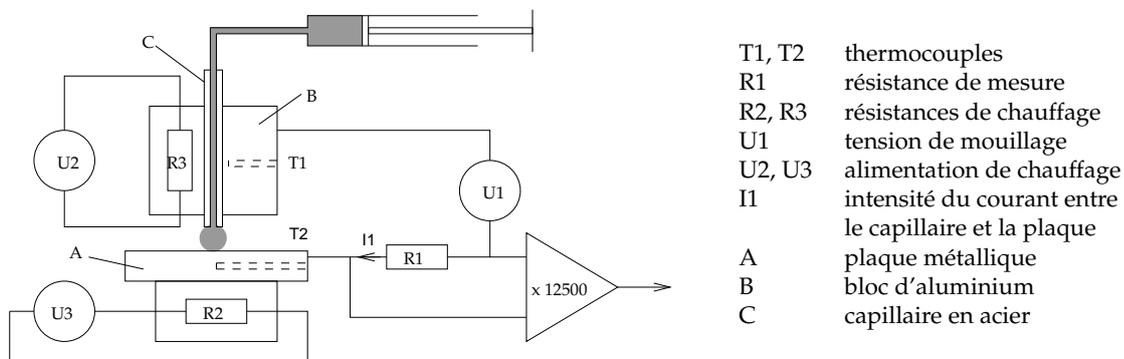


Figure 5.6 – Principe du montage expérimental destiné à mesurer la tension limite de mouillage.

goutte non mouillante sur du cuivre ou de l'acier, une goutte posée reste non mouillante pendant une fraction de seconde avant de mouiller la plaque.

Le dispositif expérimental

Un dispositif expérimental et un protocole ont été mis au point pour tenter de mettre en évidence les paramètres qui interviennent dans ce phénomène.

Le dispositif expérimental est représenté sur la figure 5.6. La plaque métallique A est fixée sur une résistance électrique de puissance R2 (capable de dissiper 20 W environ). La plaque de 3 à 5 mm d'épaisseur est percée d'un trou de un millimètre de diamètre qui reçoit un thermocouple T2.

Le liquide est amené à travers un capillaire métallique C en inox de 1.6 mm de diamètre extérieur. Un pousse-seringue permet de contrôler l'injection de liquide avec un très faible débit. Le capillaire est noyé dans un bloc d'aluminium B, muni lui aussi d'un thermocouple T1 et d'une résistance électrique de chauffage R3. Les températures sont connues à 1°C près (on utilise un instrument de mesure standard), précision suffisante pour analyser qualitativement le comportement du système.

Le capillaire C et la plaque A sont reliés électriquement à travers une source de tension réglable U1 et une résistance R1 de $200\ \Omega$. Un amplificateur de précision de gain 12500 permet la mesure de la tension aux bornes de la résistance R1, donc du courant qui la traverse. Nous avons pour cela utilisé le prototype de l'amplificateur que nous avons spécialement développé pour l'amplification des signaux

des thermocouples, décrit dans l'annexe E. La sensibilité obtenue est de 80 pA pour un temps de réponse inférieur à 0.1 s. Elle permet de détecter le mouillage par une goutte d'eau déminéralisée à une température de 50°C et sous une tension U_1 de 1 V. À des températures plus basses, la détection devient difficile du fait de la faible conductivité électrique de l'eau. Le fait de disposer de cet amplificateur de grande sensibilité et de faible impédance s'est révélé extrêmement utile dans ce cas.

Un ordinateur muni d'une carte d'entrées-sorties analogiques permet de générer une rampe de tension U_1 entre 0 et 10 V avec une vitesse de 0.5 Vs^{-1} . La valeur de U_1 est figée dès que le mouillage est détecté à la sortie de l'amplificateur. Cette valeur est reproductible et constitue la tension de mouillage.

La goutte est observée au moyen d'une caméra vidéo qui permet de surveiller visuellement la taille et l'état des gouttes. La plaque métallique est préparée par polissage au papier corindon (grain 180, 320, 400, 600, 800, 1000 et 1200), puis à l'alumine 9 μm . Une fois polie, la plaque est rincée et séchée à l'air comprimé puis mise en place sous le capillaire. L'usage de coton pour nettoyer la plaque est proscrit car il produit des rayures visibles sur le cuivre et l'aluminium et laisse une grande quantité de poussières sur le métal. Le fluide utilisé est de l'eau de différentes qualités. Avant la mise en place de la plaque, de l'eau est injectée pour purger les tubes d'alimentation. Le capillaire est placé à une hauteur prédéterminée, dont dépendra le diamètre de la goutte.

La première série de mesures permet d'obtenir la tension minimale U_1 nécessaire au mouillage. A chaque mesure, une goutte d'eau est créée de sorte à effleurer la plaque. Après quelques secondes, le temps pour celle-ci de se stabiliser, la valeur de la tension U_1 est progressivement augmentée jusqu'au mouillage. On relève alors les températures T_1 et T_2 ainsi que la tension U_1 . Puis la goutte est évacuée au moyen d'un bref jet d'air comprimé.

Lorsque la tension de mouillage tend vers zéro, la goutte devient très instable et le mouillage se produit spontanément après une durée aléatoire. On relève la plage de température dans laquelle le mouillage se produit après une durée de l'ordre de la seconde. Ces points seront associés à une tension de 0 V.

Les résultats expérimentaux

Aucune influence notable de la qualité de l'eau ni d'un dégazage préalable n'a pu être mise en évidence (des essais ont été effectués avec de l'eau déminéralisée, de l'eau de ville et de l'eau salée).

Le signe de la tension appliquée est indifférent lui aussi.

L'état de surface de la plaque métallique a une influence significative sur la limite basse de température à partir de laquelle le phénomène est observé. Sur une plaque polie avec un papier corindon de grain 600, le phénomène se produit pour des températures supérieures à 60°C, alors que le niveau de polissage atteint avec l'alumine peut permettre d'atteindre des températures inférieures à 50 °C. Le nettoyage de la plaque avec un chiffon ou du coton n'empêche pas non plus l'apparition du phénomène, mais rend celui-ci aléatoire du fait des poussières laissées sur la plaque.

La tension U_1 nécessaire au mouillage augmente avec la température T_2 , et peut aller jusqu'à une dizaine de volts à 100 °C.

Il semblerait que la tension limite diminue avec la température T_1 du capillaire. Le mouillage est immédiat si la température du capillaire est supérieure à la température de la plaque. Dans ce cas on peut observer la formation d'un film de condensât sur la plaque à l'approche de la goutte.

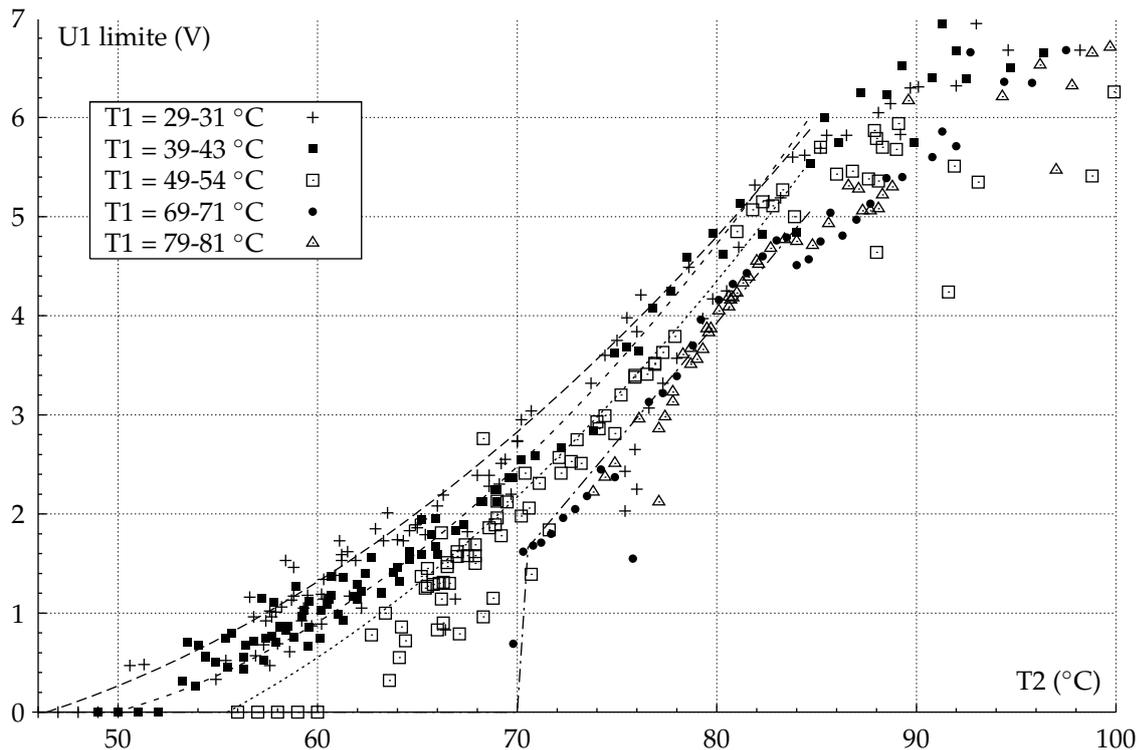


Figure 5.7 – Tension de mouillage mesurée en fonction de la température de la plaque (T_2). Chaque série de points correspond à une température donnée du capillaire (T_1) comme indiqué sur le graphique. Les courbes représentent les tendances correspondant aux trois valeurs de T_1 utilisées (portions de paraboles tracées pour passer près des valeurs supérieures de U_1).

La figure 5.7 représente une sélection de mesures de la tension de mouillage obtenues sur de l'acier avec de l'eau déminéralisée et en faisant varier les températures T_1 et T_2 . La dispersion en ordonnée semble liée à la géométrie de la goutte qui n'est contrôlée qu'approximativement. Les points correspondant aux tensions de mouillage les plus élevées correspondent souvent à des gouttes de diamètre légèrement supérieur à celui du capillaire et tangentes à la plaque métallique. Le rayon de courbure de la goutte est alors maximal. La figure représente l'ensemble des données collectées. En pratique, celles-ci ont été acquises par séries (conditions expérimentales identiques, eau de même qualité, etc.), et de petites différences peuvent être observées entre les séries. L'expérience comporte donc sans doute des paramètres supplémentaires que nous ne contrôlons pas.

Nous avons superposé aux points des courbes de tendances. Celles-ci sont construites en supposant que les valeurs les plus élevées de la tension de mouillage pour une température donnée correspondent à une géométrie de goutte nominale (goutte tangente à la plaque, diamètre légèrement supérieur à celui du capillaire) et aux gouttes les plus stables.

En faisant varier la hauteur du capillaire et la taille des gouttes, on a pu observer un lien entre le rayon de courbure et la tension de mouillage. Plus le rayon de courbure est petit, plus la tension de mouillage est faible.

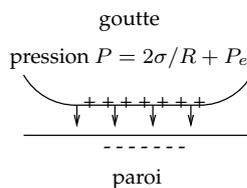
La dispersion des mesures et les différences observées entre deux séries normalement identiques montrent que tous les paramètres du système sont encore imparfaitement maîtrisés. Certains sont connus (la géométrie de la goutte et l'état de surface de la plaque) mais il pourrait y en avoir d'autres (composition de l'eau, température et hygrométrie de l'air, déplacement d'air par convection).

Lors d'essais ultérieurs réalisés en atmosphère saturée, le phénomène a à nou-

veau pu être observé, ce qui tendrait à prouver que la présence d'autres gaz que la vapeur d'eau dans l'atmosphère n'est pas indispensable. Cependant, dans ces conditions, la température de la plaque est forcément supérieure à 100°C, et le phénomène observé est peut-être simplement celui de Leidenfrost. En effet, l'utilisation d'un état de surface proche du poli miroir pourrait favoriser son apparition à des températures relativement basses.

Une interprétation

La surface de la goutte posée se compose de deux parties. Une partie courbe en contact avec l'air extérieur et une partie plate parallèle à la plaque. L'air extérieur ne peut sans doute pas pénétrer dans l'espace existant entre la plaque et la partie plate de la goutte.



L'application d'une tension entre le capillaire et la plaque a pour effet de charger la goutte et la plaque électriquement. La plaque et la partie plate de la goutte agissent comme un condensateur, et une force attractive s'exerce alors entre les deux. On peut supposer que le mouillage se produit lorsque la force attractive du condensateur dépasse la force répulsive qui semble s'exercer entre la goutte et la plaque. La pression électrostatique entre deux plaques d'un condensateur dans le vide s'écrit $P_e = \epsilon_0 V^2 / (2e^2)$ où e est la distance entre les plaques. Par exemple, pour une distance de 1 μm et une tension de 5 V, la pression électrostatique est d'environ 100 Pa. Cette pression s'ajoute à la surpression dans la goutte. Pour la géométrie nominale, si l'on considère que la goutte a un rayon de 1 mm et que la tension superficielle est de 0.07 Nm^{-1} , la pression dans la goutte d'eau est de 140 Pa. Les ordres de grandeur des pressions électrostatique et hydrodynamique sont compatibles : on a constaté qu'une variation du diamètre de la goutte a un effet sensible sur la tension de mouillage.

Les ordres de grandeur plaident donc en faveur de l'existence d'un film de gaz sous la goutte, dont l'épaisseur serait de l'ordre du micromètre, compatible avec la rugosité de la plaque métallique.

L'origine de ce film de gaz est cependant inconnue. On pourrait soupçonner l'intervention d'une double couche électrique à l'interface liquide-gaz, mais l'épaisseur de celle-ci dépend beaucoup de la concentration ionique de l'eau, et cette dernière n'a pas eu d'influence significative sur les résultats (ils sont identiques que l'eau soit déminéralisée ou très salée). Reste la possibilité que du gaz soit libéré par l'interface. Comme la goutte peut être maintenue stable pendant plusieurs minutes, il est peu probable que les gaz dissous au départ jouent un rôle significatif. En l'absence de renouvellement des gaz incondensables dans le film, on ne voit pas non plus comment un régime permanent d'évaporation pourrait s'établir à une température inférieure à la température de saturation (Achard [2] suggère que du gaz puisse se dissoudre en partie haute de la goutte et soit libéré sous la plaque chauffée).

Conclusion

Nous n'avons pas trouvé d'explication satisfaisante au phénomène décrit plus haut. Les quelques paramètres étudiés permettent de conclure que la température de la plaque, la température de la goutte, la différence de potentiel entre la plaque et la goutte et la rugosité de la plaque jouent un rôle. D'autres paramètres peuvent influencer le système –la température et la composition de l'atmosphère par exemple– mais notre montage ne nous permet pas de contrôler ce paramètre.

S'il ne semble pas présenter d'intérêt en lui-même, ce phénomène est gênant pour l'expérience que nous voulons réaliser. Au-delà de l'intérêt immédiat, sa

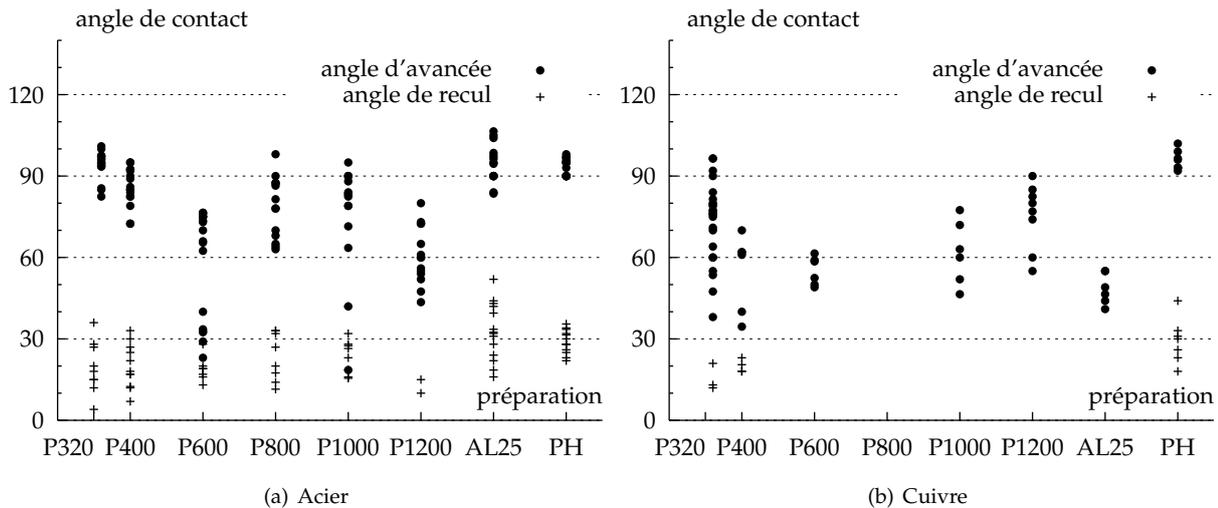


Figure 5.8 – Mesure de l'angle de contact d'avancée et de recul sur du cuivre et de l'acier à température ambiante en fonction de la préparation (papiers abrasifs Pxxx, alumine 25 μm et produit chimique).

compréhension pourrait permettre d'éclaircir certains aspects du comportement de l'eau et de ses interfaces.

5.2.2 Validation du concept CESSIL

Angle de contact statique et état de surface

L'une des hypothèses fondamentales des modèles de ligne de contact est l'existence d'un angle de contact d'avancée et d'un angle de recul. En particulier, on cherche à savoir s'il existe un angle de recul non nul ou si celui-ci est nul. Pour cela, une série de tests ont été menés pour vérifier l'influence de l'état de surface sur les angles d'avancée et de recul.

Nous avons donc préparé une plaque en acier et une plaque en cuivre à l'aide de différents papiers abrasifs dont les grains vont de P320 à P1200. Nous avons aussi à notre disposition de la poudre d'alumine de 25 μm (auquel nous nous référerons par le sigle AL25) et un produit abrasif pour carrosserie automobile¹ dont nous soupçonnons qu'il contient des produits qui altèrent chimiquement la surface (nous l'appellerons PH).

Pour chaque préparation, une goutte d'eau a été posée sur la plaque à l'aide d'un pousse-seringue et on a fait lentement croître puis décroître la taille de la goutte en mesurant l'angle d'avancée et de recul. La figure 5.8 résume l'ensemble des mesures réalisées.

Ces mesures appellent plusieurs remarques. La première est la dispersion relativement importante des mesures, qui montre qu'il sera difficile de compter sur un angle de contact prédictible avec ce type de préparation de la surface. Ensuite, on peut remarquer que l'hystérésis de l'angle de contact est très importante. De plus, cette dernière n'est pas clairement réduite lorsque la rugosité de la plaque diminue, contrairement à ce que l'on aurait pu attendre. Le seul traitement dont l'effet est clairement perceptible est le produit PH, mais on soupçonne une attaque chimique d'être à l'origine de ce comportement. Enfin, on peut remarquer l'absence d'angle de recul pour le cuivre dans toute une gamme de rugosité. En fait, cet angle est très proche de zéro et difficile à mesurer.

¹Polish micro-rayures Holtz

En conclusion, les traitements de surface faciles à mettre en œuvre (papiers abrasifs courants) ne permettent pas d'observer un effet clair sur les angles de contact d'avancée et de recul. On peut supposer qu'il faut utiliser un traitement de surface bien plus fin pour obtenir un effet mesurable. D'un autre côté, si le modèle d'angle de contact est destiné à être utilisé sur des surfaces non idéales, il ne faut pas négliger les surfaces rugueuses qui sont plus représentatives des surfaces des objets courants.

Obtention de gouttes stables à haute température

Un autre point important de l'expérience est l'obtention de gouttes d'eau stables à des températures supérieures à T_{sat} . Il est évident que sans précaution particulière, la moindre surchauffe de la paroi peut donner lieu à une ébullition à l'intérieur de la goutte. En pratique, on observe la formation de bulles de gaz ou de vapeur à l'intérieur des gouttes d'eau. À des surchauffes inférieures à 4 K, les bulles sont stables. Lorsque la surchauffe dépasse 5 K, les bulles croissent et détruisent la goutte.

Le première chose à faire pour éviter la formation des bulles est d'utiliser une surface propre et lisse. Les rugosités ont en effet tendance à piéger du gaz lors du mouillage par la goutte. Ceci oblige en pratique à utiliser une eau très pure pour éviter les dépôts sur la plaque et à repolir celle-ci périodiquement. Une autre tâche indispensable consiste à faire dégazer l'eau en la faisant bouillir au préalable. Lors de nos expériences, nous n'avons cependant pas réussi à éviter systématiquement l'apparition de bulles de gaz. La meilleure solution consiste à faire bouillir l'eau dans un four à micro-ondes, qui a la propriété de faire chauffer l'eau dans la masse. On atteint ainsi des surchauffes très importantes qui permettent apparemment d'éliminer plus de gaz dissous.

Il semble relativement facile d'obtenir des gouttes stables à des surchauffes de 4 à 5 K. Par une manipulation très soignée, on peut arriver à des surchauffes de 10 K mais le résultat reste très aléatoire.

Obtention d'une atmosphère saturée

Une fois une goutte stable obtenue, il faut s'assurer que l'atmosphère située autour de la goutte est saturée en vapeur d'eau. L'effet d'une sous-saturation est très facilement décelable : la goutte diminue de volume même lorsque la plaque a une température inférieure à T_{sat} .

La figure 5.9 montre deux séries de mesures, l'une en atmosphère sous-saturée et l'autre en atmosphère saturée. Le diagnostic est très clair : la durée d'évaporation tend vers l'infini lorsque la température de la plaque s'approche du «point de rosée» par valeur supérieure. Si ce point est situé à une température inférieure à 100°C (ou plus précisément, inférieure à la température de saturation correspondant à la pression atmosphérique), la saturation de l'atmosphère en vapeur d'eau est incomplète et il est impossible de prédire quoi que ce soit. On a pu constater cependant que si l'environnement de la goutte est calme (absence convection), le temps d'évaporation ne dépend que faiblement de la saturation de l'atmosphère si la température de la plaque est supérieure à 103°C environ. Dans ce cas, l'évaporation de la goutte suffit à produire localement une atmosphère saturée.

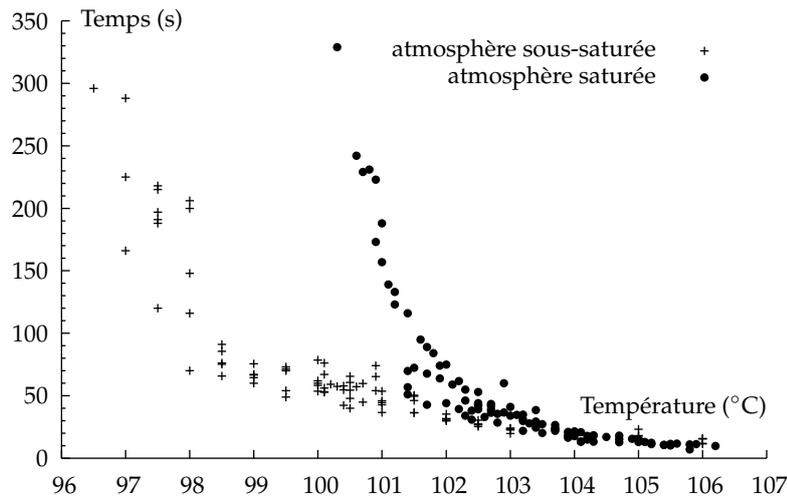


Figure 5.9 – Temps d'évaporation d'une goutte d'eau en fonction de la température de la plaque en atmosphère saturée ou non. Si l'atmosphère est saturée, le temps d'évaporation semble être inversement proportionnel à la température de surchauffe de la paroi, comme prévu par le modèle.

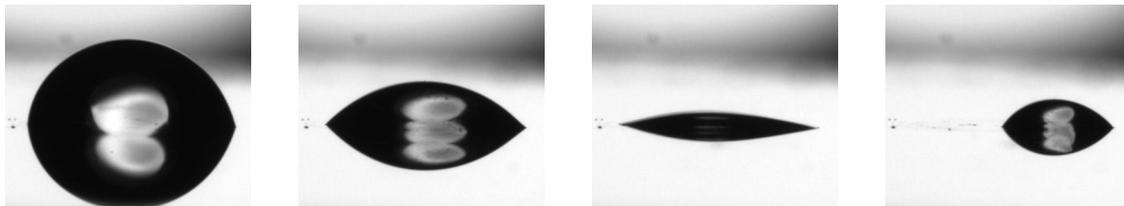
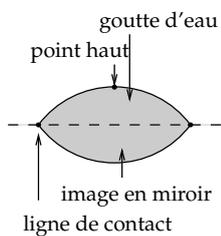


Figure 5.10 – Quelques images de l'évaporation d'une goutte d'eau sur une plaque chauffée. L'évaporation dure entre une dizaine de secondes et une minute en fonction de la température de la plaque. Le diamètre de la goutte est de 1 mm environ.

Évaluation expérimentale du coefficient d'échange

Nous avons ensuite tenté d'exploiter le temps d'évaporation de la goutte pour en déduire une valeur du coefficient d'échange et comparer cette valeur au résultat prévu par le modèle théorique. Nous avons pour cela enregistré des images de l'évaporation d'une goutte à intervalles réguliers. Un calibrage du système de prise de vues est nécessaire pour mesurer le rayon des gouttes d'eau à partir des images. Sur chaque image, on repère la position des lignes de contact. On suppose que la projection réalisée par l'objectif est une projection parallèle et que la goutte est circulaire. La distance entre les points de contact est donc égale au diamètre de la ligne de contact. On repère ensuite le point haut de la goutte. La position de ces trois points permet de calculer la longueur de la ligne de contact, le volume de la goutte d'eau et l'angle de contact. En calculant la variation du volume de la goutte en fonction du temps, on en déduit le flux de masse. Enfin, la température de la paroi est mesurée par un thermocouple placé dans la paroi à une distance de 2 mm environ sous la surface mouillée.



La figure 5.10 montre quelques images de l'évaporation d'une goutte. En général, nous avons observé que l'angle de contact obtenu après avoir posé la goutte d'eau sur la plaque est proche de 90° . La ligne de contact ne se déplace pas pendant un long moment, jusqu'à ce que l'angle de contact atteigne une valeur de 10° environ. Brusquement, la ligne de contact se déplace alors et la goutte se stabilise avec un rayon beaucoup plus petit et un angle très supérieur à sa valeur avant le déplacement. Ce comportement est apparemment lié à la présence d'impuretés

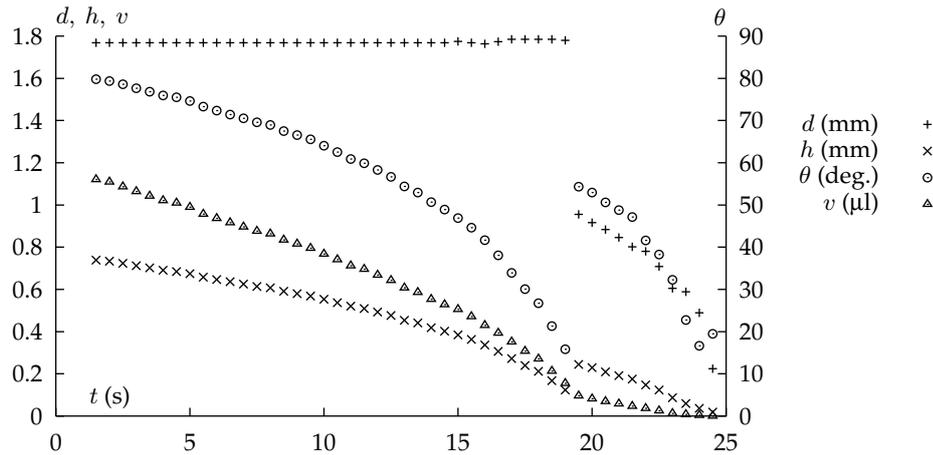


Figure 5.11 – Mesure du diamètre d de la ligne de contact, de la hauteur h , de l’angle de contact θ et du volume v d’une goutte d’eau en fonction du temps (plaque en cuivre, température approximative de 102°C). La goutte s’évapore en 25 s environ. Jusqu’à 20 s, la ligne de contact est statique. À cet instant, la goutte se rétracte brusquement puis l’angle diminue à nouveau. Ensuite, les lignes de contact se déplacent en permanence.

dans l’eau. Ces impuretés se déposent à la ligne de contact et l’interface s’y accroche. Lorsque l’angle devient très faible, le décrochage de la ligne de contact se propage très rapidement sur toute la longueur de la ligne de contact.

La figure 5.11 montre l’évolution du diamètre d’une goutte d’eau, de son volume et de l’angle de contact en fonction du temps. Le flux de masse peut être déduit de la dérivée du volume de la goutte par rapport au temps. On obtient ainsi une estimation du flux de masse et de chaleur en fonction de l’angle de contact. Puis, nous avons répété cette mesure pour différentes valeurs de la température de la paroi.

D’après le modèle, le flux de chaleur est proportionnel à la longueur de la ligne de contact et à la température de surchauffe de la paroi. Nous avons donc défini le coefficient d’échange expérimental par unité de longueur de ligne de contact de la façon suivante

$$H_{mes} \hat{=} \frac{Q}{T_c \pi d}, \quad \text{avec } Q \hat{=} \rho_l \mathcal{L} \frac{\partial v}{\partial t} \quad (5.5)$$

où T_c est la surchauffe de la paroi, v le volume de la goutte et d le diamètre de la ligne de contact. Les valeurs obtenues sont représentées sur la figure 5.12 en fonction de l’angle de contact. La dispersion des résultats est très grande. On remarque cependant que les valeurs obtenues pour des températures de surchauffe inférieures à 3 K sont généralement plus élevées. Nous pensons que ces mesures sont faussées, soit par un décalage de l’instrument de mesure de la température, soit par une saturation incomplète de l’atmosphère (le transfert de masse est plus élevé si l’atmosphère est sous-saturée).

Nous avons calculé par ailleurs la valeur théorique de ce coefficient d’échange en utilisant le modèle de ligne de contact. Celle-ci ne dépend au premier ordre que du périmètre πd de la goutte et de l’angle de contact θ . L’échelle macroscopique s_{macro} n’a que peu d’influence : il suffit d’utiliser un ordre de grandeur de 1 mm. La valeur théorique est donc calculée à l’aide des expressions analytiques du modèle de ligne de contact en supposant que la ligne de contact est rectiligne et en intégrant le flux de chaleur jusqu’à une longueur macroscopique de l’ordre de 1 mm.

De toute évidence, l’échelle macroscopique s_{macro} a un effet relativement faible sur le résultat du modèle. L’écart observé entre le modèle et les résultats

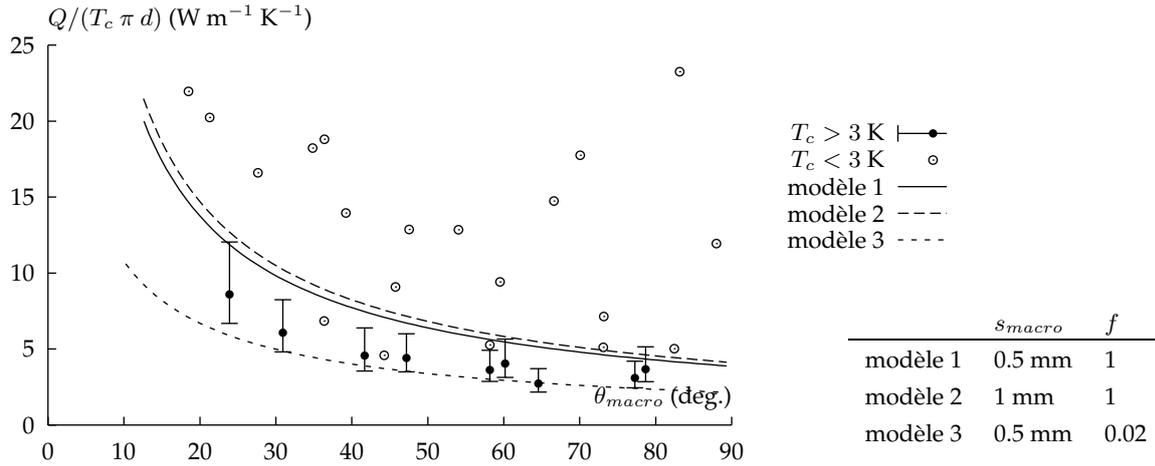


Figure 5.12 – Résultats expérimentaux de l'évaluation du coefficient d'échange thermique par unité de longueur de ligne de contact en fonction de l'angle de contact. On distingue les mesures réalisées avec une surchauffe supérieure à 3 K et les mesures réalisées avec une surchauffe T_c inférieure à 3 K. On a superposé le résultat du modèle analytique appliqué pour deux valeurs de l'échelle macroscopique s_{macro} et deux valeurs du coefficient d'accommodation f (voir tableau). La source d'erreur la plus importante est de loin la mesure de température. Les barres d'erreur correspondent à une erreur de ± 1 K sur l'évaluation de la surchauffe T_c .

peut alors être expliqué de deux façons différentes.

D'une part, la mesure de température est vraisemblablement entachée d'une erreur systématique. Le matériel utilisé (un instrument de mesure standard à thermocouple) n'a pas été spécialement calibré et n'est pas conçu pour des mesures très précises. De plus, la valeur de la température de saturation n'a pas été mesurée.

Le modèle suggère une autre possibilité : la figure 5.12 met en évidence l'influence du coefficient d'accommodation f sur le résultat : entre la valeur de 1 (la plus élevée) et la valeur de 0.02 (qui fut pendant longtemps acceptée comme un résultat vraisemblable), le coefficient d'échange varie d'un facteur 2. Ainsi, une valeur du coefficient d'accommodation égale à 0.1 permet de retrouver les résultats expérimentaux. Cette valeur est-elle réaliste ? L'eau utilisée contenait-elle des impuretés qui ont fait baisser le coefficient d'évaporation ? Ou observe-t-on ici l'effet des rugosités sur le transfert de chaleur à très petite échelle ?

Ces premiers résultats expérimentaux ne permettent pas encore de conclure sur la validité du modèle. Il faut avant tout améliorer la précision de la mesure de température avant de proposer une interprétation. Toutefois, le fait que l'ordre de grandeur soit correct et le fait que la dépendance vis-à-vis de l'angle de contact semble correspondre (très grossièrement) au modèle théorique sont très encourageants.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé une expérience pour valider le modèle de transfert de chaleur singulier près d'une ligne de contact statique. L'expérience CESSIL repose sur la mesure du flux de chaleur et du débit de liquide nécessaire à l'entretien de l'évaporation stationnaire d'une goutte d'eau placée entre deux pièces métalliques.

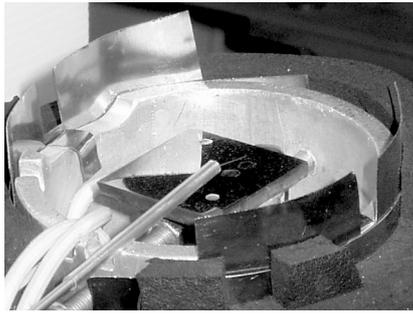
Si les mesures sont conduites avec suffisamment de précision (quelques pourcent sur la température de surchauffe, le flux de chaleur, le débit de liquide,

l'angle de contact et le périmètre de la goutte) il devrait être possible d'en déduire la valeur du coefficient d'accommodation. Cette expérience semble être la première tentative de validation quantitative directe du flux de chaleur singulier à la ligne de contact pour un fluide partiellement mouillant.

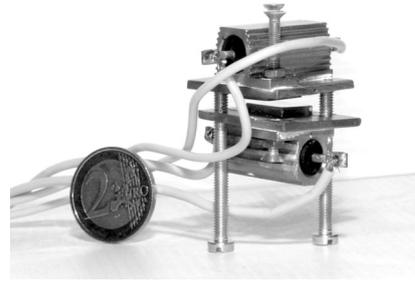
Nous avons réalisé quelques expériences préliminaires qui ont fourni des résultats prometteurs. Ces expériences ont permis de mettre en évidence les difficultés majeures que l'on rencontrera lors de la mise en œuvre du concept CESSIL. Ces difficultés concernent notamment :

- la mesure précise de la température et du flux de chaleur,
- l'obtention d'une goutte stable de liquide surchauffé,
- l'injection du liquide sans perturber la forme de la goutte,
- l'état de surface des pièces métalliques, qui doit permettre d'atteindre un angle de contact stable.

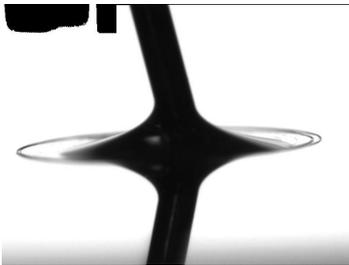
À l'exception de l'injection du liquide, l'ensemble de ces problèmes semble pouvoir être résolu de façon satisfaisante. Il reste cependant à réaliser le montage définitif en tenant compte des différentes contraintes que nous avons évoquées.



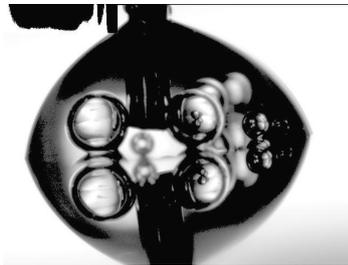
(a) Plaque en acier montée sur une résistance de chauffage dans une demi-coque d'isolement. On distingue les ouvertures d'observation et l'aiguille d'injection de liquide.



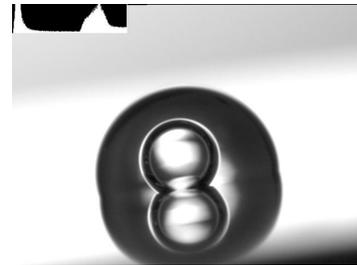
(b) Deux plaques en cuivre montées sur résistances de chauffages pour tester la croissance d'une goutte entre deux plaques



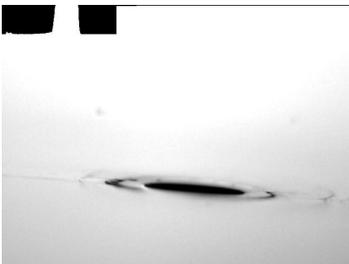
(c) Évaporation d'une goutte. On distingue la trace d'un dépôt où la ligne de contact s'accroche jusqu'à ce que l'angle de contact devienne nul.



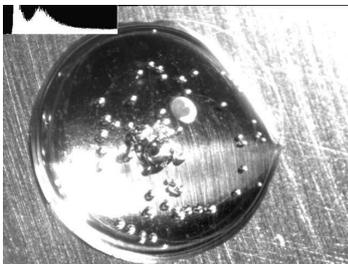
(d) Nucléation à l'intérieur de la goutte.



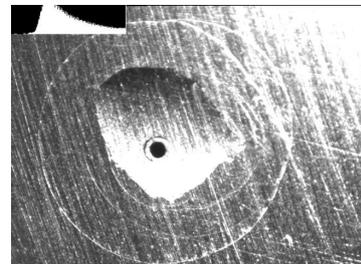
(e) Autre cas de nucléation avec une bulle stable à l'intérieur de la goutte.



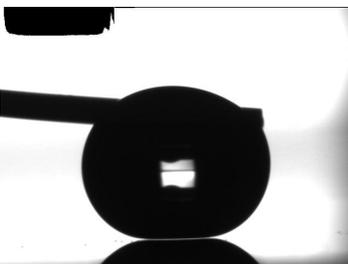
(f) Aiguille traversant la plaque de chauffage pour l'injection de liquide.



(g) Vue de dessus lors de l'évaporation d'une goutte de grande taille. On distingue nettement les sites de nucléation.



(h) Lorsque la goutte devient très peu épaisse, les bulles de vapeur disparaissent à mesure qu'elles touchent la surface de la goutte.



(i) Très souvent, le mouillage est rendu difficile par l'effet mis en évidence au début du chapitre.

Figure 5.13 – Galerie de photographies de l'expérience préliminaire à CESSIL.

Conclusions et perspectives

Conclusion

Cette étude fait partie d'un programme à long terme dont le but est de parvenir à simuler numériquement le processus d'ébullition. Par cette approche, on espère obtenir plus d'informations sur les phénomènes locaux, par exemple sur l'interaction de chaque bulle avec les parois et avec les autres bulles. Il semblait donc naturel de faire appel à des méthodes de simulation numérique directe, pour décrire numériquement les échelles les plus fines de l'écoulement. Cela signifie en particulier que l'on résout exactement la géométrie des bulles de vapeur.

Par ailleurs, il semble évident que la simulation numérique doit prendre en compte au moins une bulle de vapeur dans son ensemble, voire plusieurs. Cette contrainte et la puissance, grande mais pas infinie, des ordinateurs impose en pratique la plus petite échelle que l'on peut espérer résoudre par la simulation : elle est de l'ordre du millième de la taille des bulles avec les méthodes numériques actuelles. Or, l'ébullition implique des phénomènes à bien plus petite échelle, en particulier aux lignes de contact. La vision que l'on avait de la méthode numérique a donc changé : plutôt qu'une simulation directe, il s'agirait d'une simulation où seules certaines échelles du phénomène sont effectivement décrites et d'autres sont représentées par des modèles de sous-maille. Cette nouvelle approche implique d'une part que l'on dispose des modèles de sous-maille adéquats, et d'autre part que l'on dispose d'une méthode numérique capable de recevoir ces modèles.

Dans cette étude, nous avons travaillé sur ces deux aspects :

- nous avons développé un modèle de sous-maille pour modéliser les lignes de contact et nous avons proposé une approche de validation expérimentale de ce modèle,
- nous avons adapté la méthode de front-tracking pour qu'elle permette l'introduction de modèles de sous-maille, et nous y avons ajouté le modèle de ligne de contact.

La ligne de contact est relativement difficile à modéliser car un grand nombre de phénomènes physiques y interviennent. Le modèle que nous proposons est fondé à la fois sur des éléments de modélisation connus (le modèle de Dussan de la ligne de contact dynamique, et le modèle de Stephan de la micro-région), ainsi que sur des éléments d'observation évidents : l'angle de contact de l'eau sur les métaux montre une hystérésis très importante et l'eau n'est pas un fluide parfaitement mouillant. De plus, le comportement des lignes de contact dépend énormément de l'état de surface. Il est donc illusoire de tenter de prédire très précisément la valeur de l'angle de contact. Notre approche consistait donc à rechercher les phénomènes les plus importants pour l'angle de contact et le transfert de chaleur, en essayant d'éviter l'utilisation de grandeurs physiques trop difficiles à mesurer.

Nous sommes parvenus à un modèle explicite utilisant quatre paramètres pour décrire le comportement microscopique de la ligne de contact (angles de

contact statiques d'avancée et de recul, longueur de glissement, et coefficient d'accommodation). L'expérience CESSIL devrait permettre de déterminer la valeur du coefficient d'accommodation une fois pour toutes (du moins pour un fluide pur). D'autre part, une valeur caractéristique approximative de la longueur de glissement devrait convenir dans la plupart des cas. Les seuls paramètres à déterminer ensuite sont l'angle d'avancée et l'angle de recul et sont faciles à évaluer expérimentalement.

En revanche, le modèle comporte très peu de paramètres directement liés au transfert de masse : le seul paramètre ayant un effet direct sur ce dernier est le coefficient d'accommodation qui intervient dans l'expression de la résistance d'interface. Si ce dernier est connu et que l'angle de contact est mesuré, le modèle est prédictif pour le flux de masse et de chaleur.

Une telle propriété appelle naturellement une vérification expérimentale, et nous avons proposé une méthode de validation de cet aspect du modèle. La mesure doit être réalisée très soigneusement pour que les résultats soient exploitables. Nous avons montré en particulier que la propreté des surfaces, la pureté du fluide et l'absence de gaz dissout, la saturation parfaite de l'atmosphère et la précision de mesure de la température sont des éléments incontournables et cependant difficiles à obtenir dans l'expérience. Un autre résultat essentiel de cette étude est que l'angle de contact de l'eau sur un métal peut apparemment prendre une valeur quelconque entre des bornes très larges. Cependant, les résultats préliminaires sont encourageants et nous incitent à poursuivre nos efforts dans cette direction.

Le troisième volet de cette étude consistait à utiliser le modèle de ligne de contact dans une simulation numérique de l'ébullition. Pour cela, nous avons dû construire une méthode numérique dans laquelle le modèle puisse être introduit de façon pertinente (on ne veut pas que les effets du modèle soient noyés au milieu de problèmes d'ordre numérique). Nous avons pour cela construit une méthode sur le principe de la méthode de front-tracking en essayant de respecter les critères suivants :

- absence de courant parasite,
- possibilité de contrôler les bilans de masse et d'énergie des phases,
- possibilité d'introduire un modèle de sous-maille du transfert de masse à la ligne de contact.

Le fait de pouvoir calculer des bilans de masse et d'énergie nous a conduit à nous rapprocher de façon significative des méthodes de type «Volume Of Fluid». Notre approche originale du problème des courants parasites nous a d'autre part convaincu de l'intérêt de conserver un maillage surfacique mobile pour représenter les interfaces. Nous avons en particulier mis en évidence le rôle primordial de l'échange d'énergie entre les interfaces (énergie potentielle de surface) et le fluide (énergie cinétique).

Nous avons remarqué un rapprochement très net entre la nouvelle formulation du front-tracking que nous avons proposé et certains travaux récents sur la méthode «Volume Of Fluid», où des marqueurs d'interface ont été introduits. Le formalisme des deux méthodes est maintenant pratiquement identique. Ce rapprochement est encourageant pour la suite car il devrait permettre d'avancer de front sur les problèmes qui restent à résoudre. Il devrait être possible de bénéficier d'un grand nombre d'éléments de schémas numériques développés pour la méthode VOF, notamment en ce qui concerne les bilans des grandeurs conservatives, et d'apporter à celle-ci les améliorations que nous avons obtenues sur la discrétisation de la tension de surface et sur les courants parasites.

Perspectives

Les perspectives ouvertes par ces travaux sont très nombreuses : cette étude a mis en évidence des problèmes fondamentaux qu'il faut absolument résoudre avant d'espérer atteindre le but initial (à savoir la simulation de l'ébullition), et permet d'envisager un vaste champ d'applications qui appellent des développements dans de nouvelles directions.

En ce qui concerne le modèle de ligne de contact, il serait intéressant d'obtenir un modèle plus prédictif de l'angle de contact. Nous pensons qu'un tel modèle n'est pas encore mûr, en particulier parce qu'il faut pour cela comprendre l'origine de l'hystérésis de l'angle de contact. Cette dernière est traditionnellement attribuée à la rugosité de la paroi ou à des hétérogénéités chimiques, mais les expériences montrent qu'elle est aussi observable sur des surfaces lisses à l'échelle moléculaire. Nous pensons qu'avant d'avoir résolu ce problème, il n'est pas pertinent de chercher à raffiner la modélisation de la ligne de contact en levant les différentes approximations utilisées car les améliorations seraient sans doute invérifiables par une approche expérimentale. De plus, les différents paramètres du modèle actuel semblent offrir suffisamment de degrés de liberté pour rendre compte des résultats expérimentaux.

Il semble raisonnable de s'orienter maintenant vers une approche expérimentale pour vérifier le modèle actuel. Les expériences montreront si le modèle est applicable ou non. Si elles sont conduites avec suffisamment de précision, elles montreront si on peut envisager de raffiner le modèle en levant les différentes approximations.

Sur le plan de la méthode numérique, un grand pas a été franchi en construisant une méthode capable de simuler des problèmes à très fort contraste de masse volumique, nettement dominés par la tension de surface, sans courant parasite et en respectant le bilan de volume des phases. De nombreux points particuliers de la méthode restent à améliorer :

- le modèle de sous-maille du transfert de chaleur aux interfaces,
- le modèle de sous-maille des termes convectifs au voisinage des interfaces,
- l'écriture d'un bilan d'énergie interne exact aux interfaces,
- l'amélioration du bilan d'énergie mécanique lors du transfert entre l'énergie potentielle de surface et l'énergie cinétique du fluide,
- l'amélioration générale du schéma numérique, notamment celle de la discrétisation en temps, qui semble étroitement liée à la conservation de l'énergie et du volume.

On peut d'autre part envisager de nombreuses extensions de la méthode :

- l'extension à des calculs tridimensionnels (déjà en cours de réalisation au laboratoire),
- l'introduction d'un modèle de micro-couche, indispensable à la simulation de l'ébullition,
- l'introduction d'un modèle de sous-maille de turbulence (les recherches sur ce sujet ont également commencé au laboratoire),
- la prise en compte de mélanges binaires, qui pourrait trouver une application dans un futur proche dans un autre laboratoire,
- la parallélisation de la méthode numérique (en cours de réalisation), indispensable pour pouvoir simuler de façon réaliste l'interaction de plusieurs inclusions en trois dimensions,
- le raffinement local du maillage près des interfaces, qui semble lui aussi nécessaire au vu des dimensions caractéristiques des couches limites thermiques.

Le problème le plus immédiat qui empêche pour l'instant de simuler l'ébullition de façon réaliste est l'absence d'un modèle de micro-couche dans la méthode numérique.

Le deuxième problème, très limitant pour l'étude des instabilités des lignes de contact et de la crise d'ébullition, est l'incompressibilité du fluide. Cette incompressibilité rend la méthode extrêmement «raide» vis-à-vis du transfert de masse : le champ de pression varie très fortement en raison de la discontinuité en temps du transfert de masse aux interfaces. De ce fait, l'accélération du fluide et les effets convectifs semblent noyés dans le bruit numérique. De plus, cette raideur du fluide rend instable une prise en compte directe de la courbe de saturation. Cet argument s'ajoute à celui, plus physique, que la masse volumique de la vapeur varie énormément avec la pression et qu'un modèle totalement incompressible n'est pas réaliste lorsque la pression varie localement de plusieurs dizaines de pour-cent. D'un autre côté, on ne veut surtout pas utiliser un modèle de fluide compressible classique car on serait obligé de tenir compte de la propagation des ondes de pression. Par conséquent, l'enjeu le plus important pour la méthode numérique pourrait bien être l'introduction d'une certaine forme de compressibilité du fluide.

Annexes

Annexe **A**

Solutions élémentaires de l'équation de Poisson en coordonnées cylindriques, application au calcul du transfert de chaleur à la ligne de contact

L'équation de Poisson et l'équation du bilaplacien interviennent dans un grand nombre de phénomènes physiques. L'étude systématique de leurs solutions analytiques est donc très utile. En thermohydraulique, l'équation de Poisson gouverne évidemment le champ de température lorsque le terme de conduction de la loi de Fourier est dominant. Le bilaplacien quant à lui gouverne la fonction de courant dans un écoulement de Stokes incompressible stationnaire. Dans cette annexe, on présente la méthode générale utilisée pour obtenir les solutions analytiques pour le problème de Poisson dans des géométries de type «ligne de contact». On illustre ensuite sur des exemples les propriétés générales de ces solutions qui sont utilisées dans ce mémoire. La dernière partie est consacrée au calcul du transfert de chaleur près d'une ligne de contact dans la configuration utilisée en 2.2.

A.1 Solutions de l'équation de Poisson

A.1.1 Solutions élémentaires

On cherche les solutions régulières de l'équation de Poisson en coordonnées cylindriques :

$$u(r, \theta) : \Delta u = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r u) + \frac{1}{r^2} \partial_{\theta\theta} u = 0 \quad (\text{A.1})$$

Pour cela, on cherche les solutions de l'équation en variables séparées :

$$u(r, \theta) = f(r) g(\theta) \quad (\text{A.2})$$

Avec cette notation, l'équation de Poisson s'écrit

$$\forall r > 0, \Delta u = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{r} g(\theta) (f'(r) + r f''(r)) + \frac{1}{r^2} f(r) g''(\theta) = 0 \quad (\text{A.3})$$

Les solutions sont donc la fonction nulle ($f = 0$ ou $g = 0$) et, en multipliant par $r^2 / (fg)$, les fonctions vérifiant :

$$\forall r > 0, \forall \theta, \frac{r f'(r) + r^2 f''(r)}{f(r)} = -\frac{g''(\theta)}{g(\theta)} \quad (\text{A.4})$$

On cherche maintenant les solutions non nulles de l'équation. Le membre de gauche est une fonction de r uniquement, et le membre de droite une fonction de θ uniquement. Donc, ces deux membres sont constants.

$$\nabla^2 (f(r) g(\theta)) = 0, fg \neq 0 \Rightarrow \exists \beta, \frac{r f'(r) + r^2 f''(r)}{f(r)} = -\frac{g''(\theta)}{g(\theta)} = \beta \quad (\text{A.5})$$

La fonction f vérifie donc :

$$r f'(r) + r^2 f''(r) - \beta f(r) = 0 \quad (\text{A.6})$$

Pour une valeur de β fixée, l'ensemble des solutions de cette équation différentielle du deuxième ordre est un espace vectoriel de dimension 2. Selon que β est nul ou non, les solutions s'écrivent :

$$\beta = 0 \Rightarrow f(r) = a + b \ln r \quad (\text{A.7})$$

$$\beta > 0 \Rightarrow f(r) = ar^\lambda + br^{-\lambda}, \lambda = \sqrt{\beta} \quad (\text{A.8})$$

$$\beta < 0 \Rightarrow f(r) = a \sin(\lambda \ln r) + b \cos(\lambda \ln r), \lambda = \sqrt{-\beta} \quad (\text{A.9})$$

Quant à la fonction g , d'après l'équation A.5 elle vérifie :

$$g''(\theta) + \beta g(\theta) = 0 \quad (\text{A.10})$$

L'ensemble des solutions s'écrit :

$$\beta = 0 \Rightarrow g(\theta) = a + b \theta \quad (\text{A.11})$$

$$\beta > 0 \Rightarrow g(\theta) = a \sin \lambda \theta + b \cos \lambda \theta, \lambda = \sqrt{\beta} \quad (\text{A.12})$$

$$\beta < 0 \Rightarrow g(\theta) = a e^{\lambda \theta} + b e^{-\lambda \theta}, \lambda = \sqrt{-\beta} \quad (\text{A.13})$$

L'ensemble des fonctions $u = fg$ que l'on obtient en parcourant toutes les valeurs de β forme une base d'un espace de fonctions sur le domaine $(r, \theta) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}$. Les fonctions que l'on peut représenter incluent des fonctions singulières en $r = 0$. Le plus souvent, on résout l'équation sur un domaine borné en θ et en r . Dans ce cas, un ensemble dénombrable de fonctions suffit à former une base et à décrire toutes les fonctions régulières sur ce domaine.

En pratique, on peut classer les solutions élémentaires de l'équation de Poisson en coordonnées cylindriques de la façon suivante :

$$u(r, \theta) = \begin{cases} a \\ a \theta \\ a \ln r \\ a \theta \ln r \\ r^\lambda (a \sin \lambda \theta + b \cos \lambda \theta), \lambda \neq 0 \\ e^{\lambda \theta} (a \sin(\lambda \ln r) + b \cos(\lambda \ln r)), \lambda \neq 0 \end{cases} \quad (a, b) \in \mathbb{R}^2 \quad (\text{A.14})$$

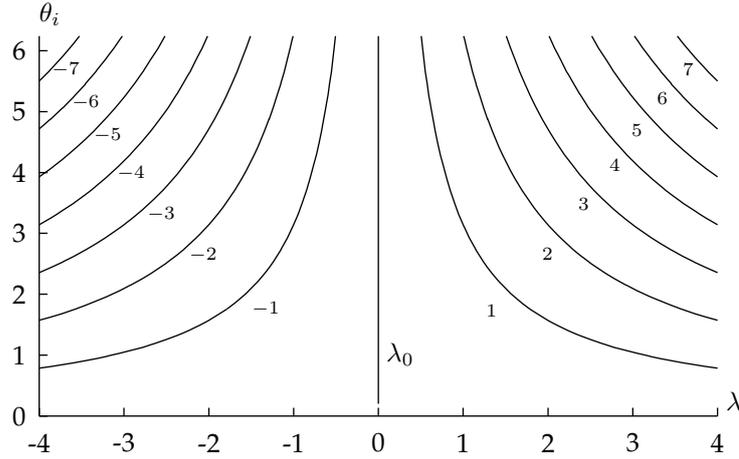


Figure A.1 – Racines de la fonction $\Lambda = \sin \lambda \theta_i$ de l'exemple étudié en A.1.2. Pour un angle d'ouverture θ_i donné, il existe un ensemble dénombrable de racines positives et négatives. Dans cet exemple simple, les racines sont données par $\lambda_k = k\pi/\theta_i$.

A.1.2 Exemple de problème résolu

Supposons que l'on cherche à résoudre le problème ci-dessous (ce problème est représentatif de la configuration d'une ligne de contact) :

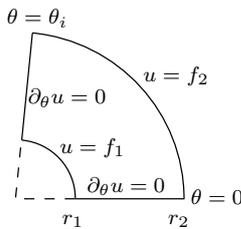
$$u(r, \theta) \text{ tel que } \begin{cases} \Delta u = 0 & r_1 < r < r_2, 0 < \theta < \theta_i \\ \partial_\theta u(r, 0) = 0 & r_1 < r < r_2 \\ \partial_\theta u(r, \theta_i) = 0 & r_1 < r < r_2 \\ u(r_j, \theta) = f_j(\theta) & 0 < \theta < \theta_i, j = 1, 2 \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

On cherche une solution de ce problème sous la forme d'une somme de solutions élémentaires. Les solutions sont sélectionnées parmi celles qui vérifient les conditions aux limites homogènes $\partial_\theta u = 0$. La solution $u = a \ln r$ convient. On peut aussi construire une série de solutions à partir de la fonction $u = r^\lambda (a \sin \lambda \theta + b \cos \lambda \theta)$. La condition $\partial_\theta u = 0$ en $\theta = 0$ implique que $a = 0$. La condition en $\theta = \theta_i$ se traduit par l'équation suivante :

$$\Lambda(\lambda) = 0, \quad \text{avec } \Lambda(\lambda) \hat{=} \lambda \sin \lambda \theta_i \quad (\text{A.16})$$

Cette équation est vérifiée pour $\lambda \theta_i = k\pi$ pour toute valeur entière de k . Le graphique A.1 représente la position des racines de la fonction Λ en fonction de l'angle θ_i . Cette représentation graphique, propre à un problème donné, sera largement exploitée par la suite pour obtenir les propriétés générales des solutions du problème.

On dispose donc de la famille de solutions élémentaires suivantes, vérifiant les deux conditions aux limites homogènes en $\theta = 0$ et $\theta = \theta_i$:



$$\begin{cases} \phi_q(r, \theta) = \ln r \\ \phi_k(r, \theta) = r^{\lambda_k} \cos \lambda_k \theta, \quad k \in \mathbb{Z} \quad \text{avec } \lambda_k \hat{=} \frac{k\pi}{\theta_i} \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

La figure A.2 représente les premières solutions élémentaires du problème. La solution élémentaire ϕ_q correspond à une source ponctuelle –de chaleur par exemple, pour un problème de conduction– située à l'origine. Si les fonctions f_1 et f_2 sont suffisamment régulières, on peut construire une solution du problème à partir des solutions élémentaires ϕ_k . La solution est recherchée sous la forme suivante :

$$u(r, \theta) = a_q \phi_q(r, \theta) + \sum_{k \in \mathbb{Z}} a_k \phi_k(r, \theta) \quad (\text{A.18})$$

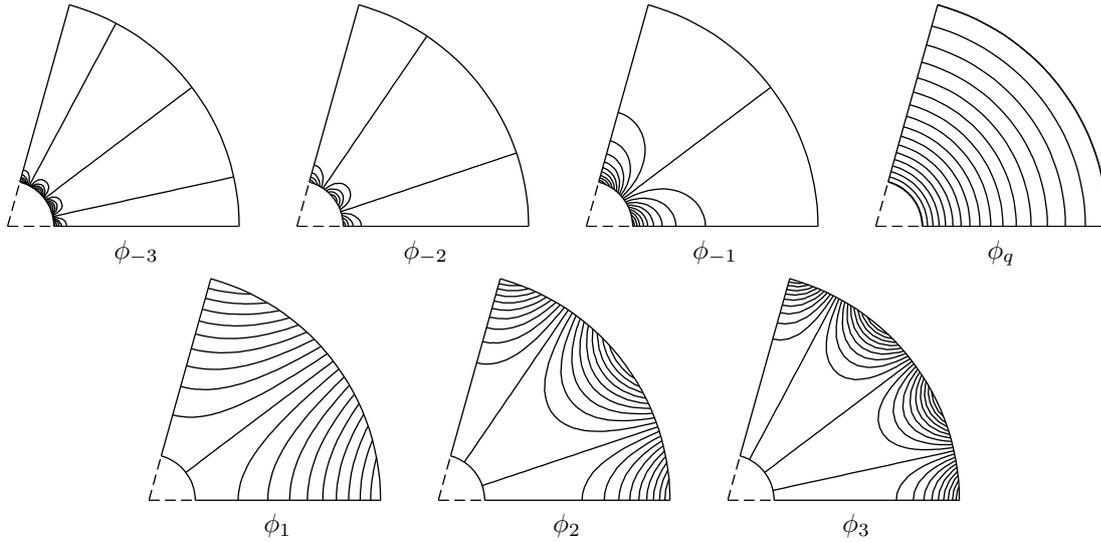


Figure A.2 – Quelques solutions élémentaires ϕ_k correspondant au problème de l'exemple A.1.2 (l'angle θ_i vaut 1.3 radians). Les courbes sont des isovaleurs de la fonction ϕ . Plus le numéro du mode est grand, plus la solution est localisée à proximité du bord. Ainsi, les hautes fréquences des conditions aux limites ne se propagent pas vers l'intérieur du domaine. L'intérieur du domaine n'est sensible qu'à la valeur moyenne de la condition aux limites.

Les conditions aux limites en r_1 et r_2 se traduisent ainsi sur les coefficients a_k :

$$a_0 + a_q \ln r_j + \sum_{k>0} \left(a_k r_j^{\lambda_k} + a_{-k} r_j^{-\lambda_k} \right) \cos \lambda_k \theta = f_j(\theta), \quad j = 1, 2 \quad (\text{A.19})$$

Or la décomposition des fonctions f_j en somme de cosinus est unique et on a besoin pour chacune d'entre elles que des coefficients λ_k positifs. On note $f_{1,k}$ et $f_{2,k}$ les coefficients de cette décomposition :

$$f_j(\theta) = \sum_{k \geq 0} f_{j,k} \cos \lambda_k \theta \quad (\text{A.20})$$

On identifie les coefficients des deux décompositions :

$$\begin{cases} a_k r_j^{\lambda_k} + a_{-k} r_j^{-\lambda_k} = f_{j,k}, & j = 1, 2, \quad k > 0 \\ a_0 + a_q \ln r_j = f_{j,0} \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

La résolution de ce système linéaire conduit au résultat suivant. On obtient ainsi la solution du problème posé sous la forme d'une somme de solutions élémentaires du problème de Poisson avec la décomposition donnée dans l'équation A.18.

$$\begin{cases} a_k = \frac{1}{D} \left(f_{1,k} r_2^{-\lambda_k} - f_{2,k} r_1^{-\lambda_k} \right) \\ a_{-k} = \frac{1}{D} \left(-f_{1,k} r_2^{\lambda_k} + f_{2,k} r_1^{\lambda_k} \right) \\ a_q = \frac{f_{2,0} - f_{1,0}}{\ln r_2 - \ln r_1} \end{cases} \quad \text{avec } D \doteq r_1^{\lambda_k} r_2^{-\lambda_k} - r_1^{-\lambda_k} r_2^{\lambda_k} \quad (\text{A.22})$$

La même démarche permet généralement de résoudre les problèmes dans lesquels les conditions aux limites sont séparables en coordonnées (r, θ) (les problèmes liés aux lignes de contact se prêtent bien à ce traitement). On remarque que des conditions aux limites homogènes sur deux bords opposés du domaine permettent de sélectionner un ensemble discret de solutions élémentaires (ici les fonctions ϕ_k). Ces solutions incluent éventuellement des solutions particulières et une série de solutions paramétrées par le paramètre d'ordre λ . Les paramètres λ_k

qui conviennent sont donnés par les racines discrètes d'une fonction Λ qui dépend du problème posé (ici l'équation A.16) dont l'étude est une partie essentielle de la démarche. Ensuite, on remarque que les traces de ces fonctions sur les deux autres bords forment une base, et qu'il suffit de combiner ces fonctions pour obtenir la solution du problème complet.

Concernant l'équation de la chaleur, l'article d'Anderson et Davis [5] illustre parfaitement l'application de cette méthode, et notamment l'étude des racines de la fonction Λ .

A.1.3 Interprétation, découplage des conditions aux limites

La décomposition réalisée dans la partie précédente permet de calculer la solution du problème pour n'importe quelle condition aux limites. L'étude des solutions élémentaires permet de tirer des conclusions générales sur le couplage entre les grandes échelles et les régions proches de la ligne de contact. C'est le taux de croissance ou de décroissance de ces solutions élémentaires (donc la valeur de λ_k) qui détermine le comportement asymptotique de la solution en fonction des conditions aux limites. Poursuivons l'étude de l'exemple précédent...

Si le rapport d'échelles r_2/r_1 est très grand, l'expression des coefficients se simplifie : on a $a_k \simeq f_{2,k} r_2^{-\lambda_k}$ et $a_{-k} \simeq f_{1,k} r_1^{\lambda_k}$. La solution du problème s'écrit alors

$$u(r, \theta) = a_0 + a_q \ln r + \sum_{k>0} \left(f_{1,k} \left(\frac{r}{r_1} \right)^{-\lambda_k} + f_{2,k} \left(\frac{r}{r_2} \right)^{\lambda_k} \right) \cos \lambda_k \theta \quad (\text{A.23})$$

Lorsque l'on s'éloigne des bords du domaine, on a $r/r_1 \gg 1$ et $r/r_2 \ll 1$. Le terme en facteur du cosinus tend donc vers zéro quand on s'éloigne des bords, et ce d'autant plus vite que la puissance λ_k est grande. Donc les termes de hautes fréquences n'influencent pas les régions situées au centre (voir aussi la figure A.2).

Cette constatation est formalisée dans le cadre A.3, où l'on calcule la zone d'influence des conditions aux limites en fonction de la répartition des λ_k . Le résultat du calcul est le suivant : si le terme d'ordre le plus bas dans la décomposition de f_2 est f_{2,k_0} , alors les termes d'ordre supérieur deviennent négligeables (à 10% près) dès que $r < r_2(0.1)^{1/(\lambda_{k_0+1}-\lambda_{k_0})}$. De même aux petites échelles, la condition s'écrit $r > r_1(0.1)^{-1/(\lambda_{k_0+1}-\lambda_{k_0})}$. Ainsi, l'influence des conditions aux limites diminue d'autant plus que l'on s'éloigne du bord (r/r_2 petit), et que les paramètres d'ordre λ_k sont dispersés ($\lambda_{k_0+1} - \lambda_{k_0}$ grand).

Dans l'exemple utilisé précédemment, l'écart entre les paramètres d'ordre est égal à π/θ_i . L'erreur faite en conservant uniquement le terme dominant est inférieure à 10% dès que $r < r_2(0.1)^{\theta_i/\pi}$. Par exemple, pour un angle θ_i de 30 degrés, le terme d'ordre le plus bas devient dominant devant les autres dès que $r < 0.68 r_2$. Pour un angle plus grand (180 degrés), il faut s'éloigner beaucoup plus des bords pour voir dominer le terme principal ($r < 0.1 r_2$).

A.1.4 Orthogonalité des solutions élémentaires

Dans notre exemple, les solutions élémentaires sont de la forme $f_\lambda(r)g_\lambda(\theta)$ où les fonctions g_λ sont de la forme $\cos k\pi\theta/\theta_i$. Ces fonctions sont celles de la théorie de Fourier, et la décomposition A.20 est très simple en raison de la propriété d'orthogonalité de cette famille de fonctions.

La propriété que l'on démontre maintenant généralise ce résultat à une large classe de problèmes où la conductivité thermique varie dans le domaine. On

On suppose pour ce calcul que $f_1 = 0$ et que f_2 est continue sur l'intervalle $[0, \theta_i]$, donc bornée et intégrable. On note $\|u(r, \theta)\| \hat{=} \sqrt{\int_0^{\theta_i} u^2(r, \theta) d\theta}$ la norme L^2 sur l'arc de cercle de rayon r . La norme de f_2 est liée à la décomposition en cosinus par :

$$\|f_2\|^2 = \theta_i \left(f_{2,0}^2 + \frac{1}{2} \sum_{k>0} f_{2,k}^2 \right)$$

On note u_n la somme partielle de la série :

$$u_n(r, \theta) \hat{=} a_0 + a_q \ln r + \sum_{0 < k \leq n} f_{2,k} (r/r_2)^{\lambda_k} \cos \lambda_k \theta$$

On a :

$$\begin{aligned} \|u(r, \theta) - u_n(r, \theta)\|^2 &= \frac{\theta_i^2}{2} \sum_{k>n} f_{2,k}^2 \left(\frac{r}{r_2} \right)^{2\lambda_k} \\ &\leq \frac{\theta_i^2}{2} \left(\frac{r}{r_2} \right)^{2\lambda_{n+1}} \|f_2\|^2 \end{aligned}$$

Supposons maintenant que f_{j,k_0} est le premier coefficient non nul de la décomposition avec $k_0 > 0$. On a

$$\|u(r, \theta)\|^2 \geq \frac{\theta_i^2}{2} \left(\frac{r}{r_2} \right)^{2\lambda_{k_0}} f_{2,k_0}^2$$

L'écart relatif entre la solution exacte et une solution calculée à partir du premier terme de la série s'écrit :

$$\frac{\|u - u_{k_0}\|}{\|u\|} \leq \left(\frac{r}{r_2} \right)^{\lambda_{k_0+1} - \lambda_k} \frac{\|f_2\|}{|f_{2,k_0}|}$$

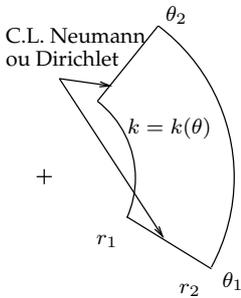
Cette formule permet d'évaluer l'intervalle dans lequel les conditions aux limites influencent significativement la solution. Souvent, le premier terme de la série est de grande amplitude devant les autres, si bien que le rapport $\|f_2\|/|f_{2,k_0}|$ est proche de 1. On interprète alors l'équation comme suit : si on cherche une solution précise à 10% près, dans la région où $(r/r_2)^{\lambda_{k_0+1} - \lambda_k} < 0.1$, le premier terme de la décomposition en solutions élémentaires suffit. Cette condition s'écrit aussi :

$$r < r_2 (0.1)^{\frac{1}{\lambda_{k_0+1} - \lambda_k}}$$

Figure A.3 – Calcul de l'étendue de la zone d'influence des conditions aux limites.

montre que la famille de solutions élémentaires g_{λ_k} est orthogonale pour un certain produit scalaire, ce qui permet de calculer facilement les coefficients a_k de la décomposition en solutions élémentaires pour des problèmes particuliers du type «ligne de contact».

On cherche à résoudre le problème général suivant :



$$\begin{cases} \nabla \cdot (k \nabla u)(r, \theta) = 0, & (r, \theta) \in [r_1, r_2] \times [\theta_1, \theta_2] \\ \begin{cases} u(r, \theta_1) = 0 \text{ ou } \partial_\theta u(r, \theta_1) = 0 \\ u(r, \theta_2) = 0 \text{ ou } \partial_\theta u(r, \theta_2) = 0 \end{cases} & \text{condition de Dirichlet ou Neumann} \\ \text{ou bien } \begin{cases} u(r, \theta_1) = u(r, \theta_2) \\ \partial_\theta u(r, \theta_1) = \partial_\theta u(r, \theta_2) \end{cases} & (u \text{ est périodique en } \theta) \\ k \text{ est strictement positif, } C^1 \text{ par morceaux et ne dépend que de } \theta. \end{cases} \quad (\text{A.29})$$

Le modèle de ligne de contact à deux phases est une application particulière où k prend deux valeurs différentes sur le domaine (paroi et liquide), et où les conditions sont respectivement une condition de Dirichlet à l'interface liquide-vapeur et une condition de Neumann à l'interface solide-vapeur. Quant au modèle à trois phases, k prend trois valeurs différentes et la solution est périodique, de période 2π .

Supposons que $u(r, \theta)$ se décompose en variables séparées sous la forme $u(r, \theta) = f(r)g(\theta)$. En coordonnées cylindriques, l'équation $\nabla \cdot (k \nabla u)(r, \theta) = 0$ s'écrit :

$$k \left(\partial_{rr} u + \frac{1}{r} \partial_r u \right) + \frac{1}{r^2} \partial_\theta (k \partial_\theta u) = 0 \Leftrightarrow \frac{r^2 \partial_{rr} f + r \partial_r f}{f} = \frac{1}{k} \frac{\partial_\theta (k \partial_\theta g)}{g} = \beta \quad (\text{A.30})$$

L'équivalence est justifiée dans la mesure où ni k , ni f , ni g ne s'annulent. On l'étend par passage à la limite dans le cas où f ou g s'annule. De même que précédemment, le membre de gauche ne dépend que de r et le membre de droite de θ uniquement. Le terme β ne dépend donc ni de r ni de θ . Considérons les

fonctions g_β solutions de l'équation différentielle

$$\partial_\theta (k \partial_\theta g_\beta) = \beta k g \quad (\text{A.31})$$

et vérifiant les conditions aux limites du problème A.29. Considérons deux fonctions g_1 et g_2 associées respectivement à β_1 et β_2 . On a les égalités suivantes :

$$\int_{\theta_1}^{\theta_2} g_1 \partial_\theta (k \partial_\theta g_2) - g_2 \partial_\theta (k \partial_\theta g_1) d\theta \quad (\text{A.32})$$

$$= (\beta_1 - \beta_2) \int_{\theta_1}^{\theta_2} k g_1 g_2 d\theta \quad (\text{avec l'équation A.31}) \quad (\text{A.33})$$

$$= \underbrace{[k g_1 \partial_\theta g_2 - k g_2 \partial_\theta g_1]_{\theta_1}^{\theta_2}}_{= 0 \text{ avec les conditions aux limites}} - \int_{\theta_1}^{\theta_2} \underbrace{k \partial_\theta g_1 \partial_\theta g_2 - k \partial_\theta g_2 \partial_\theta g_1}_{= 0} d\theta \quad (\text{A.34})$$

Ainsi, si β_1 est différent de β_2 , alors $\int_{\theta_1}^{\theta_2} k g_1 g_2 d\theta = 0$. Comme k est strictement positif sur un compact, cette intégrale définit un produit scalaire sur l'ensemble des fonctions $L^2([\theta_1, \theta_2])$, et la norme associée à ce produit scalaire est équivalente à la norme L^2 . De plus, les solutions élémentaires g_β du problème sont orthogonales pour ce produit scalaire. On pose les notations suivantes :

$$(g_1, g_2)_k \hat{=} \int_{\theta_1}^{\theta_2} k(\theta) g_1(\theta) g_2(\theta) d\theta, \quad \text{et} \quad \|g\|_k \hat{=} \sqrt{(g, g)_k} \quad (\text{A.35})$$

A.1.5 Conclusion sur le problème de Poisson

Cette étude permet de tirer les conclusions suivantes, valables en général pour l'équation de Poisson et du bilaplacien lorsque les conditions aux limites en θ sont homogènes :

- Lorsque le rapport entre l'échelle microscopique r_1 et l'échelle macroscopique r_2 est suffisamment grand, il existe une région intermédiaire où la solution est bien décrite par le terme d'ordre le plus bas des conditions aux limites dans la décomposition en solutions élémentaires.
- La région où les termes d'ordre supérieurs doivent être pris en compte est essentiellement dictée par la différence entre les paramètres d'ordres $\lambda_k - \lambda_{k_0}$. Plus cette différence est grande, moins les conditions aux limites pénètrent profondément à l'intérieur du domaine.
- Généralement, les paramètres λ_k sont d'autant plus éloignés les uns des autres que l'angle d'ouverture θ_i est petit.
- Les solutions élémentaires associées aux λ_k sont orthogonales pour le produit scalaire $(\cdot, \cdot)_k$. On peut donc obtenir directement la décomposition de la solution d'un problème en solutions élémentaires par projection des conditions aux limites à l'aide de ce produit scalaire.

A.2 Transfert de chaleur conductif près des lignes de contact

Dans les deux parties suivantes, on calcule le champ de température et le flux de chaleur près d'une ligne de contact en supposant que l'interface liquide-vapeur est à température imposée égale à T_{sat} . Dans la première partie, on calcule le flux de chaleur en négligeant le transfert de chaleur dans la vapeur. Dans la deuxième, le même calcul est mené en supposant que la vapeur a une conductivité thermique non nulle. Ces résultats sont utilisés dans le chapitre 2.2.

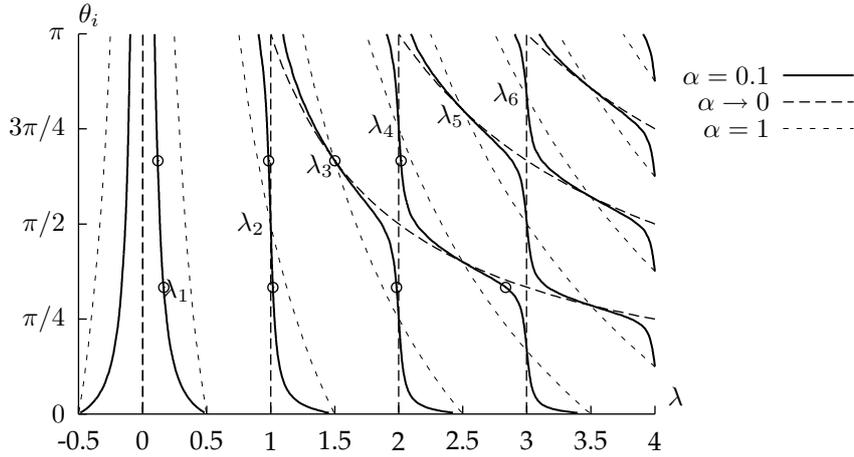
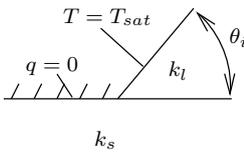


Figure A.4 – Racines de la fonction Λ du modèle à deux phases. L'ensemble des racines est symétrique par rapport à $\lambda = 0$. Les trois réseaux de courbes correspondent au cas typique $k_l/k_s = 0.1$, au cas limite où la conductivité de la paroi est très grande devant celle du liquide et au cas où les conductivités sont égales. Contrairement à l'exemple de l'annexe A, l'écart entre λ_1 et λ_2 ne varie pas beaucoup avec θ_i . Les cercles situent les paramètres correspondant aux solutions représentées sur la figure A.5.

A.2.1 Modèle à deux phases : conductivité thermique de la vapeur négligeable

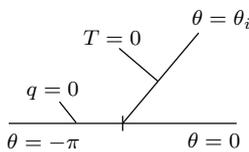


Le problème résolu est représenté ci-contre (ce problème est défini plus en détail en 2.2.2). On résout l'équation suivante, qui décrit le transfert de chaleur dans le domaine conductif :

$$\begin{aligned} \forall (r, \theta) \in [r_{int}, r_{ext}] \times [-\pi, \theta_i], \quad \nabla \cdot (k \nabla T) &= 0, \\ \theta = -\pi &\Rightarrow \partial_\theta T = 0, \\ \theta = \theta_i &\Rightarrow T = T_{sat} \end{aligned} \tag{A.36}$$

Notons qu'Anderson et Davis [5] ont réalisé une étude exhaustive des solutions de ce problème lorsque l'angle d'ouverture du coin solide est quelconque (et non égal à π comme ici). Les outils mathématiques qu'ils utilisent sont très similaires à ceux que nous mettons en œuvre ici.

Solutions élémentaires



Pour alléger l'écriture et sans nuire à la généralité du calcul, on résout le problème pour $T_{sat} = 0$. La technique utilisée consiste à chercher les solutions élémentaires de l'équation de Poisson en variables séparées et en coordonnées polaires, c'est-à-dire sous la forme $T(r, \theta) = f(r) g(\theta)$.

Par combinaison linéaire des solutions élémentaires de l'équation de Poisson homogène (voir A.1.1), on cherche à construire des solutions qui vérifient cette équation sur chacun des domaines solide et liquide ainsi que les conditions aux limites en $\theta = -\pi$, en $\theta = \theta_i$ et $\theta = 0$ (cette dernière est simplement la continuité de la température et du flux entre les deux domaines). Les solutions sont recherchées sous la forme suivante :

$$f(r) = r^\lambda, \quad g(\theta) = \begin{cases} A_l \sin \lambda \theta + B_l \cos \lambda \theta & 0 < \theta < \theta_i \\ A_s \sin \lambda \theta + B_s \cos \lambda \theta & -\pi < \theta < 0 \end{cases} \tag{A.37}$$

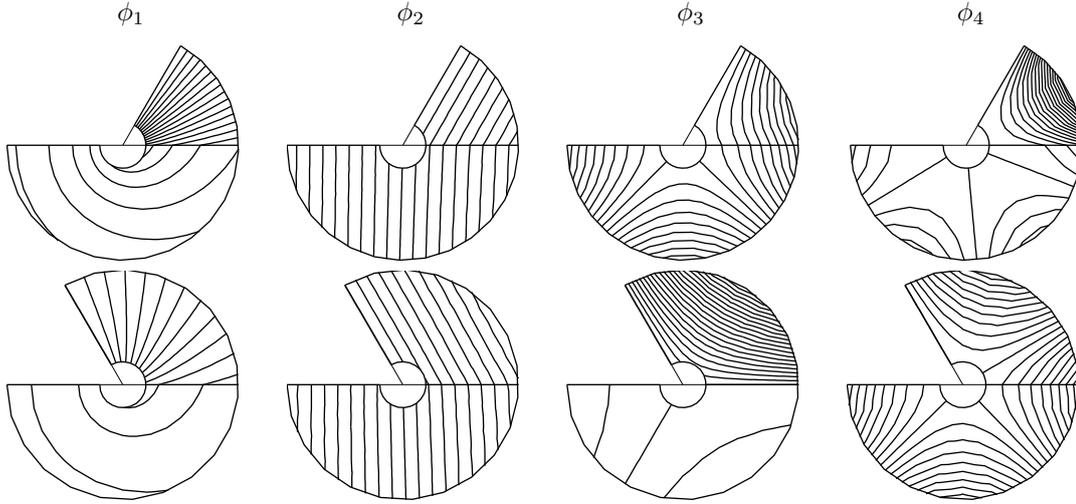


Figure A.5 – Représentation des quatre premières solutions élémentaires du modèle à deux phases (isovaleurs du champ de température), pour $k_l/k_s = 0.1$ et des angles $\theta_i = 60^\circ$ (en haut) et 120° (en bas, voir les cercles sur la figure A.4 pour localiser les paramètres correspondants). La n -ième solution élémentaire s'annule exactement n fois sur le bord (y compris le zéro en $\theta = \theta_i$). Le transfert de chaleur vers les petites échelles se fait par la fonction ϕ_1 , seule retenue dans les modèles courants. L'analogie du mode ϕ_2 avec la réfraction d'une onde est frappante...

Les combinaisons linéaires des autres solutions élémentaires ne permettent pas de vérifier les conditions aux limites. Les conditions aux limites s'écrivent :

$$\forall r, T(r, \theta_i) = 0 \Leftrightarrow g(\theta_i) = 0 \quad (\text{A.38})$$

$$\Leftrightarrow A_l \sin \lambda \theta_i + B_l \cos \lambda \theta_i = 0 \quad (\text{A.39})$$

$$\forall r, q(r, -\pi) = 0 \Leftrightarrow g'(-\pi) = 0 \quad (\text{A.40})$$

$$\Leftrightarrow A_s \cos \lambda \pi + B_s \sin \lambda \pi = 0 \quad (\text{A.41})$$

De plus, en $\theta = 0$ la température T et le flux q sont continus :

$$\forall r, T(r, 0^-) = T(r, 0^+) \Leftrightarrow B_l = B_s \quad (\text{A.42})$$

$$\forall r, q(r, 0^-) = q(r, 0^+) \Leftrightarrow k_l g'(0^-) = k_s g'(0^+) \quad (\text{A.43})$$

$$\Leftrightarrow k_l A_l = k_s A_s \quad (\text{A.44})$$

Les relations A.39, A.41, A.42 et A.44 impliquent que le champ de température est de la forme $T(r, \theta) = T_0 r^\lambda g_\lambda(\theta)$, avec

$$g_\lambda(\theta) = \begin{cases} \cos \lambda \pi (\sin \lambda \theta_i \cos \lambda \theta - \cos \lambda \theta_i \sin \lambda \theta) & 0 < \theta < \theta_i \\ \sin \lambda \theta_i (\cos \lambda \pi \cos \lambda \theta - \sin \lambda \pi \sin \lambda \theta) & -\pi < \theta < 0 \end{cases} \quad (\text{A.45})$$

et que λ est une racine de la fonction Λ définie par :

$$\Lambda(\lambda, \theta_i) \hat{=} \text{tg } \lambda \theta_i \text{ tg } \lambda \pi - \frac{k_l}{k_s} \quad (\text{A.46})$$

Solution générale du problème, conditions aux limites quelconques

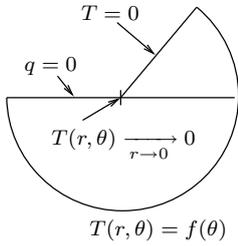
La fonction A.46 possède une infinité de racines $\{\lambda_k, k \neq 0\}$ qui dépendent à la fois de l'angle θ_i et du rapport k_l/k_s . Ces racines sont représentées sur la figure A.4 en fonction de l'angle θ_i . À chacune correspond une solution élémentaire ϕ_k du problème qui vérifie les conditions aux limites. Les premières solutions élémentaires sont représentées sur la figure A.5. La forme générale de la

solution est une combinaison linéaire quelconque des solutions élémentaires :

$$T(r, \theta) = \sum_{k \neq 0} a_k \phi_k(r, \theta), \quad \text{avec} \quad \phi_k(r, \theta) \doteq r^{\lambda_k} g_{\lambda_k}(\theta) \quad (\text{A.47})$$

En A.1.2, on a montré comment construire la solution d'un problème particulier où toutes les conditions aux limites sont imposées.

Le problème A.36 n'est pas bien posé. Sa fermeture nécessite une condition aux limites en $r = r_{int}$ et une condition aux limites en $r = r_{ext}$. On montre en A.1.3 que lorsque le rapport r_{ext}/r_{int} entre les échelles macroscopiques et microscopiques est grand, les coefficients $\{a_k, k < 0\}$ gouvernent le comportement à petite échelle, tandis que les coefficients $\{a_k, k > 0\}$ gouvernent le comportement à grande échelle. Pour fermer le problème, on ajoute les conditions suivantes. La première traduit l'absence de source de chaleur ponctuelle à la ligne de contact. La deuxième condition aux limites permet de coupler la ligne de contact à un problème extérieur arbitraire.



$$\begin{cases} \lim_{r \rightarrow 0} T(r, \theta) = 0 \\ T(r_{ext}, \theta) = f(\theta) \end{cases} \quad -\pi < \theta < \theta_i \quad (\text{A.48})$$

La première condition implique $\forall k < 0, a_k = 0$. Si la paroi est surchauffée en moyenne, le premier coefficient positif non nul est a_1 . Par ailleurs, la figure A.4 montre que $\lambda_2 - \lambda_1$ est proche de 1. D'après le résultat énoncé en A.1.3, les conditions aux limites ont donc une influence significative jusqu'à un rayon égal à 1/10 du rayon où la condition aux limites est imposée. L'orthogonalité des fonctions ϕ_k , démontrée en A.1.4, permet de fournir la valeur explicite des coefficients a_k en fonction de f :

$$T(r, \theta) = \sum_{k \neq 0} a_k \phi_k(r, \theta), \quad a_k = \frac{(f, g_{\lambda_k})_k}{r_{ext}^{-\lambda_k} (g_{\lambda_k}, g_{\lambda_k})_k} \quad (\text{A.49})$$

Approximation du paramètre d'ordre de la première solution élémentaire

Dans les régions intermédiaires $10 r_{int} < r < 0.1 r_{ext}$, la composante $a_1 \phi_1$ domine la solution. Le calcul du flux de chaleur à la ligne de contact utilise uniquement le premier terme de la série, car cette solution est très précise au cœur du domaine conducteur et permet de caractériser le couplage entre la ligne de contact et le problème extérieur par le seul paramètre a_1 . Cette simplification est utilisée dans tous les travaux que nous avons rencontrés sur les lignes de contact.

Le mode dominant ϕ_1 est caractérisé par la valeur de λ_1 , plus petite racine positive de la fonction Λ . Nous aurons besoin d'une expression analytique explicite de λ_1 pour calculer la variation de température le long de la paroi et le flux de chaleur. La première formule proposée est classique, contrairement aux deux autres. La troisième formule, construite à la façon d'une corrélation, est utile pour mettre en œuvre le modèle dans un code avec une gamme de paramètres élargie.

Si le rapport $k_l/(k_s \theta_i)$ tend vers zéro, la linéarisation de la fonction Λ conduit à l'approximation suivante :

$$\boxed{\frac{k_l}{k_s \theta_i} \ll 1 \Rightarrow \lambda_1 \sim \sqrt{\frac{k_l}{k_s \theta_i \pi}}} \quad (\text{A.50})$$

Cette formule n'est cependant pas valable aux petits angles pour lesquels on en propose cet autre équivalent :

$$\frac{k_l}{k_s \theta_i} \gg 1 \Rightarrow \lambda_1 \sim \left(2 + \frac{2k_s \theta_i}{k_l \pi}\right)^{-1} \quad (\text{A.51})$$

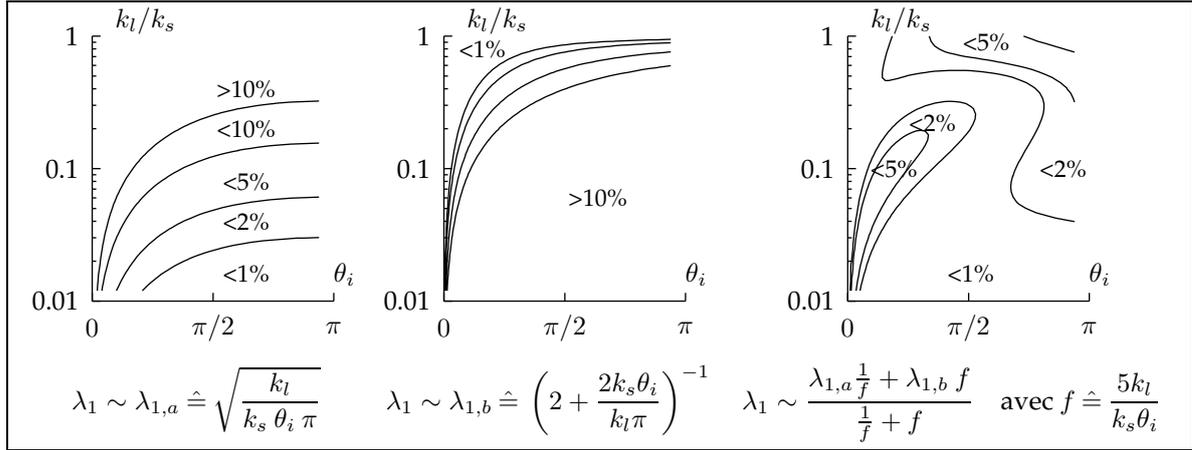


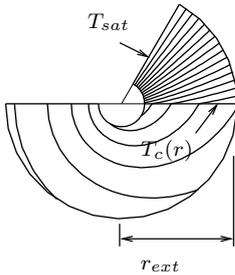
Figure A.6 – Étude de la précision des formules approchées de λ_1 pour le transfert de chaleur à la ligne de contact (on représente l'erreur relative entre l'approximation proposée et la valeur exacte). La première formule est utilisée dans de nombreux travaux pour décrire la ligne de contact et est valable lorsque $k_l/(k_s \theta_i) \ll 1$, la deuxième dans le cas inverse, et la troisième est une corrélation bâtie sur les deux premières qui donne un bon niveau de précision sur toute la gamme de paramètres.

Sur la figure A.6 sont représentés les écarts relatifs entre ces approximations et la valeur exacte, ainsi qu'une troisième formule approchée qui donne une bonne approximation sur toute la gamme de valeurs $\theta_i \in [0, \pi]$ et $k_l/k_s \in [0, 1]$.

Définition de la température caractéristique

De l'équation A.45, on déduit l'expression simplifiée du champ de température dans la paroi en tenant compte uniquement du terme de premier ordre (pour la clarté de l'exposé on introduit à nouveau la température de saturation T_{sat} dans les expressions) :

$$T(r, \theta) = \begin{cases} T_{sat} + a_1 r^{\lambda_1} \sin \lambda_1 \theta_i \cos \lambda_1 (\pi + \theta), & -\pi < \theta < 0 \\ T_{sat} + a_1 r^{\lambda_1} \cos \lambda_1 \pi \sin \lambda_1 (\theta_i - \theta), & 0 < \theta < \theta_i \end{cases} \quad (\text{A.52})$$



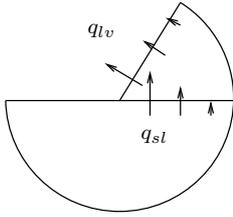
Lorsque λ_1 est petit (paroi de forte conductivité thermique par rapport au liquide), $\cos \lambda_1 (\pi + \theta)$ est proche de 1 et la température ne dépend que du rayon r dans la paroi. Dans ce cas, il est pertinent de définir une température caractéristique de la paroi égale à cette unique température. En général, la température varie un peu dans la paroi en fonction de θ (de l'ordre de 10 à 50% entre l'interface solide-vapeur et l'interface solide-liquide). Quelle température caractéristique de la paroi choisir dans ce cas ? Une moyenne de température le long de l'arc de rayon r semble un choix judicieux. La définition du coefficient a_1 , qui n'est autre qu'une moyenne pondérée de la température à la distance r_{ext} , fournit une définition idéale, car la température calculée de cette façon caractérise le champ de température à petite échelle quelle que soit la condition aux limites imposée (en particulier si celle-ci contient des modes λ_k supérieurs à 1). Les expressions obtenues sont cependant plus lourdes à manipuler. On lui préfère donc la définition suivante, plus intuitive : on appelle température caractéristique de la paroi à la distance r_{ext} , notée $T_c(r_{ext})$, la température de la paroi à l'interface solide-liquide. La

température dans le modèle à deux phases s'écrit alors :

$$\begin{aligned} -\pi < \theta < 0 &\Rightarrow T(r, \theta) = T_{sat} + (T_c(r_{ext}) - T_{sat}) \left(\frac{r}{r_{ext}} \right)^{\lambda_1} \frac{\cos \lambda_1(\pi + \theta)}{\cos \lambda_1 \pi} \\ 0 < \theta < \theta_i &\Rightarrow T(r, \theta) = T_{sat} + (T_c(r_{ext}) - T_{sat}) \left(\frac{r}{r_{ext}} \right)^{\lambda_1} \frac{\sin \lambda_1(\theta_i - \theta)}{\sin \lambda_1 \theta_i} \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

Expression du flux de chaleur aux interfaces

Dans le modèle à deux phases, le flux de chaleur dans la vapeur est supposé négligeable. Le flux de chaleur à l'interface solide-vapeur est donc nul. Le flux de chaleur à l'interface solide-liquide vers le liquide s'écrit :

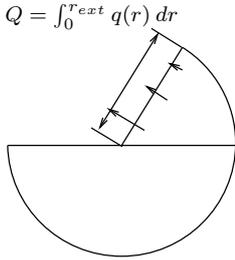


$$q_{sl}(r) = -\frac{k_s}{r} \partial_\theta T(r, \theta) = (T_c(r_{ext}) - T_{sat}) \frac{r^{\lambda_1-1}}{r_{ext}^{\lambda_1}} \frac{k_l \lambda_1}{\text{tg } \lambda_1 \theta_i} \quad (\text{A.54})$$

Le flux de chaleur à l'interface liquide-vapeur vers la vapeur (flux correspondant à l'évaporation) s'écrit :

$$q_{lv}(r) = (T_c(r_{ext}) - T_{sat}) \frac{r^{\lambda_1-1}}{r_{ext}^{\lambda_1}} \frac{k_l \lambda_1}{\sin \lambda_1 \theta_i} \quad (\text{A.55})$$

Ces expressions mettent en évidence la singularité du flux de chaleur à la ligne de contact. Comme λ_1 est toujours inférieur à 1/2 (voir figure A.4), la puissance de r , $\lambda_1 - 1$ est toujours inférieure à -0.5 et –quand le rapport k_l/k_s diminue– peut tendre vers -1 . Le flux de chaleur, bien que singulier, reste intégrable. Le flux total d'évaporation entre l'échelle intérieure r_{int} et l'échelle de couplage r_{ext} par unité de longueur de ligne de contact s'écrit :



$$\int_{r_{int}}^{r_{ext}} q(r) dr = (T_c(r_{ext}) - T_{sat}) \frac{k_l}{\sin \lambda_1 \theta_i} \left(1 - \frac{r_{int}}{r_{ext}} \right)^{\lambda_1} \quad (\text{A.56})$$

Formule approchée, transfert unidimensionnel

Dans le domaine de validité de l'approximation A.50, λ_1 est petit devant 1. En écrivant $\text{tg } \lambda_1 \theta_i \sim \lambda_1 \theta_i$ et $\sin \lambda_1 \theta_i \sim \lambda_1 \theta_i$, on obtient une expression simplifiée du flux de chaleur local :

$$q_{lv}(r) \simeq q_{sl}(r) \simeq (T_c(r_{ext}) - T_{sat}) \left(\frac{r}{r_{ext}} \right)^{\lambda_1} \frac{k_l}{r \theta_i} \quad (\text{A.57})$$

Or $(T_c(r_{ext}) - T_{sat})(r/r_{ext})^{\lambda_1}$ est la température de la paroi, et $r \theta_i$ est la longueur de l'arc de cercle de rayon r et d'angle θ_i . Cette approximation correspond à un champ de température linéaire en θ dans le liquide. On peut l'assimiler à une approximation de transfert de chaleur unidimensionnel, et on remarque qu'elle reste valable même aux grands angles pourvu que le rapport k_l/k_s soit petit. Dans ce cas, le flux de chaleur arrive à la ligne de contact majoritairement par le solide et le flux de chaleur apporté par le liquide est négligeable.

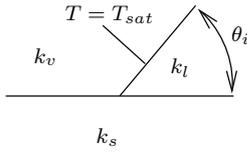
Le flux Q par unité de longueur de ligne de contact et intégré entre r_{int} et r_{ext} s'écrit alors :

$$\int_{r_{int}}^{r_{ext}} q(r) dr \simeq (T_c(r_{ext}) - T_{sat}) \sqrt{\frac{k_s k_l \pi}{\theta_i}} \left(1 - \frac{r_{int}}{r_{ext}} \right)^{\lambda_1} \quad (\text{A.58})$$

A.2.2 Modèle à trois phases : prise en compte de la conductivité de la vapeur

Description du modèle

Le modèle précédent ne tient pas compte du transfert de chaleur à travers la vapeur. Comme la plupart des modèles existants, il est adapté à de basses pressions (par rapport à la pression critique des fluides), et la conductivité thermique de la vapeur est alors très inférieure à celle du liquide. À haute pression, un flux de chaleur non négligeable peut cependant traverser la vapeur, surtout si l'angle de contact est grand. Ceci motive une étude du transfert de chaleur dans un modèle à trois phases.



Le problème étudié est représenté ci-contre. On suppose que l'interface liquide-vapeur est à température de saturation et que le champ de température est gouverné par la loi de Fourier. La température et le flux de chaleur sont continus aux interfaces solide-vapeur et solide-liquide.

Solutions élémentaires

On résout le problème pour $T_{sat} = 0$, et on cherche des solutions élémentaires sous la forme $T(r, \theta) = f(r)g(\theta)$. Cette fois, la fonction g prend trois formes différentes, une dans chaque phase :

$$f(r) = r^\lambda, \quad g(\theta) = \begin{cases} A_l \sin \lambda \theta + B_l \cos \lambda \theta & 0 < \theta < \theta_i \\ A_v \sin \lambda \theta + B_v \cos \lambda \theta & \theta_i < \theta < \pi \\ A_s \sin \lambda \theta + B_s \cos \lambda \theta & -\pi < \theta < 0 \end{cases} \quad (\text{A.59})$$

Les coefficients sont liés par la condition aux limites et les conditions de continuité aux interfaces :

$$T_l(\theta = \theta_i) = 0 \quad \Rightarrow \quad A_l \sin \lambda \theta_i + B_l \cos \lambda \theta_i = 0 \quad (\text{A.60})$$

$$T_v(\theta = \theta_i) = 0 \quad \Rightarrow \quad A_v \sin \lambda \theta_i + B_v \cos \lambda \theta_i = 0 \quad (\text{A.61})$$

$$q_s(\theta = 0, r) = q_l(\theta = 0, r) \quad \Rightarrow \quad k_s A_s = k_l A_l \quad (\text{A.62})$$

$$T_s(\theta = 0, r) = T_l(\theta = 0, r) \quad \Rightarrow \quad B_s = B_l \quad (\text{A.63})$$

$$q_s(\theta = -\pi, r) = q_v(\theta = \pi, r) \quad \Rightarrow \quad k_s A_s \cos \lambda \pi + k_s B_s \sin \lambda \pi = k_v A_v \cos \lambda \pi - k_v B_v \sin \lambda \pi \quad (\text{A.64})$$

$$T_s(\theta = -\pi, r) = T_v(\theta = 0, r) \quad \Rightarrow \quad -A_s \sin \lambda \pi + B_s \cos \lambda \pi = A_v \sin \lambda \pi + B_v \cos \lambda \pi \quad (\text{A.65})$$

On forme ainsi un système d'équations linéaire par rapport aux inconnues $A_{s,l,v}$ et $B_{s,l,v}$. Ce système de six équations à six inconnues n'admet une solution différente de la solution nulle que si son déterminant est nul, ce qui se traduit par l'équation suivante :

$$\Lambda(\lambda) = 0, \quad \text{avec} \quad (\text{A.66})$$

$$\Lambda(\lambda) \doteq k_s(k_v + k_s) \sin^2 \lambda \theta_i \sin \lambda \pi \cos \lambda \pi + (k_l k_v - k_s^2) \sin \lambda \theta_i \cos \lambda \theta_i \sin^2 \lambda \pi \\ + k_s(k_v - k_l) \sin \lambda \theta_i \cos \lambda \theta_i \cos^2 \lambda \pi + k_l(k_s + k_v) \cos^2 \lambda \theta_i \cos \lambda \pi \sin \lambda \pi$$

Interprétation

La figure A.7 représente les racines de cette équation en fonction de θ_i pour une valeur typique des conductivités thermiques. Le premier mode physiquement acceptable (plus petite valeur strictement positive de λ) est peu différent de

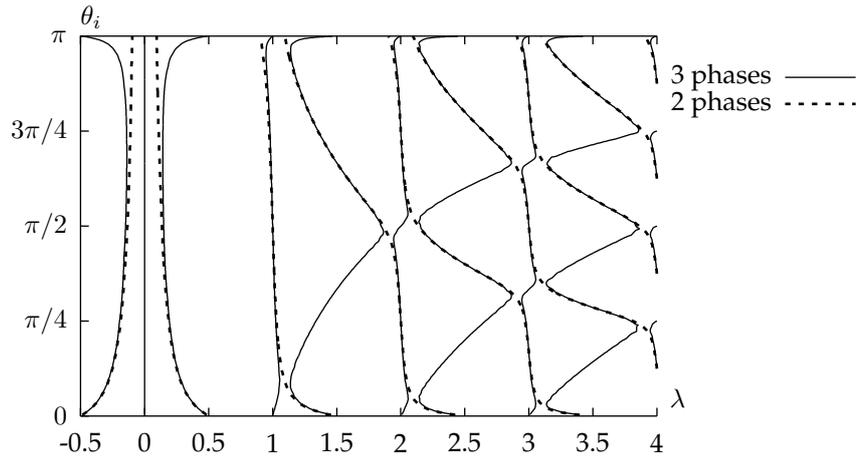


Figure A.7 – Racines de la fonction Λ du modèle à trois phases, avec $k_s = 1$, $k_l = 0.1$ et $k_v = 0.02$ (pour comparaison, on a représenté en pointillés les courbes de modèle à deux phases correspondant). Ce rapport de conductivité est obtenu pour de l'eau à 140 bar environ. On remarque la présence pour les petits angles d'une série de solutions supplémentaires. Notamment, dans ce modèle $\lambda = 0$ est toujours solution. Le champ de température correspondant à ce mode n'intervient cependant pas en réalité car le flux de chaleur n'est pas intégrable.

celui du modèle à deux phases aux petits angles. Au voisinage de $\theta_i = \pi$ et au voisinage de $\theta_i = 0$ les répartitions des modes λ_i sont très similaires. De fait, pour un angle de contact proche de π , la plus grande partie du flux de chaleur passe par la vapeur au lieu de passer par le liquide, et ce malgré la faible conductivité thermique de cette dernière.

Annexe **B**

Étude de l'écoulement de fluide près des lignes de contact, solutions analytiques et numériques du problème de Stokes et de Navier-Stokes

B.1 Étude des solutions de l'équation de Stokes stationnaire

B.1.1 Équation de la rotation

Si la viscosité du fluide est constante, l'équation de Stokes stationnaire s'écrit :

$$\mu \Delta \mathbf{v} - \nabla P = 0 \quad (\text{B.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (\text{B.2})$$

En deux dimensions, si un champ de vecteur $\mathbf{v}(x, y)$ est à divergence nulle, alors il existe une fonction scalaire $\psi(x, y)$ appelée fonction de courant, telle que

$$\mathbf{v}_x = -\partial_y \psi \quad (\text{B.3})$$

$$\mathbf{v}_y = \partial_x \psi \quad (\text{B.4})$$

Le système d'équations de Stokes est alors équivalent à l'équation de la rotation, obtenue en calculant le rotationnel de l'équation B.1 :

$$\nabla^4 \psi = 0 \quad (\text{B.5})$$

L'opérateur ∇^4 , appelé bilaplacien, possède des propriétés semblables à celles du laplacien étudié dans l'annexe précédente. Les développements qui suivent ont pour but de rappeler les propriétés utiles des solutions de cette équation dans une géométrie de type ligne de contact.

B.1.2 Solutions élémentaires de l'équation du bilaplacien

On cherche les solutions régulières de l'équation suivante en coordonnées cylindriques :

$$\Delta(\Delta u) = 0 \quad (\text{B.6})$$

que l'on peut décomposer comme suit :

$$\Delta u = v, \quad \text{avec } \Delta v = 0 \quad (\text{B.7})$$

Les solutions de l'équation B.6 s'écrivent comme la somme d'une solution de l'équation de Poisson homogène $\Delta u = 0$ et d'une solution particulière de l'équation $\Delta u = v$ où le second membre v est une solution de l'équation de Poisson homogène. Utilisons les fonctions de base obtenues dans la partie précédente et cherchons pour chacune une solution particulière. On peut par exemple choisir les solutions suivantes :

$$v = 1 \rightarrow u = \frac{1}{4}r^2 \quad (\text{B.8})$$

$$v = \theta \rightarrow u = \frac{1}{4}r^2 \theta \quad (\text{B.9})$$

$$v = \ln r \rightarrow u = \frac{1}{4}(\ln r - 1) r^2 \quad (\text{B.10})$$

$$v = \theta \ln r \rightarrow u = \frac{1}{4}(\ln r - 1) r^2 \theta \quad (\text{B.11})$$

$$v = r^\lambda (a \sin \lambda \theta + b \cos \lambda \theta) \rightarrow u = \begin{cases} \frac{1}{4\lambda+4} r^{\lambda+2} (a \sin \lambda \theta + b \cos \lambda \theta), & \lambda \neq -1 \\ \frac{1}{2} r \theta (a \cos \theta + b \sin \theta), & \lambda = -1 \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

$$v = e^{\lambda \theta} (a \sin(\lambda \ln r) + b \cos(\lambda \ln r)) \rightarrow u = \frac{1}{4 + 4\lambda^2} r^2 e^{\lambda \theta} \begin{pmatrix} (a + \lambda b) \sin(\lambda \ln r) \\ + (b - \lambda a) \cos(\lambda \ln r) \end{pmatrix} \quad (\text{B.13})$$

Ainsi, les solutions élémentaires de l'équation biharmonique $\Delta^2 u = 0$ s'écrivent sous la forme suivante :

$$u(r, \theta) = \begin{cases} a \\ a \theta \\ a r^2 \\ a r^2 \theta \\ a \ln r \\ a (\ln r - 1) r^2 \\ a \theta \ln r \\ a \theta (\ln r - 1) r^2 \\ r^\lambda (a \sin \lambda \theta + b \cos \lambda \theta) & \lambda \neq 0 \\ r^{\lambda+2} (a \sin \lambda \theta + b \cos \lambda \theta) & \lambda \neq 0, \lambda \neq -1 \\ e^{\lambda \theta} (a \sin(\lambda \ln r) + b \cos(\lambda \ln r)) & \lambda \neq 0 \\ r^2 e^{\lambda \theta} (a \sin(\lambda \ln r) + b \cos(\lambda \ln r)) & \lambda \neq 0 \end{cases} \quad \text{avec } (a, b) \in \mathbb{R}^2 \quad (\text{B.14})$$

On peut remarquer que les solutions en $e^{\lambda \theta}$ peuvent être obtenues aussi par combinaison des solutions en r^λ pour des valeurs complexes de λ (on utilisera cette propriété par la suite).

Nous aurons besoin d'une expression de la pression pour tracer les graphiques et calculer la courbure. Si la solution est de la forme $\psi(r, \theta) = r^\lambda g(\theta)$,

on obtient l'expression de la pression comme suit :

$$\partial_r P = (\nabla P)_r = \mu (\Delta \mathbf{v})_r \quad (\text{B.15})$$

$$= \mu \left(\partial_r \left(\frac{1}{r} \partial_r (r \mathbf{v}_r) \right) + \frac{1}{r^2} \partial_{\theta\theta} \mathbf{v}_r - \frac{2}{r^2} \partial_\theta \mathbf{v}_\theta \right) \quad (\text{B.16})$$

$$= \mu r^{\lambda-3} \left(\lambda^2 g'(\theta) + g^{(3)}(\theta) \right) \quad (\text{B.17})$$

$$\partial_\theta P = r (\nabla P)_\theta = r \mu (\Delta \mathbf{v})_\theta \quad (\text{B.18})$$

$$= r \mu \left(\partial_r \left(\frac{1}{r} \partial_r (r \mathbf{v}_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \partial_{\theta\theta} \mathbf{v}_\theta + \frac{2}{r^2} \partial_\theta \mathbf{v}_r \right) \quad (\text{B.19})$$

$$= \mu r^{\lambda-2} \left(\lambda^2 (\lambda - 2) g(\theta) + (\lambda - 2) g^{(2)}(\theta) \right) \quad (\text{B.20})$$

Or, toujours avec $\psi(r, \theta) = r^\lambda g(\theta)$, le bilaplacien de ψ s'écrit comme suit :

$$\Delta^2(\psi) = \Delta \left(\frac{1}{r} g(\theta) (f'(r) + r f''(r)) + \frac{1}{r^2} f(r) g''(\theta) \right) \quad (\text{B.21})$$

$$= r^{\lambda-4} \left(\lambda^2 (2 - \lambda)^2 g(\theta) + (2 - \lambda)^2 g^{(2)}(\theta) + \lambda^2 g^{(2)}(\theta) + g^{(4)}(\theta) \right) \quad (\text{B.22})$$

On peut dès lors vérifier que la fonction

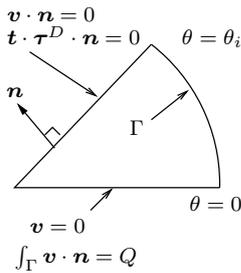
$$P(r, \theta) \doteq \mu \frac{r^{\lambda-2}}{\lambda-2} \left(\lambda^2 g'(\theta) + g^{(3)}(\theta) \right) \quad (\text{B.23})$$

vérifie les équations B.17 et B.20. La première est évidente, la deuxième se déduit de l'expression B.22 si l'on écrit que $\Delta^2 \psi = 0$. Cette fonction P est donc un représentant de la pression associée au champ ψ .

B.2 Application à la géométrie de ligne de contact

On cherche maintenant à construire des solutions de l'équation de la rotation pour le problème particulier de la ligne de contact. Ces solutions ont alimenté une grande quantité de publications théoriques et on n'apporte ici qu'une synthèse des résultats les plus intéressants.

Dans un premier temps, on cherche la forme de l'écoulement près d'une ligne de contact en négligeant la viscosité de la vapeur. Par ailleurs, on considère uniquement une interface liquide-vapeur plane, avec un angle de contact θ_i . La paroi solide sera modélisée par une condition aux limites d'adhérence et l'interface liquide-vapeur par une condition de contrainte tangentielle nulle. L'évaporation est modélisée par une singularité de flux à l'origine, c'est-à-dire un puits ou une source à débit imposé.



On note ψ la fonction de courant solution du problème de Stokes. Les conditions aux limites se traduisent de la façon suivante :

$$\mathbf{v}_r(r, \theta = 0) = 0 \Rightarrow \partial_\theta \psi = 0 \quad (\text{B.24})$$

$$\mathbf{v}_\theta(r, \theta = 0) = 0 \Rightarrow \partial_r \psi = 0 \quad (\text{B.25})$$

$$\partial_\theta \mathbf{v}_r(r, \theta = \theta_i) = 0 \Rightarrow \partial_{\theta\theta} \psi = 0 \quad (\text{B.26})$$

$$\mathbf{v}_\theta(r, \theta = \theta_i) = 0 \Rightarrow \partial_r \psi = 0 \quad (\text{B.27})$$

Les équations B.25 et B.27 impliquent que la fonction ψ est constante sur les deux bords $\theta = 0$ et $\theta = \theta_i$. Or, nos solutions élémentaires de l'équation s'écrivent sous la forme $u(t, \theta) = f(r)g(\theta)$. On a donc :

$$\begin{cases} \text{soit } f(r) = cte, \\ \text{soit } g(0) = 0 \text{ et } g(\theta_i) = 0 \end{cases} \quad (\text{B.28})$$

B.2.1 Solution élémentaire pour une source à l'origine

Il n'y a que deux solutions élémentaires qui ne dépendent pas de r :

- la fonction $u(r, \theta) = a \theta$,
- la fonction $u(r, \theta) = r^{\lambda+2} (a \sin \lambda \theta + b \cos \lambda \theta)$, avec $\lambda = -2$.

Par combinaison linéaire de ces deux solutions, on obtient une famille à un paramètre de solutions vérifiant les deux autres conditions aux limites B.24 et B.26. On cherche une solution de la forme :

$$\psi(r, \theta) = a \theta + b \sin(2\theta) + c \cos(2\theta) \quad (\text{B.29})$$

Les conditions B.24 et B.26 donnent :

$$\partial_\theta \psi(\theta = 0) = 0 \Leftrightarrow a + 2b = 0 \quad (\text{B.30})$$

$$\partial_{\theta\theta} \psi(\theta = \theta_i) = 0 \Leftrightarrow b \sin(2\theta_i) - c \cos(2\theta_i) = 0 \quad (\text{B.31})$$

$$\Leftrightarrow b = d \cos(2\theta_i), \quad c = d \sin(2\theta_i) \quad (\text{B.32})$$

La fonction de courant est donc de la forme suivante :

$$\exists d, \quad \psi(\theta) = d(-2\theta \cos(2\theta_i) + \cos(2\theta_i) \sin(2\theta) - \sin(2\theta_i) \cos(2\theta)) \quad (\text{B.33})$$

$$= d(\sin(2\theta - 2\theta_i) - 2\theta \cos(2\theta_i)) \quad (\text{B.34})$$

Le champ de vitesse correspondant s'écrit :

$$\mathbf{v}_r = \frac{1}{r} \partial_\theta \psi = d \frac{1}{r} (2 \cos(2\theta - 2\theta_i) - 2 \cos(2\theta_i)) \quad (\text{B.35})$$

$$\mathbf{v}_\theta = -\partial_r \psi = 0 \quad (\text{B.36})$$

Il est représenté sur la figure B.1 et le débit total de liquide traversant un arc de cercle $r = \text{constante}$ vaut :

$$V \hat{=} \int_0^{\theta_i} \mathbf{v}_r r d\theta = \psi(r, \theta_i) - \psi(r, 0) = d(\sin(2\theta_i) - 2\theta_i \cos(2\theta_i)) \quad (\text{B.37})$$

Nous avons donc exhibé une solution élémentaire de l'équation de la rotation où une source de liquide de débit V est localisée à l'origine. La solution s'écrit :

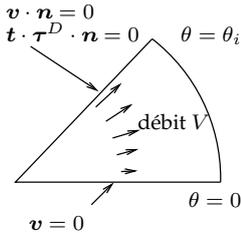
$$\boxed{\psi(r, \theta) = V \frac{\sin(2\theta_i - 2\theta) + 2\theta \cos(2\theta_i)}{2\theta_i \cos(2\theta_i) - \sin(2\theta_i)}} \quad (\text{B.38})$$

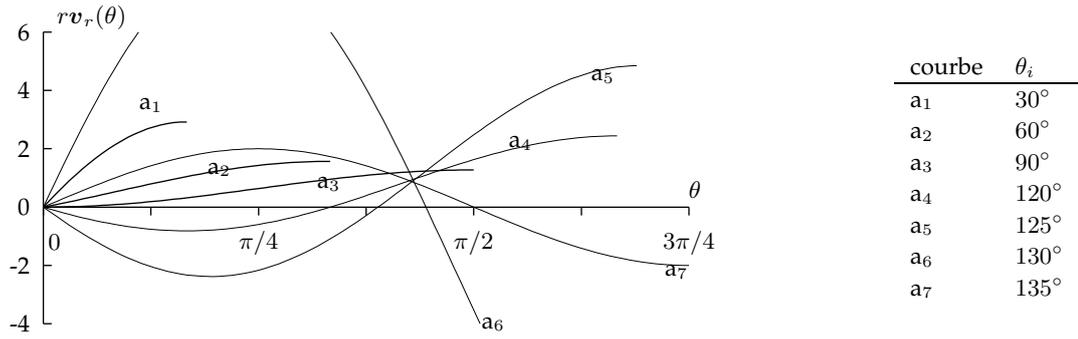
En utilisant l'équation B.23 de la pression, on obtient une expression de la pression :

$$P(r, \theta) = -V \frac{\mu}{r^2} \frac{4 \cos(2\theta_i - 2\theta)}{2\theta_i \cos(2\theta_i) - \sin(2\theta_i)} \quad (\text{B.39})$$

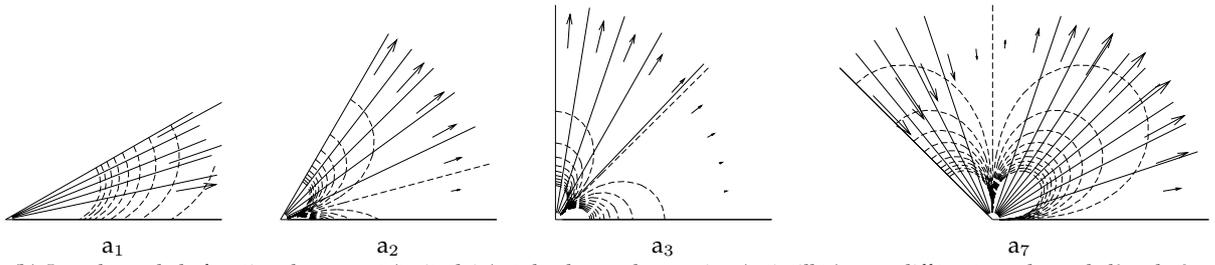
La forme de l'écoulement se comprend aisément aux petits angles, où on retrouve un profil de vitesse parabolique (figure B.1(b)). En revanche, dès que l'angle de contact dépasse 45° , le signe de la pression change à la paroi. Au-delà de 90° , la vitesse à proximité de la paroi solide s'inverse (courbe a_4 sur la figure B.1(a)). Lorsque l'angle de contact est proche de 129° , la vitesse augmente rapidement (courbe a_5), puis change de signe (courbe a_6). Pour un angle de 129° en effet, le dénominateur de l'expression B.38 tend vers zéro et change de signe.

Le comportement singulier de cette solution analytique est connu depuis longtemps. Moffatt et Duffy y ont consacré un article [58] où ils proposent une solution partielle à cette singularité car le champ de vitesse ne prend évidemment pas des valeurs infinies. On peut apporter deux éléments de réponse à ce problème.





(a) Profil de vitesse $v_r(\theta)$ pour différents angles de contact



(b) Isovaleurs de la fonction de courant (trait plein) et du champ de pression (pointillés) pour différentes valeurs de l'angle θ_i .

Figure B.1 – Solution élémentaire du problème de Stokes correspondant à une source de débit située à l'origine.

Le premier est que la valeur du nombre de Reynolds construit à partir de l'épaisseur locale $r\theta$ de la couche de liquide ne dépend pas de r . On a en effet :

$$\text{Re} \hat{=} \frac{v D}{\nu} \simeq V f(\theta) \frac{\frac{1}{2} r \theta}{\nu} \sim V f(\theta) \frac{\theta}{\nu} \quad (\text{B.40})$$

où la fonction f prend de très grandes valeurs lorsque θ_i s'approche de 129°. La valeur du nombre de Reynolds augmente alors et les équations de Stokes ne sont plus applicables. Nous étudierons une solution de l'équation de Navier-Stokes pour ce problème en B.3.

Le deuxième élément de réponse est plus subtil et requiert l'étude des autres solutions élémentaires du problème. On remarquera qu'aux grands angles, une seule solution élémentaire ne suffit pas, et qu'il faut tenir compte des conditions aux limites aux petites et aux grandes échelles pour déterminer le champ de vitesse et de pression (voir les paragraphes suivants).

B.2.2 Autres solutions du problème

Nous avons exhibé une famille de solutions du type $\psi(r, \theta) = f(r)g(\theta)$ où f est une constante. D'après la classification B.28, les autres solutions sont donc construites comme :

$$\psi(r, \theta) = f(r)g(\theta), \text{ avec } g(0) = 0, g(\theta_i) = 0 \quad (\text{B.41})$$

Les solutions élémentaires n'offrent que peu de choix pour obtenir ces conditions, mais en combinant les solutions, on obtient une grande variété de solutions. Les solutions élémentaires sont choisies de sorte que la combinaison linéaire soit encore séparable sous la forme $f(r)g(\theta)$. Pour cela, il faut que la dépendance en r soit la même pour chaque élément de la combinaison.

Par exemple, les solutions élémentaires du tableau B.14 qui varient comme $f(r) = r^2$ sont au nombre de trois et offrent 4 paramètres indépendants.

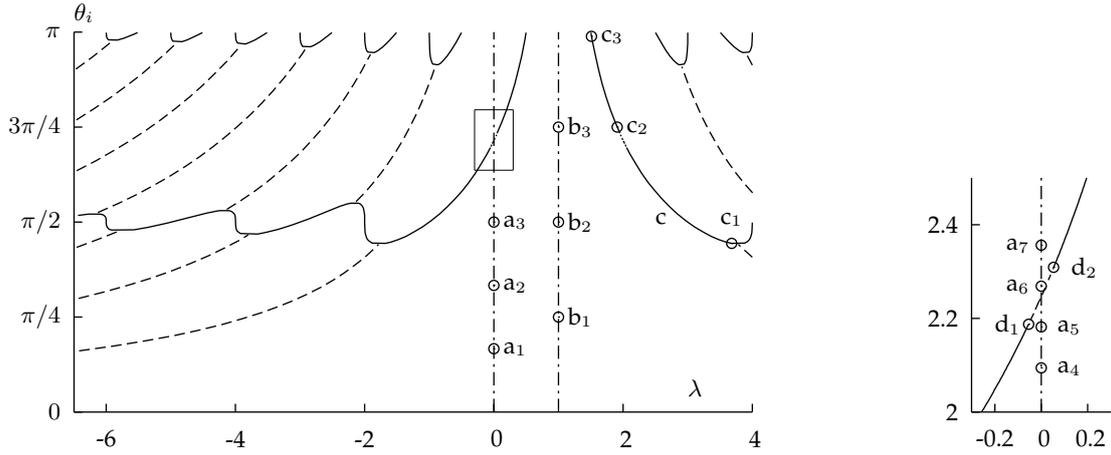


Figure B.2 – Racines de la fonction Λ du problème de Stokes dans une ligne de contact à un fluide. Les traits pleins représentent les racines réelles et les pointillés la partie réelle des racines complexes. Cette figure est identique à celle présentée par Moffatt et Duffy [58]. À droite est tracé un agrandissement de la région singulière pour le problème de la source.

La combinaison linéaire s'écrit :

$$\psi(r, \theta) = r^2 (a + b\theta + c \sin 2\theta + d \cos 2\theta) \quad (\text{B.42})$$

Un autre cas particulier est le cas de $f(r) = r$, pour lequel on a encore une famille à 4 paramètres :

$$\psi(r, \theta) = r (a \sin \theta + b \cos \theta + c \theta \sin \theta + d \theta \cos \theta) \quad (\text{B.43})$$

Pour tout $\lambda \neq 0, 1, 2$ (y compris des valeurs complexes) on peut construire une combinaison à 4 paramètres qui varie comme r^λ . L'expression générale s'écrit :

$$\psi(r, \theta) = r^\lambda g(\theta), \quad (\text{B.44})$$

$$g(\theta) = a \sin \lambda \theta + b \cos \lambda \theta + c \sin(\lambda - 2)\theta + d \cos(\lambda - 2)\theta \quad (\text{B.45})$$

Ainsi, comme $\partial_r \psi = \lambda r^{\lambda-1} g(\theta)$, les conditions aux limites B.25 et B.27 conduisent à :

$$g(0) = b + d = 0 \quad (\text{B.46})$$

$$g(\theta_i) = a \sin \lambda \theta_i + b \cos \lambda \theta_i + c \sin(\lambda - 2)\theta_i + d \cos(\lambda - 2)\theta_i = 0 \quad (\text{B.47})$$

Les deux autres conditions aux limites s'écrivent :

$$g'(0) = a \lambda + c(\lambda - 2) = 0 \quad (\text{B.48})$$

$$g''(\theta_i) = -a \lambda^2 \sin \lambda \theta_i - b \lambda^2 \cos \lambda \theta_i - c(\lambda - 2)^2 \sin(\lambda - 2)\theta_i - d(\lambda - 2)^2 \cos(\lambda - 2)\theta_i = 0 \quad (\text{B.49})$$

Ces quatre équations forment un système linéaire dont l'inconnue est le vecteur (a, b, c, d) . En général (pour un angle θ_i et un paramètre λ quelconques), le déterminant de ce système est non nul et il existe une solution unique, qui est $a = b = c = d = 0$ puisque le second membre est nul. Cette solution ne nous intéresse évidemment pas.

En revanche, si le déterminant D du système est nul, alors il existe une famille à au moins un paramètre de solutions non nulles qui vérifient les conditions aux limites (nous avons utilisé le même raisonnement pour résoudre l'équation de

la chaleur près d'une ligne de contact avec trois phases en A.2.2). Moffat [58] en donne une expression particulièrement simple, qui dans ce contexte s'écrit

$$D = -4(\lambda - 1) \Lambda(\lambda, \theta), \quad \text{avec} \quad \Lambda(\lambda, \theta) \triangleq (\lambda - 1) \sin 2\theta - \sin 2(\lambda - 1)\theta \quad (\text{B.50})$$

La recherche des solutions élémentaires de notre problème se réduit maintenant à la détermination des racines de la fonction Λ . La figure B.2 représente l'ensemble de ces racines sur le domaine $(\lambda, \theta) \in [-6, 3] \times [0, \pi]$ (il existe une infinité de solutions au-delà de ces limites).

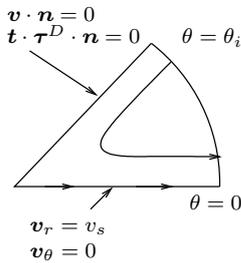
Les solutions ont la même structure que celles d'un problème de thermique. Pour un angle de contact θ_i donné, il en existe une infinité, chacune associée à une valeur de λ . Les valeurs de λ dont la partie réelle est grande correspondent à des modes qui s'atténuent très rapidement soit aux petites échelles (pour $\text{Re}(\lambda) > 0$, partie réelle de λ positive), soit aux grandes échelles (pour $\text{Re}(\lambda) < 0$). Ces modes permettent de construire une solution pour des conditions aux limites arbitraires. On trouvera plus de détails sur la variété de ces solutions dans l'article de Moffat [57].

Nous avons montré dans le cadre de l'équation de Poisson que l'intervalle entre les racines λ de la fonction Λ donne une mesure de la profondeur de pénétration des conditions aux limites dans le domaine. La figure B.2 montre que pour un angle supérieur à 90° il existe une solution dont le paramètre λ est très proche de 0. Cette solution interfère donc fortement avec la solution B.38. Cette interférence peut s'interpréter de la façon suivante : aux grands angles, l'établissement de la solution analytique B.38 est très lent. Les conditions aux limites à petite échelle (à savoir le profil de flux singulier $V(s)$ le long de l'interface) se font sentir jusqu'aux grandes échelles. Cet argument s'ajoute à celui du nombre de Reynolds pour disqualifier la solution analytique du problème de la source aux grands angles.

B.2.3 Solution élémentaire du problème de la paroi défilante

Nous avons exhibé une solution élémentaire correspondant à un débit radial total imposé et une vitesse de paroi nulle ainsi qu'une infinité de solutions pour un débit radial nul. Il nous reste à trouver une solution particulière du problème à débit radial nul et à vitesse de paroi v_s non nulle.

Les conditions aux limites du problème sont :



$$v_r(r, \theta = 0) = 1 \Rightarrow \frac{1}{r} \partial_\theta \psi = v_s \quad (\text{B.51})$$

$$v_\theta(r, \theta = 0) = 0 \Rightarrow \partial_r \psi = 0 \quad (\text{B.52})$$

$$\partial_\theta v_r(r, \theta = \theta_i) = 0 \Rightarrow \partial_{\theta\theta} \psi = 0 \quad (\text{B.53})$$

$$v_\theta(r, \theta = \theta_i) = 0 \Rightarrow \partial_r \psi = 0 \quad (\text{B.54})$$

Si on cherche une solution sous la forme $\psi(r, \theta) = f(r)g(\theta)$, l'équation B.51 implique $f(r) = r$. Les solutions élémentaires qui conviennent ont déjà été considérées (équation B.43). Les conditions aux limites fournissent les valeurs des coefficients (a, b, c, d) et la solution s'écrit sous la forme suivante :

$$\psi(r, \theta) = v_s r \frac{(2\theta_i - \theta) \sin \theta - \theta \sin(2\theta_i - \theta)}{2\theta_i - \sin 2\theta_i} \quad (\text{B.55})$$

Le dénominateur ne s'annule pas et cette solution est valable pour tout angle θ_i . Cette solution est à la base de nombreux modèles simplifiés (dont la fameuse

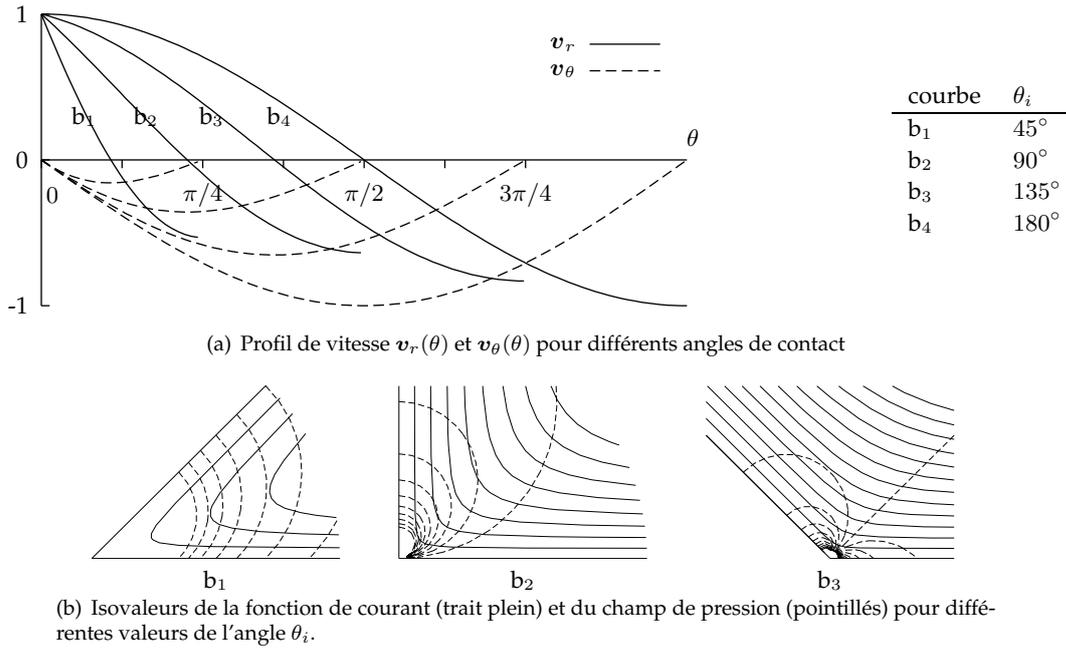


Figure B.3 – Solution élémentaire du problème de Stokes correspondant à une vitesse de paroi imposée.

formule de Cox [16]). La figure B.3 représente le champ de vitesse et de pression pour différents angles ainsi que les profils de vitesse.

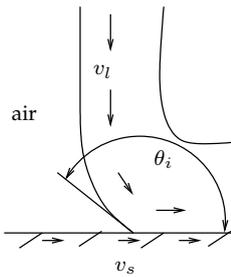
Nous aurons besoin d'une expression de la vitesse radiale le long de l'interface liquide-vapeur. Cette vitesse s'écrit :

$$\mathbf{v}_r(\theta_i) = \frac{1}{r} \partial_\theta \psi(\theta_i) = -v_s \frac{\theta_i \cos \theta_i - \sin \theta_i}{\sin \theta_i \cos \theta_i - \theta_i} \quad (\text{B.56})$$

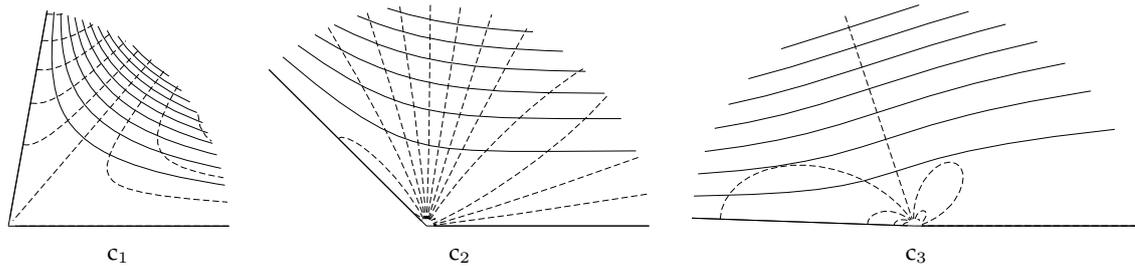
Quant à la pression, elle s'écrit :

$$P(r, \theta) = -v_s \frac{\mu}{r} \frac{2 \sin \theta + 2 \sin(2\theta_i - \theta)}{2\theta_i - \sin(2\theta_i)} \quad (\text{B.57})$$

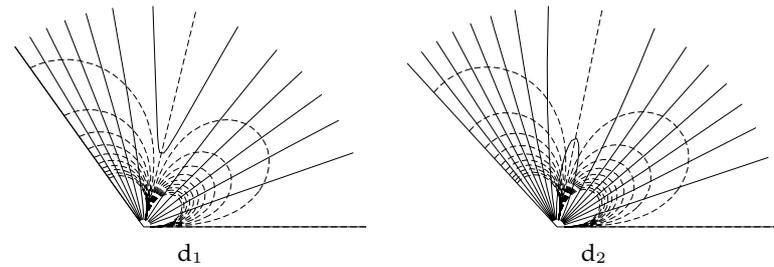
On peut remarquer sur la figure B.2 qu'aucune autre solution élémentaire n'interfère totalement avec cette solution (aucune autre branche ne coupe l'axe $\lambda = 1$). Cependant, aux grands angles, des solutions élémentaires s'en approchent assez près par valeur positive comme par valeur négative. À la limite $\theta_i = \pi$, l'écart entre les valeurs de λ n'est plus que de $1/2$, ce qui signifie que les conditions aux limites macroscopiques influencent notablement l'écoulement (écart de 10% par rapport à la solution asymptotique) jusqu'à une distance inférieure à 1% de l'échelle macroscopique.



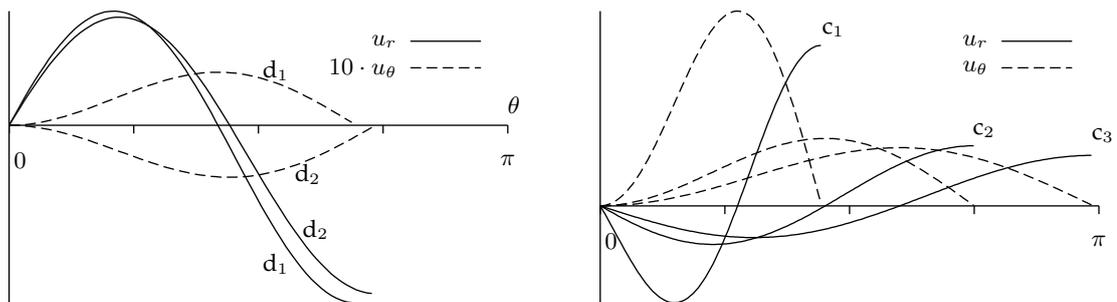
Cette particularité semble déjà avoir été mise en évidence expérimentalement. Shikhmurzaev [75] rapporte des expériences sur l'angle de contact dynamique où il est démontré que cet angle n'est pas seulement une fonction de la vitesse de déplacement de la ligne de contact, mais que la configuration macroscopique de l'écoulement influence cet angle de façon très importante. La configuration de l'écoulement étudié est représentée ci-contre (il s'agit de l'enduction d'un substrat par un rideau de liquide). Les paramètres de l'expérience sont la vitesse v_s du substrat et la vitesse v_l du liquide. Si on suppose que l'écoulement est régi par la solution élémentaire B.55, alors un unique paramètre est nécessaire et la vitesse v_l du liquide peut être déduite de la vitesse v_s de la paroi. Dans cette expérience, on impose à grande échelle une vitesse de liquide différente. On ex-



(a) Solutions de la branche c qui interfèrent avec le problème de la paroi défilante.



(b) Solutions de la branche d qui interfèrent avec le problème de la source au voisinage de l'angle critique (environ 129 degrés).



(c) Profils de vitesse v_r et v_θ des solutions ci-dessus.

Figure B.4 – Quelques solutions particulières du problème (sur les graphiques en secteurs, isovalues de la fonction ψ en trait plein, isovalues de la pression en pointillés).

cite ainsi des modes supplémentaires de l'écoulement, et en particulier le mode c (voir figure B.2), le plus proche du mode principal.

La figure B.4(a) montre bien que ce mode d'écoulement, en se superposant au mode B, permet d'obtenir une combinaison quelconque de vitesse de paroi v_s et de vitesse de liquide v_l . La position des lignes de courant montre aussi que plus l'angle est grand, plus ce mode se propage loin vers les petites échelles.

Cette interprétation est quelque peu différente de celle de Shikmurzaev, et permettrait de prédire l'angle de contact. Dans notre cas, cette amélioration ne nous est malheureusement pas très utile car il faut pour l'appliquer connaître la vitesse v_l du liquide à l'interface à l'échelle macroscopique.

B.2.4 Approximation de lubrification

Considérons l'équation de Stokes incompressible stationnaire :

$$\nabla P - \mu \Delta \mathbf{v} = 0 \tag{B.58}$$

Pour les petits angles de contacts, l'approximation de lubrification est souvent utilisée. Elle consiste à supposer que l'écoulement est monodimensionnel, dirigé uniquement dans la direction parallèle à la paroi :

$$\mathbf{v}_y \ll \mathbf{v}_x \quad (\text{B.59})$$

$$(\Delta \mathbf{v})_y \ll (\Delta \mathbf{v})_x \quad (\text{B.60})$$

Par projection de l'équation B.58 sur les directions horizontale et verticale, on obtient les deux équations suivantes :

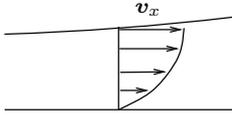
$$\partial_x \tilde{P} = \mu \partial_{yy} \mathbf{v}_x \quad (\text{B.61})$$

$$\partial_y \tilde{P} = 0 \quad (\text{B.62})$$

En dérivant la première par rapport à y , on en déduit qu'à x fixé, $\mathbf{v}_x(x, y)$ est un polynôme du deuxième degré en y . Les conditions aux limites de l'écoulement pour le problème de la source :

- contrainte tangentielle nulle à l'interface, soit $\partial_y \mathbf{v}_x = 0$,
- vitesse nulle à la paroi, soit $\mathbf{v}_x = 0$.

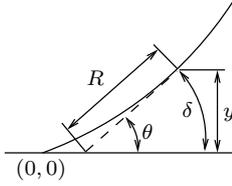
On obtient ainsi le profil de vitesse dans le film en fonction de la hauteur δ de celui-ci et du débit V dans le film :



$$\mathbf{v}_x(y) = 3V \left(\frac{y}{\delta^2} - \frac{y^2}{2\delta^3} \right), \quad V \triangleq \int_0^\delta \mathbf{v}_x(y) dy \quad (\text{B.63})$$

L'équation B.61 devient :

$$\partial_x \tilde{P} = -\frac{3\mu V}{\delta^3} \quad (\text{B.64})$$



Pour le problème de la paroi défilante, le débit total V est nul et la vitesse de paroi est égale à v_s . Le profil de vitesse qui vérifie ces conditions et la condition de contrainte tangentielle nulle à l'interface s'écrit :

$$\mathbf{v}_x(y) = v_s \left(1 - \frac{3}{\delta} y + \frac{3}{2\delta^2} y^2 \right) \quad (\text{B.65})$$

On en déduit l'expression du gradient de pression :

$$\partial_x \tilde{P} = -\frac{3\mu v_s}{\delta^2} \quad (\text{B.66})$$

Si on écrit que l'épaisseur δ du film est égale à $r \theta_i$, les expressions de l'hypothèse de lubrification sont directement comparables aux gradients de pression obtenus à partir des expressions B.39 et B.57.

Comparons ces expressions à celles obtenues pour l'écoulement dans un coin. La figure B.5 représente le rapport du gradient de pression obtenu par l'hypothèse de lubrification au gradient de pression obtenu pour un écoulement dans un coin.

Pour le problème de la paroi défilante, les deux expressions donnent quasiment le même résultat jusqu'à des angles très élevés (pratiquement $3\pi/4$). Pour le problème du débit singulier au contraire, les deux formulations divergent dès un angle de 30° . L'approximation de lubrification fournit donc une expression très semblable à celle de l'écoulement dans un coin, et ce jusqu'à des angles très élevés pour le problème de la paroi défilante (dynamique de la ligne de contact). Cependant, elle n'est satisfaisante que jusqu'à un angle de 30° pour le calcul du débit singulier. Au-delà, elle prédit un gradient de pression trop faible.

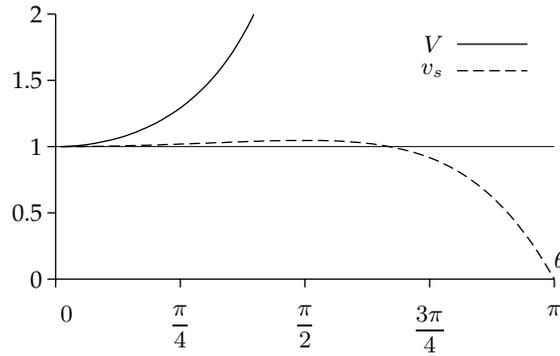


Figure B.5 – Comparaison de l'expression analytique du gradient de pression à l'interface par l'hypothèse de lubrification et par le calcul de l'écoulement dans un coin. Les courbes représentent le rapport du deuxième sur le premier, pour la dynamique de la ligne de contact (courbe v_s) et pour le débit singulier (courbe V).

B.3 Sur les termes convectifs : écoulement de Jeffery-Hamel

La solution B.38 du problème de la source ne peut pas être utilisée telle que en raison de sa divergence à un angle de contact de 129° environ. Or, il est possible de résoudre en partie ce problème grâce à une solution proposée par Jeffery et Hamel. Une analyse détaillée de cette solution se trouve dans le livre de White [91].

Il s'agit d'une solution du problème de Navier-Stokes stationnaire (incluant les termes d'inertie), telle que les lignes de courant soient radiales. Elle s'écrit donc sous la forme suivante, où f est une primitive de g :

$$v_r = r^{-1} \frac{\partial g}{\partial \theta} = r^{-1} f(\theta), \quad v_\theta = 0 \quad (\text{B.67})$$

Le fait d'introduire l'inertie du fluide rend la solution non linéaire, et en particulier introduit une dissymétrie entre les débits positifs et négatifs. White analyse les solutions de cette équation pour un écoulement entre deux plans (soit des conditions aux limites de vitesse nulle en $\theta = 0$ et en $\theta = \theta_i$). Rappelons brièvement la construction de cette solution.

On calcule le rotationnel de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Comme le champ de vitesse est à divergence nulle, la pression disparaît de l'équation. En utilisant l'expression B.67 de la vitesse, on obtient une équation différentielle sur la fonction f (on note $f'(\theta) = \partial f / \partial \theta$).

$$\begin{aligned} \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla P - \nu \Delta \mathbf{v} &= 0 \\ \Rightarrow \boxed{2 f(\theta) f'(\theta) + \nu f^{(3)}(\theta) + 4 \nu f'(\theta)} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.68})$$

Rappelons le résultat obtenu avec les équations de Stokes : l'équation B.22 qui régit la fonction de courant pour l'équation de Stokes conduit, dans le cas particulier où $\lambda = 0$, à l'équation $g^{(4)}(\theta) + 4 g''(\theta) = 0$, ce qui donne par intégration de g :

$$f^{(3)}(\theta) + 4 f'(\theta) = 0 \quad (\text{B.69})$$

La prise en compte du terme d'inertie consiste donc à ajouter le terme non linéaire $f f'$ à l'équation.

Si on néglige la viscosité de la vapeur, les conditions aux limites de l'équation

pour le liquide B.68 sont :

$$f(0) = 0 \quad \text{adhérence à la paroi} \quad (\text{B.70})$$

$$f'(\theta_i) = 0 \quad \text{contrainte tangentielle nulle} \quad (\text{B.71})$$

$$\int_0^{\theta_i} f(\theta) d\theta = V \quad \text{débit imposé} \quad (\text{B.72})$$

Les conditions aux limites du problème sont donc différentes de celles du problème étudié par White. Adimensionnons la fonction f et le débit V par la viscosité ν , et on obtient le système suivant :

$$\boxed{\begin{aligned} f &= \tilde{f} \nu, \quad V = \tilde{V} \nu \\ 2 \tilde{f} \tilde{f}' + \tilde{f}^{(3)} + 4 \tilde{f}'(\theta) &= 0 \\ \tilde{f}(0) &= 0, \quad \int_0^{\theta_i} \tilde{f} d\theta = \tilde{V} \end{aligned}} \quad (\text{B.73})$$

Pour obtenir l'expression de la pression, on écrit à nouveau l'équation de Navier-Stokes, et on remplace la vitesse par l'expression B.67 :

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla P - \nu \Delta \mathbf{v} = 0 \quad (\text{B.74})$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} -\frac{1}{r^3} f^2(\theta) - \frac{\nu}{r^3} \partial_{\theta\theta} f(\theta) + \frac{1}{\rho} \partial_r P = 0 \\ -\frac{2\nu}{r^3} \partial_\theta f(\theta) + \frac{1}{\rho r} \partial_\theta P = 0 \end{cases} \quad (\text{B.75})$$

Par intégration selon r , on obtient une expression de la pression :

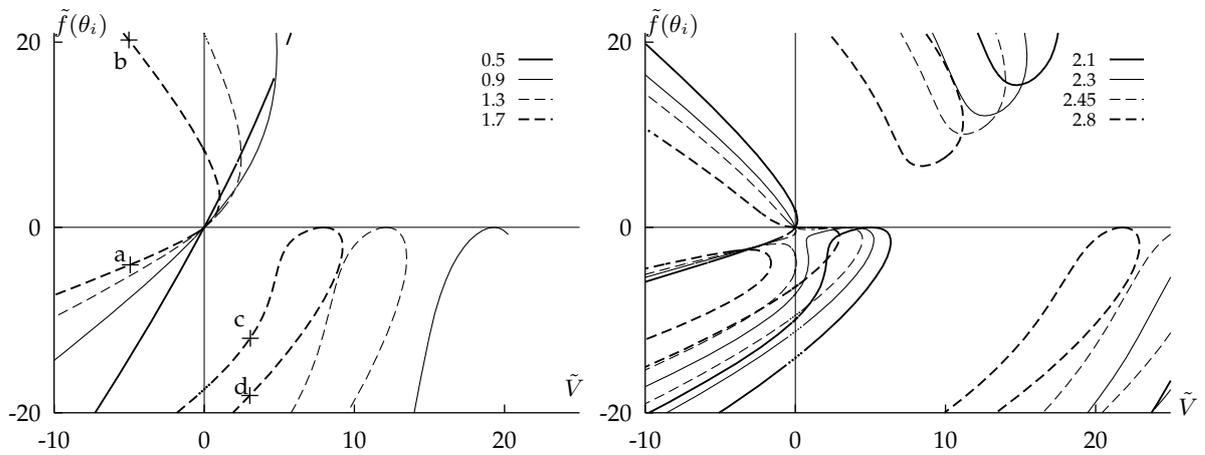
$$P(r, \theta) = -\frac{1}{2r^2} (\mu f''(\theta) + \rho f^2(\theta)) \quad (\text{B.76})$$

$$= \frac{\mu \nu}{r^2} \tilde{P} \quad \text{avec} \quad \tilde{P} = -\frac{1}{2} (\tilde{f}'' + \tilde{f}^2) \quad (\text{B.77})$$

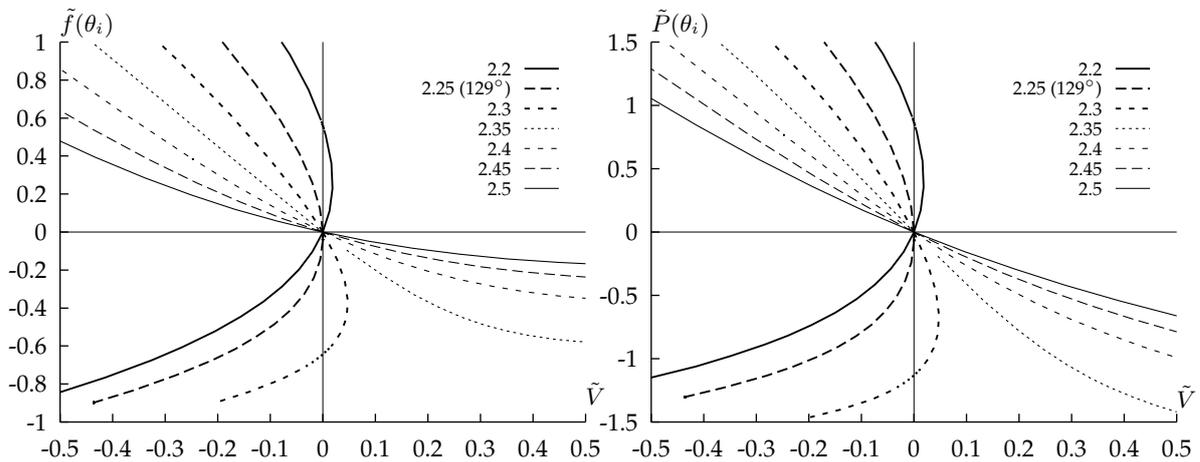
Nous avons utilisé une méthode d'intégration numérique de l'équation différentielle B.73 pour explorer l'espace des conditions initiales $\tilde{f}(0) = 0$, $\tilde{f}'(0) = a$, $\tilde{f}''(0) = b$ avec $a \in [-10^3, 10^4]$ et $b \in [-10^3, 10^3]$. Pour certains couples (a, b) , la condition aux limites $f'(\theta_i) = 0$ est satisfaite et on calcule alors la valeur du débit \tilde{V} correspondant. Les solutions ainsi obtenues forment des courbes dans l'espace (a, b) , mais ces deux variables ne sont pas les plus pertinentes pour représenter l'ensemble des solutions. Notre choix s'est porté sur une représentation de la vitesse $\tilde{f}(\theta = \theta_i)$ à l'interface liquide-vapeur en fonction du débit \tilde{V} . Avec ces variables, les différentes solutions du système sont bien distinctes sur le graphique et les solutions singulières (vitesse non nulle à débit nul) apparaissent clairement.

Les solutions sont présentées pour quelques valeurs de l'angle de contact θ_i sur la figure B.6(a). Ces figures mettent en évidence la variation continue des solutions en fonction de l'angle de contact. Elles montrent que pour un débit \tilde{V} et un angle de contact θ_i donnés, il existe en général plusieurs solutions. On remarque aussi un changement de topologie des solutions autour de 2.3 radians près de l'origine. Cet angle est légèrement plus grand que celui pour lequel la solution de Stokes est singulière. La figure B.6(c) illustre quelques solutions de l'équation. Sauf pour la solution a, la vitesse n'est pas de signe constant. Cependant, contrairement à la solution du problème de Stokes pour laquelle la pression change de signe dès que $\theta_i > \pi/4$, les termes d'inertie ont tendance à rendre la pression négative dans tout le domaine.

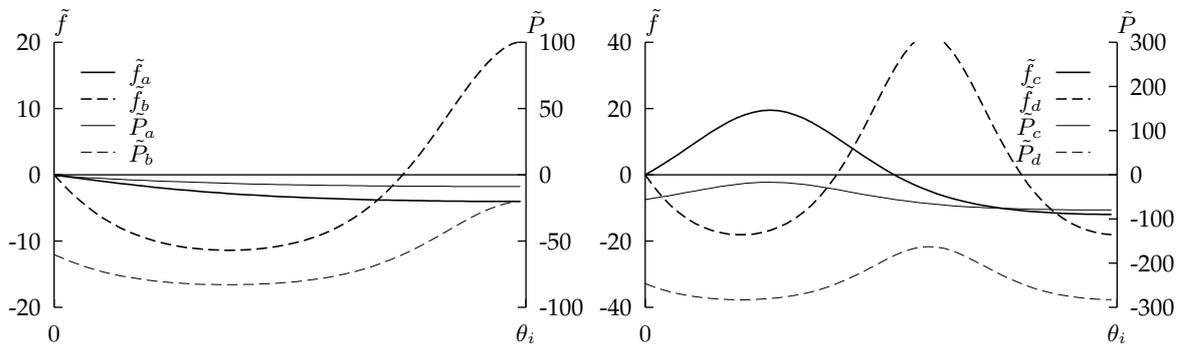
Pour étudier l'écoulement entre deux plaques, White caractérise les solutions par la valeur de \tilde{f} la plus grande en valeur absolue. Lorsque cette plus grande valeur est atteinte pour $\tilde{f} < 0$, il classe cette solution parmi les écoulements convergents. Si au contraire elle est atteinte pour une valeur positive, la solution est



(a) Solutions de l'équation B.73 représentées en variables $(\tilde{V}, \tilde{f}(\theta_i))$. La légende donne la correspondance entre les courbes et l'angle θ_i en radians.



(b) Agrandissement de la zone située près de l'origine pour des angles de contact proches de 129 degrés (angles exprimés en radians dans la légende). Vitesse à l'interface (graphique de gauche) et pression à l'interface (graphique de droite).



(c) Profils de vitesse et de pression pour certaines solutions de l'équation B.73 (solutions a, b, c, d repérées sur la figure B.6(a)).

Figure B.6 – Solutions du problème de Jeffery-Hamel, avec une condition aux limites de contrainte nulle en $\theta = \theta_i$.

classée comme un écoulement divergent. Or, le calcul du débit montre que la direction de l'écoulement à l'endroit où la vitesse est maximale n'indique absolument pas le sens du débit total. La courbe b représentée sur la figure B.6(c) montre une solution dont le débit total est négatif et le maximum de \tilde{f} est positif. Avec sa classification, White constate qu'il n'existe qu'une seule solution d'écoulement convergent alors qu'il en existe de multiples pour les écoulements divergents. Si l'on choisit le débit total comme critère de classification, on obtient au contraire de multiples solutions pour les écoulements convergents comme pour les écoulements divergents.

Le régime linéaire où la solution du problème de Stokes est aussi solution du problème de Jeffery-Hamel est située au voisinage de l'origine. On l'identifie facilement car il se traduit par une dépendance linéaire de la vitesse \tilde{v} à l'interface par rapport au débit \tilde{V} . Pour un angle θ_i de 0.5 radians par exemple, la courbe est pratiquement linéaire pour $-8 < \tilde{V} < 8$ mais le domaine linéaire se réduit très rapidement quand l'angle de contact augmente.

La figure B.6(b) montre le comportement des solutions au voisinage de l'origine pour des angles proches de l'angle critique de 129 degrés environ. Pour cette valeur précise, la tangente des courbes à l'origine devient verticale. Le domaine linéaire est alors très réduit et un très faible débit entraîne des vitesses très importantes et une sortie du régime linéaire.

On peut interpréter ces figures de la façon suivante : aux angles inférieurs à 2 radians et pour un écoulement convergent, il existe une solution du problème très semblable à celle du problème de Stokes (il s'agit de la solution $\tilde{V} < 0$, $\tilde{f}' < 0$ de la figure B.6(a)). Il existe par ailleurs d'autres solutions dont les amplitudes et l'énergie de dissipation visqueuse sont beaucoup plus grandes. Pour un écoulement divergent, tant que le débit est faible, il existe une solution proche de la zone linéaire avec une dissipation faible. La branche de cette solution a cependant un débit \tilde{V} maximal. Pour un débit supérieur, les solutions du problème correspondent à des vitesses et des énergies de dissipation très supérieures. Pour des angles proches de 129 degrés, il existe deux solutions du problème pour un débit négatif donné. Les vitesses à l'interface liquide-vapeur sont d'amplitude similaire mais de signe opposé, et il en est de même pour le gradient de pression.

Pour mettre en évidence l'intérêt de ce modèle dans le cadre de l'étude des lignes de contact, calculons les valeurs typiques du débit adimensionnel que l'on rencontre en pratique. L'étude du transfert thermique singulier à la ligne de contact montre que pour des angles de contact supérieurs à 60 degrés, le flux de chaleur singulier est de l'ordre de quelques Watt par mètre de ligne de contact et par K de surchauffe. Dans la grande majorité des cas, le flux reste donc inférieur à 200 Wm^{-1} . Avec un tel flux de chaleur, le débit de liquide correspondant est $V = 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, soit $\tilde{V} = 0.3$ pour $\nu = 0.3 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Ainsi, le débit typique d'évaporation à la ligne de contact est dans le régime linéaire pour des angles inférieurs à l'angle droit et il entre dans le régime non linéaire pour des angles supérieurs à 2 radians. Or, dans cette gamme de débits, les non-linéarités ont pour effet de diminuer les gradients de pression. Il semble raisonnable de supposer que l'écoulement réel correspond à la solution dont la dissipation est la plus faible, soit une des solutions de la figure B.6(b). Dans ce cas, la pression \tilde{P} à l'interface reste inférieure à 2 pour les débits que l'on envisage. On peut maintenant estimer la courbure correspondante de l'interface par la relation de Laplace : $c = P/\sigma$. Par intégration selon r , on obtient la variation de l'angle de contact due à l'écoulement du fluide vers les petites échelles :

$$\theta(\infty) - \theta(r) = \int_r^\infty c(r) dr = -\frac{\mu \nu}{2 \sigma r} \tilde{P} \quad (\text{B.78})$$

La variation maximale de l'angle de contact est obtenue pour les petites dis-

tances r . Or, le flux de chaleur perd son aspect singulier à des distances inférieures à δ_R , épaisseur caractéristique de la résistance d'interface (voir 1.1.2). Une application numérique pour de l'eau à 1 bar et le flux de chaleur maximal envisagé conduit à la majoration suivante (l'application numérique est réalisée avec $r = 10^{-7}$).

$$Q < 200 \text{ W m}^{-1} \Rightarrow -0.3 < \tilde{V} < 0 \quad (\text{B.79})$$

$$\Rightarrow \left| P(\tilde{\theta}_i) \right| < 2 \quad (\text{B.80})$$

$$\Rightarrow |\theta(\infty) - \theta(r)| < 2 \frac{\mu \nu}{2 \sigma r} < 0.02 \text{ radians} \quad (\text{B.81})$$

Cette valeur est une contribution à l'incertitude sur l'angle de contact fourni par le modèle. Pour de très hautes pressions (à 140 bar), l'incertitude augmente en raison de la diminution de l'échelle de coupure du flux de chaleur δ_R et de la tension de surface, qui sont partiellement compensées par la diminution de μ et ν . L'application numérique conduit alors à un ordre de grandeur de 0.2 radians pour la variation maximale de l'angle de contact. Notons que cette variation est faible si on la compare par exemple à l'erreur due à l'ignorance des conditions aux limites exactes du problème (voir B.2.3), ou à la viscosité non nulle de la vapeur (voir B.4).

Pour conclure cette extension du problème de Jeffery-Hamel, rappelons que les hypothèses faites au départ sont assez restrictives (interface plane, écoulement radial, viscosité nulle de la vapeur et évaporation parfaitement singulière située à l'origine). Contrairement au problème original de Jeffery-Hamel, nous n'avons trouvé aucune expérience se rapprochant des conditions que nous avons traitées. Pourtant, le modèle prédit un comportement très singulier du fluide si l'angle θ_i se rapproche de 129 degrés. Une investigation expérimentale de cette configuration nous paraît donc intéressante. Il peut être judicieux de s'inspirer de la démarche suivie par Georgiou et Eagles [30], qui s'intéressent à la stabilité des différentes solutions dans un canal dont les bords ont une courbure non nulle. Nous bornerons pour l'instant l'utilisation du modèle au résultat suivant : l'écoulement fourni par l'équation de Stokes pour le problème de la source est valable jusqu'à un angle maximal de 90 degrés, au-delà duquel la variation de l'angle de contact qui en résulte est faible et non prédictible.

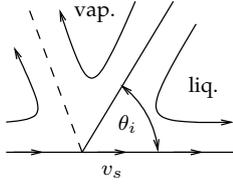
B.4 Modèle de ligne de contact à deux fluides

Lors de l'étude du problème de thermique, nous avons envisagé la possibilité qu'une partie du flux de chaleur puisse passer par la vapeur au voisinage de la ligne de contact, car la conductivité thermique de la vapeur augmente considérablement à haute pression. Un effet similaire peut être observé sur l'écoulement visqueux des fluides à la ligne de contact. En effet le rapport de viscosité est supérieur à 20 pour de l'eau et de la vapeur d'eau à pression atmosphérique, il n'est plus que de 3 à 140 bar. Le but de cette partie est d'évaluer l'erreur commise en négligeant la viscosité de la vapeur.

On étudie séparément le problème de la paroi défilante (déplacement de la ligne de contact le long de la paroi), et celui de la source (évaporation singulière).

B.4.1 Problème de la paroi défilante

La dynamique de la ligne de contact entre deux fluides a déjà fait l'objet de nombreuses publications (une étude théorique utilisant le même type d'arguments [16], et des études expérimentales, dont par exemple [70, 28] ou des ap-



proches un peu différentes [74]). Cox [16] présente la solution du problème modèle ci-contre. Les conditions aux limites sont :

- adhérence à la paroi,
- vitesse normale nulle à l'interface $v_\theta = 0$,
- continuité de la vitesse tangentielle.

La solution du problème est reportée dans le tableau B.7(a). Le saut de pression à l'interface s'écrit donc :

$$P_v - P_l = \mu_l \frac{2}{r} ((\beta A_v - A_l) \cos \theta + (\beta C_v - C_l) \sin \theta) \quad (\text{B.82})$$

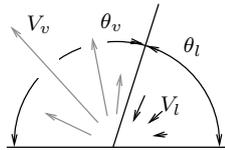
L'erreur relative sur la courbure faite en négligeant la viscosité de la vapeur est caractérisée par l'expression suivante :

$$\frac{\delta c}{c} = \frac{\delta(P_v - P_l)}{P_v - P_l} = \frac{(P_v - P_l)_{\beta=\mu_v/\mu_l} - (P_v - P_l)_{\beta=0}}{(P_v - P_l)_{\beta=0}} \quad (\text{B.83})$$

La figure B.7(c) représente l'erreur relative en fonction du rapport de viscosité β et de l'angle de contact θ_i . À basse pression, la précision est acceptable jusqu'à des angles de contact supérieurs à 90° . Nous savons par ailleurs qu'une unique solution élémentaire ne suffit plus à décrire l'écoulement dans ces conditions et que les conditions aux limites de l'écoulement à grande échelle doivent être prises en compte. Négliger la viscosité de la vapeur introduit une erreur du même ordre. À haute pression, on commet une erreur importante dès un angle de contact de 60° . Il faut alors utiliser le modèle à deux fluides pour le calcul de l'angle de contact dynamique.

La figure B.7(d) montre deux solutions pour un faible rapport de viscosité et un fort rapport de viscosité. Les lignes de courant ne sont que faiblement affectées par le changement. On remarque toutefois qu'une forte viscosité de la vapeur entraîne une diminution de la vitesse du liquide le long de l'interface liquide-vapeur (les lignes de courant sont moins serrées). Par ailleurs, si les variations de pression ont la même amplitude lorsque la viscosité de la vapeur est forte, elles sont presque inexistantes dans la vapeur si sa viscosité est faible.

B.4.2 Terme source singulier (changement de phase)



La construction d'un modèle analytique pour ce problème se heurte à quelques difficultés. Si l'on considère que les liquides sont souvent mouillants et que les configurations où le flux de chaleur est important correspondent à de petits angles de contact (recul de la ligne de contact), l'angle d'ouverture du domaine vapeur $\pi - \theta_i$ est alors supérieur à 90° . Or nous avons montré que la solution du problème de Stokes n'est pas valable. Le raisonnement suivant montre d'autre part que la valeur du nombre de Reynolds est bien plus grande dans la vapeur que dans le liquide (on suppose que la vitesse est de l'ordre de $V/(r\theta)$) :

$$\frac{\text{Re}_v}{\text{Re}_l} \sim \frac{V_v \theta_v}{V_l \nu_v} \cdot \frac{\nu_l}{\theta_l} \quad \text{à partir de l'expression B.40} \quad (\text{B.97})$$

$$= \frac{\rho_l \nu_l \theta_v}{\rho_v \nu_v \theta_l} \quad \text{avec } V_l \rho_l = V_v \rho_v \quad (\text{B.98})$$

$$= \frac{\mu_l}{\mu_v} \cdot \frac{\theta_v}{\theta_l} \quad (\text{B.99})$$

Pour modéliser cet écoulement, il faudrait donc tenir compte des termes convectifs. On pourrait utiliser ici le modèle d'origine de Jeffery-Hamel. En effet, comme la vitesse du liquide est relativement faible devant celle de la vapeur et que sa viscosité est plus élevée, le liquide se comporte pratiquement comme une paroi fixe pour la vapeur. On retrouve alors l'écoulement entre deux plans du problème de

La fonction de courant prend deux expressions selon que l'on est dans le liquide ou la vapeur :

$$\psi_l = r ((A_l \theta + B_l) \cos \theta + (C_l \theta + D_l) \sin \theta) \quad (\text{B.84})$$

$$\psi_v = r ((A_v \theta + B_v) \cos \theta + (C_v \theta + D_v) \sin \theta) \quad (\text{B.85})$$

avec

$$A_l \hat{=} \sin \theta_i (-\beta (\pi \sin \theta_i + \sin^2 \theta_i \cos \theta_i + \theta_i (\pi - \theta_i) \cos \theta_i) + \cos \theta_i (\sin^2 \theta_i - (\pi - \theta_i)^2)) / \Delta \quad (\text{B.86})$$

$$B_l \hat{=} 0 \quad (\text{B.87})$$

$$C_l \hat{=} \sin^2 \theta_i (-\beta (\sin^2 \theta_i + \theta_i (\pi - \theta_i)) + (\sin^2 \theta_i - (\pi - \theta_i)^2)) / \Delta \quad (\text{B.88})$$

$$D_l \hat{=} \theta_i (\beta (\sin^2 \theta_i + \theta_i (\pi - \theta_i)) + \pi \sin \theta_i \cos \theta_i) + (-\sin^2 \theta_i + (\pi - \theta_i)^2) / \Delta \quad (\text{B.89})$$

$$A_v \hat{=} \sin \theta_i (\beta \cos \theta_i (\theta_i^2 - \sin^2 \theta_i) + (-\pi \sin \theta_i + \sin^2 \theta_i \cos \theta_i + \theta_i (\pi - \theta_i) \cos \theta_i)) / \Delta \quad (\text{B.90})$$

$$B_v \hat{=} -A_v \pi \quad (\text{B.91})$$

$$C_v \hat{=} \sin^2 \theta_i (\beta (\theta_i^2 - \sin^2 \theta_i) + (\sin^2 \theta_i + \theta_i (\pi - \theta_i))) / \Delta \quad (\text{B.92})$$

$$D_v \hat{=} (\beta (-\theta_i^2 + \sin^2 \theta_i) (\theta_i - \pi \cos^2 \theta_i) + (-\pi (\pi - \theta_i) \sin \theta_i \cos \theta_i - \theta_i \sin^2 \theta_i + \pi \sin^2 \theta_i \cos^2 \theta_i + \pi (\pi - \theta_i) \theta_i \cos^2 \theta_i - (\pi - \theta_i) \theta_i^2)) / \Delta \quad (\text{B.93})$$

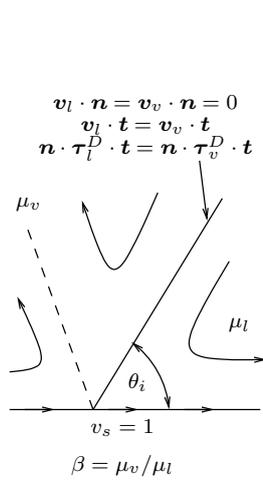
$$\Delta \hat{=} \beta (\theta_i^2 - \sin^2 \theta_i) ((\pi - \theta_i) + \sin \theta_i \cos \theta_i) + ((\pi - \theta_i)^2 - \sin^2 \theta_i) (\theta_i - \sin \theta_i \cos \theta_i) \quad (\text{B.94})$$

En utilisant l'équation B.23, la pression s'écrit :

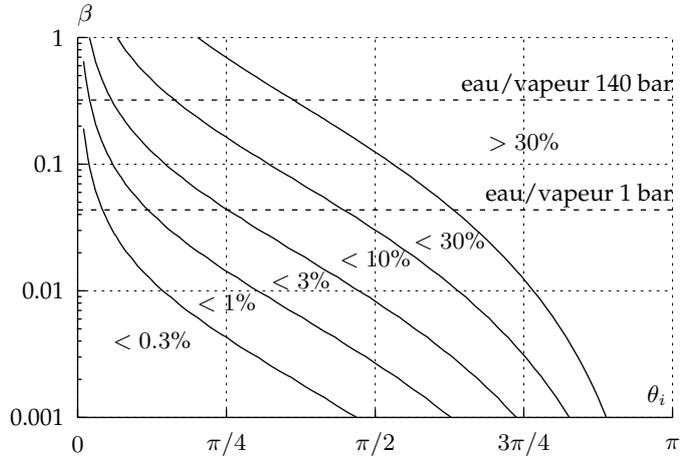
$$P_l(r, \theta) = \mu_l \frac{2}{r} (A_l \cos \theta + C_l \sin \theta) \quad (\text{B.95})$$

$$P_v(r, \theta) = \beta \mu_l \frac{2}{r} (A_v \cos \theta + C_v \sin \theta) \quad (\text{B.96})$$

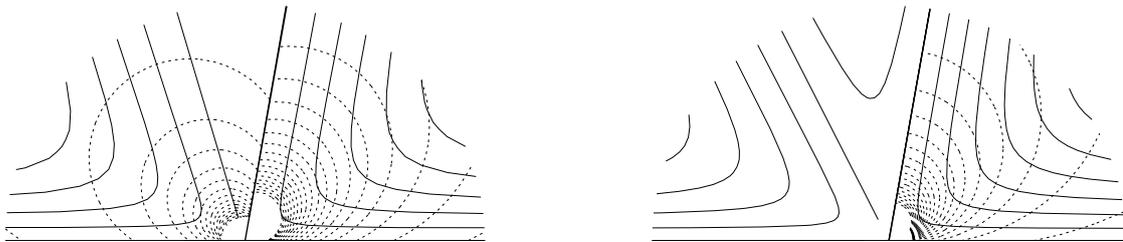
(a) Expression de la solution élémentaire «paroi défilante» pour une ligne de contact à deux fluides (présentée par Cox [16]).



(b) Schéma du problème



(c) Erreur relative sur la courbure de l'interface en fonction de l'angle de contact θ_i et du rapport de viscosité $\beta = \mu_v / \mu_l$ (comparaison entre le modèle à deux fluides et le modèle où la viscosité de la vapeur est supposée négligeable).



(d) Isovaleurs de la fonction de courant et de la pression pour un angle de 80° et un rapport de viscosité $\beta = 0.3$ (à gauche) et $\beta = 0.01$ (à droite).

Figure B.7 – Solution élémentaire «paroi défilante» pour une ligne de contact entre deux fluides. Les lignes de courant sont tracées en traits pleins et les isobares en pointillés. Les isovaleurs sont les mêmes sur les deux graphiques pour permettre une comparaison de l'amplitude des vitesses et des pressions.

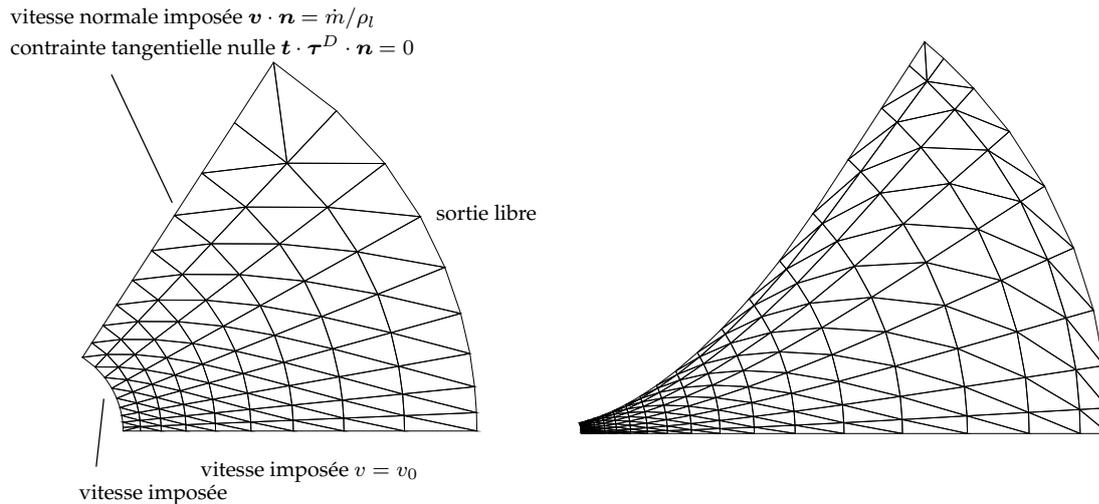


Figure B.8 – Maillage et conditions aux limites du problème résolu par la méthode des éléments finis. Le maillage est plus serré aux bords pour limiter les oscillations numériques de la solution. Le maillage réellement utilisé comporte plus de mailles et s'étend plus loin vers la ligne de contact.

Jeffery-Hamel. Or, aux grands angles, ce problème admet rapidement une multiplicité de solutions. Nous ne disposons pas d'un critère permettant de déterminer laquelle correspond à l'écoulement réel, ni même si c'est toujours la même. On peut cependant majorer la contrainte exercée sur le liquide et la pression dans la vapeur.

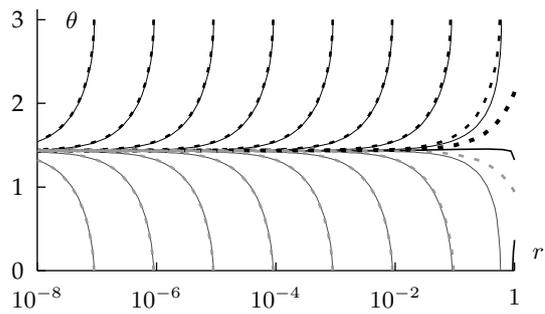
B.5 Approche numérique du problème

L'étude analytique qui précède laisse un grand nombre de questions en suspens. Les problèmes qui restent à résoudre sont les suivants :

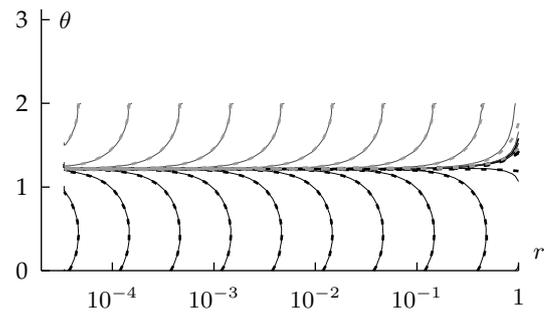
- Quelle est l'influence de la courbure de l'interface sur l'écoulement et le profil de pression ?
- Quelle est l'influence des conditions aux limites ?
- Quel est le domaine d'application du problème de Stokes, et quand faut-il tenir compte des termes convectifs ?

Pour tenter de répondre à ces questions, nous avons mis en œuvre une méthode numérique de résolution des équations de Navier-Stokes adaptée au calcul d'une géométrie de type ligne de contact. En particulier, on utilise un maillage adapté représenté sur la figure B.8. D'autre part, la condition aux limites de l'écoulement à l'interface liquide-vapeur n'est pas classique des méthodes existantes : on impose une contrainte tangentielle et une vitesse normale. Enfin, le raffinement du maillage à la ligne de contact peut poser des problèmes de temps de calcul si le pas de temps du schéma numérique en dépend. C'est pourquoi nous avons mis en œuvre une méthode fondée sur une résolution implicite de la dissipation visqueuse combinée à une méthode des caractéristiques pour l'évaluation des termes de convection. Avec une telle méthode, le pas de temps du calcul peut être choisi arbitrairement grand. La formulation variationnelle et les éléments finis utilisés sont décrits dans l'ouvrage de Pironneau [63] (il s'agit d'éléments finis P1-bulle).

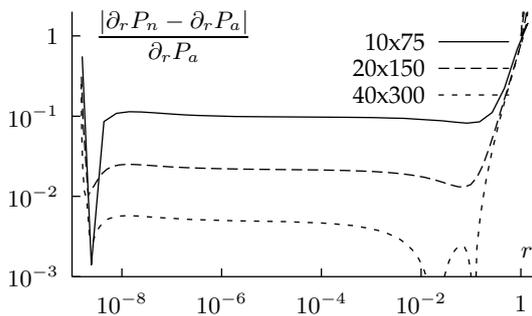
Notre démarche consiste en une validation croisée de la méthode numérique et des solutions analytiques. Sachant que les solutions analytiques sont exactes pour une géométrie d'interface plane, on utilise d'abord ces solutions pour déterminer la précision de la méthode d'éléments finis. Une fois cette dernière validée,



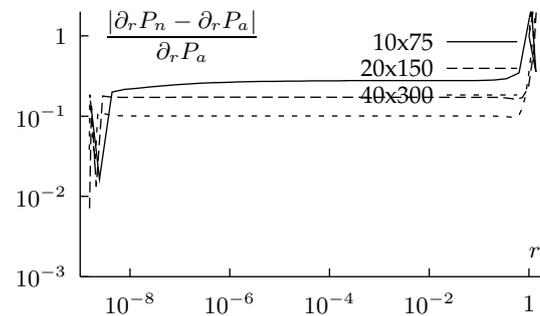
(a) Champ de pression pour le problème de la paroi défilante et un angle $\theta_i = 3$ radians. Solution analytique en pointillés, couleur grise pour les pressions négatives.



(b) Champ de pression pour le problème de la source et un angle $\theta_i = 2$ radians.



(c) Convergence en maillage de la méthode numérique sur le problème de la paroi défilante, pour trois maillages en plus en plus fins.



(d) Convergence en maillage de la méthode numérique sur le problème de la source, pour trois maillages en plus en plus fins.

Figure B.9 – Comparaison de la solution analytique et de la solution numérique du problème de Stokes pour le problème de la paroi défilante et le problème de la source.

on compare les deux méthodes sur une géométrie d'interface courbe.

B.5.1 Validation de la méthode numérique

Dans cette partie, on compare la solution analytique de l'équation de Stokes pour le problème de la source et le problème de la paroi défilante avec une solution numérique.

Dans la méthode numérique on laisse volontairement une condition aux limites peu contrainte au bord extérieur du domaine liquide (condition de sortie libre). On peut ainsi observer l'effet des conditions aux limites sur l'écoulement à l'intérieur du domaine, et en particulier la profondeur à laquelle agissent les conditions aux limites.

Pour représenter le champ de pression à toutes les échelles, on le trace en fonction de $\ln s$ horizontalement et de θ verticalement. Les graphiques montrent les isovaleurs de la pression réparties toutes les puissances de 10.

La figure B.9 montre les champs de pression calculés pour un angle grand et pour les deux problèmes principaux (problème de la source ponctuelle et problème de la paroi défilante). C'est en effet aux grands angles que les différences entre la solution analytique et la solution numérique sont les plus sensibles. Les conditions aux limites ont alors l'influence maximale sur l'intérieur du domaine, et c'est aussi la configuration qui demande le plus d'éléments de discrétisation pour couvrir le domaine.

Pour le problème de la paroi défilante, l'accord entre la solution numérique et la solution analytique est excellent, avec une précision meilleure que 1% avec le maillage le plus fin (figure B.9(c)). Pour le problème de la source au contraire, l'élément fini que nous avons mis en œuvre n'a visiblement pas les qualités nécessaires pour obtenir une bonne précision. La mauvaise convergence en maillage est due à une oscillation de la pression sur les bords du domaine. On y remédie partiellement en raffinant le maillage au bord mais les résultats ont une précision de 10% seulement dans ce cas (figure B.9(d)).

On peut remarquer que les conditions aux limites pénètrent de façon sensible jusqu'à un dixième de l'échelle macroscopique (abscisse 10^{-1} sur le graphique). Rappelons que les isovalues de la pression ne sont tracées qu'à raison de une par décade. Cette représentation ne permet donc pas facilement de repérer des différences inférieures à quelques dizaines de pour-cent (par exemple, l'erreur relative de 10% sur la pression au bord est difficilement décelable sur le graphique B.9(b)).

B.5.2 Application à une interface courbe

Nous allons maintenant comparer un modèle unidimensionnel de l'écoulement fondé sur les expressions analytiques obtenues plus haut avec les résultats numériques obtenus par la méthode des éléments finis. Nous allons utiliser pour cela des géométries caractérisées par leur courbure adimensionnelle \tilde{c} .

Les géométries construites sont telles que l'angle θ_i soit donné par :

$$\theta_i = \tilde{c} \ln s \quad (\text{B.100})$$

Une telle géométrie est représentative du profil de l'interface prédit par le modèle de Dussan (voir 2.1.1). Pour des angles de contact de l'ordre de 60° , la courbure \tilde{c} vaut environ $\tilde{c} = 3 \text{ Ca}$, où Ca est le nombre de capillarité.

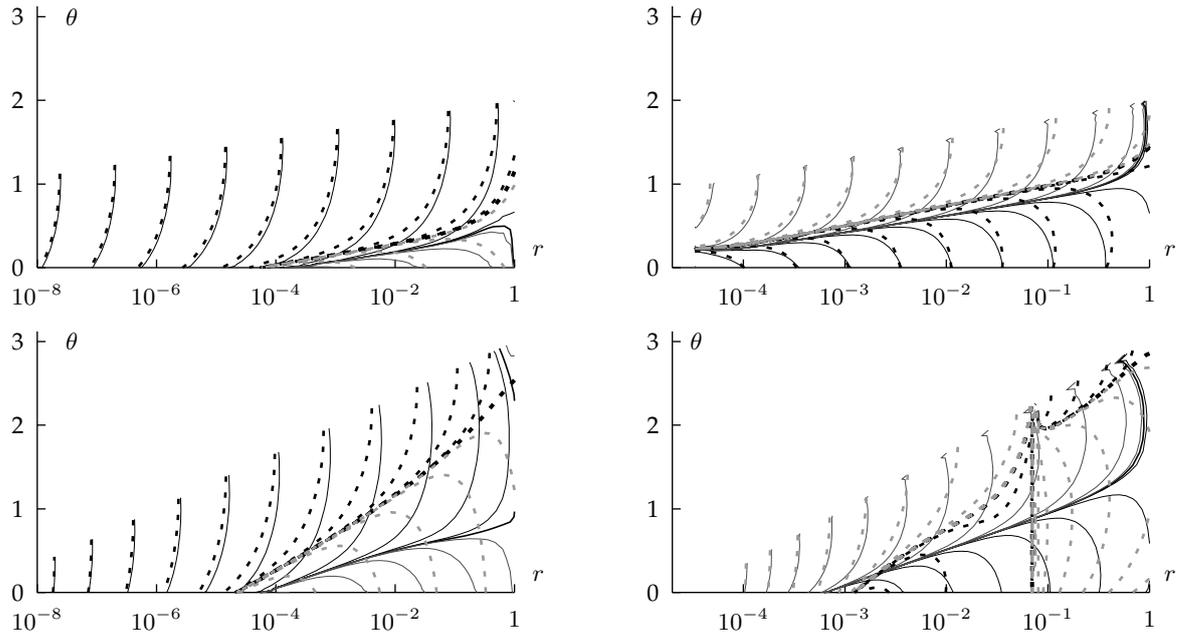
Sur la figure B.8, la courbure relative de l'interface est très forte : $\tilde{c} = 0.5$. Une telle courbure ne peut être obtenue qu'à petite échelle pour des déplacements très rapides de la ligne de contact.

La figure B.10(a) montre la comparaison entre le champ de pression analytique et celui obtenu par éléments finis. Si l'on s'intéresse à la pression à l'interface liquide-vapeur, on constate un bon accord qualitatif pour une courbure adimensionnelle de 0.05 pour le problème de la paroi défilante. Pour le problème de la source, une divergence très nette apparaît lorsque l'angle de contact est supérieur à 90° . Si la courbure est trois fois plus forte (soit 0.15), l'angle de contact dépasse rapidement 90° et la solution numérique s'écarte très nettement de la solution analytique (plus de 100% d'écart).

D'autres calculs prouvent que la différence entre la solution analytique et le calcul numérique est significative lorsque l'angle de contact dépasse 90° . Nous avons prédit théoriquement que l'influence des conditions aux limites sur l'écoulement au cœur du domaine augmente énormément au-delà de 90° . Or une forte courbure agit de la même façon qu'une condition aux limites car elle augmente l'amplitude des modes secondaires de l'écoulement, dont l'influence se propage dans les deux directions vers les petites et les grandes échelles.

B.6 Modélisation du dépôt d'un film en régime visqueux

Le modèle de Dussan prévoit que pour des vitesses de recul de la ligne de contact supérieures à une certaine limite, l'angle de contact devient nul. Dans ce cas, la paroi ne démouille plus totalement et le ménisque de liquide recule en laissant derrière lui un film de liquide. Bretherton [10] propose un modèle



(a) Comparaison numérique-analytique pour une interface courbée et le problème de la paroi défilante. Courbure adimensionnelle $\tilde{c} = 0.05$ en haut et $\tilde{c} = 0.15$ en bas.

(b) Même comparaison que le graphique de gauche pour le problème de la source.

Figure B.10 – Comparaison de la solution analytique et de la solution numérique du problème de Stokes pour une interface courbée.

permettant d'obtenir l'épaisseur du film en fonction du nombre de capillarité et de la courbure du ménisque.

On note $(x_i(s), y_i(s))$ un paramétrage normal du profil du ménisque.

Le film déposé est supposé plat, la courbure est alors nulle et il n'y a pas de saut de pression de Laplace, donc pas de gradient de pression dans le film. Sa vitesse est donc uniforme, égale à la vitesse de la paroi v_s .

Comme l'écoulement est stationnaire et incompressible, le débit linéique V traversant une section quelconque du ménisque est constant, égal au débit s'écoulant par le film :

$$V \doteq \int_0^{y_i} \mathbf{v}_x \cdot \mathbf{n} dy \quad (\text{B.101})$$

$$= v_s \delta_0 \quad (\text{B.102})$$

L'approximation d'écoulement en film conduit à l'expression suivante du gradient de pression à l'interface liquide-vapeur :

$$\partial_s P_i = \frac{3\mu_l v_s}{\delta^3} (\delta - \delta_0) \quad \text{avec} \quad \delta \doteq \frac{\theta_i}{\sin \theta_i} y_i \quad (\text{B.103})$$

Par ailleurs, la relation de Laplace s'écrit :

$$P_v - P_i = \sigma \partial_s \theta \quad (\text{B.104})$$

Par dérivation de cette dernière équation, on obtient :

$$\partial_{ss} \theta = 3 \text{Ca} \frac{\delta - \delta_0}{\delta^3} \quad \text{avec} \quad \text{Ca} \doteq - \frac{\mu_l v_s}{\sigma} \quad (\text{B.105})$$

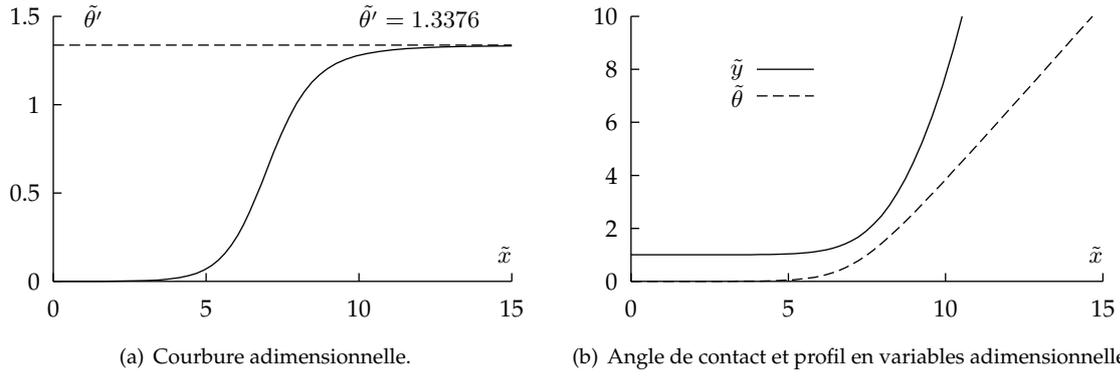


Figure B.11 – Solution de l'équation différentielle B.113 qui gouverne la formation d'un film en paroi.

Le système complet s'écrit

$$\begin{cases} \partial_s x = \cos \theta_i \\ \partial_s y = \sin \theta_i \\ \partial_s \theta = \theta' \\ \partial_s \theta' = 3 \text{Ca} (\delta - \delta_0) / \delta^3 \end{cases} \quad (\text{B.106})$$

avec les conditions initiales d'intégration suivantes :

$$x(0) = 0 \quad (\text{B.107})$$

$$y(0) = \delta_0(1 + \epsilon) \quad \text{démarrage du ménisque} \quad (\text{B.108})$$

$$\theta(0) = 0 \quad \text{angle nul dans le film} \quad (\text{B.109})$$

$$\theta'(0) = 0 \quad \text{courbure nulle dans le film} \quad (\text{B.110})$$

Ce système est aisément écrit en variables adimensionnelles en choisissant comme longueur caractéristique l'épaisseur initiale δ_0 du film :

$$\begin{cases} \partial_{s^*} x^* = \cos \theta^* \\ \partial_{s^*} y^* = \sin \theta^* \\ \partial_{s^*} \theta^* = \theta'^* \\ \partial_{s^*} \theta'^* = 3 \text{Ca} (\delta^* - 1) / \delta^{*3} \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} s^* \hat{=} s / \delta_0 \\ x^* \hat{=} x_i / \delta_0 \\ y^* \hat{=} y_i / \delta_0 \\ \theta^* \hat{=} \theta \\ \theta'^* \hat{=} \theta' \delta_0 \end{cases} \quad (\text{B.111})$$

Il ne reste maintenant que le nombre de capillarité Ca comme paramètre du système d'équations. Or en linéarisant le système pour les petits angles, on peut se ramener à un système d'équations sans aucun paramètre. On fait pour cela les simplifications suivantes :

$$\begin{cases} \theta^* \ll 1 \\ \cos \theta^* \simeq 1 \\ \sin \theta^* \simeq \theta^* \\ \delta^* \simeq y^* \end{cases} \Rightarrow \frac{\partial^3 y^*}{\partial x^{*3}} = 3 \text{Ca} \frac{y^* - 1}{y^{*3}} \quad (\text{B.112})$$

De cette équation, on peut éliminer le paramètre Ca par le changement de variables suivant :

$$\begin{cases} \tilde{x} \hat{=} x^* \text{Ca}^{1/3} = x_i \text{Ca}^{1/3} / \delta_0 \\ \tilde{y} \hat{=} y^* = y_i / \delta_0 \\ \tilde{\theta} \hat{=} \frac{\partial \tilde{y}}{\partial \tilde{x}} = \theta^* \text{Ca}^{-1/3} = \theta_i \\ \tilde{\theta}' \hat{=} \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \tilde{x}} = \theta'^* \text{Ca}^{-2/3} = \theta'_i \delta_0 \text{Ca}^{-2/3} \end{cases} \Rightarrow \boxed{\frac{\partial^3 \tilde{y}}{\partial \tilde{x}^3} = 3 \frac{\tilde{y} - 1}{\tilde{y}^3}} \quad (\text{B.113})$$

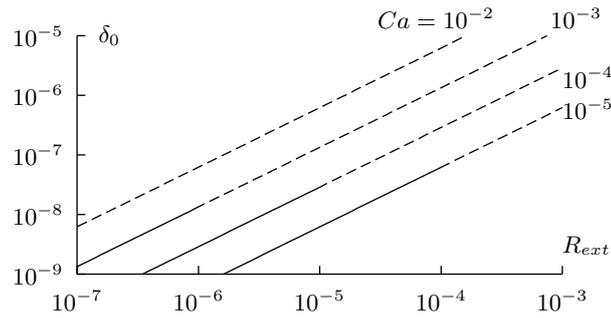


Figure B.12 – Épaisseur δ_0 du film de liquide en fonction du nombre de capillarité et du rayon de courbure macroscopique R_{ext} . La région en pointillés correspond à des valeurs du nombre de Reynolds supérieures à 1 dans la région proche du film (pour de l'eau à pression atmosphérique). Dans ces conditions, le modèle n'est pas fiable *a priori*.

Ce système est résolu avec les conditions aux limites suivantes :

$$\lim_{\tilde{x} \rightarrow -\infty} \tilde{y} = 1 \quad (\text{B.114})$$

$$\lim_{\tilde{x} \rightarrow -\infty} \tilde{y}' = 0 \quad (\text{B.115})$$

$$\lim_{\tilde{x} \rightarrow -\infty} \tilde{y}'' = 0 \quad (\text{B.116})$$

La solution de ce système est illustrée sur la figure B.11. L'épaisseur de film, l'angle et la courbure augmentent d'abord exponentiellement avant que la courbure ne s'infléchisse et ne converge vers une valeur constante $\tilde{\theta}' = 1.3376$. Pour la solution numérique présentée, nous avons fait démarrer le film à une épaisseur $\tilde{y} = 1 + 10^{-4}$. Pour $\tilde{x} > 9$, la valeur asymptotique de la courbure est atteinte à 10% près. Le film se raccorde donc naturellement à un ménisque de courbure constante.

Ce modèle fournit une relation entre la courbure macroscopique du ménisque c_{ext} , le nombre de capillarité et l'épaisseur δ_0 du film de liquide :

$$\delta_0 = \tilde{c}_0 \frac{\text{Ca}^{2/3}}{c_{ext}}, \quad \text{avec } \tilde{c}_0 \simeq 1.3376 \quad (\text{B.117})$$

La figure B.12 montre la relation entre l'épaisseur du film déposé, le rayon de courbure macroscopique et le nombre de capillarité.

Annexe C

Propriétés et méthode de résolution numérique des modèles de micro-région

Les modèles de micro-région se présentent sous la forme d'un système d'équations différentielles ordinaires non linéaires du premier ordre à plusieurs variables. Pour les résoudre, la démarche utilisée généralement consiste à faire appel à une méthode numérique. Peter Stephan a donné quelques précieux indices sur la façon d'intégrer le système d'équations de son modèle dans [78]. La méthode que nous avons mise en œuvre semble être très proche de celle de Stephan. On la décrit dans ces lignes. Ces équations peuvent aussi être abordées sous un angle analytique. Nous verrons ce qu'une linéarisation des équations peut apporter, à la fois pour aider la résolution numérique et pour obtenir des propriétés générales du système.

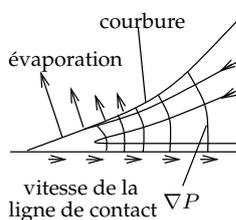
Nous utilisons un modèle simplifié introduit sous une forme légèrement différente par Morris [60]. Ce modèle permet de prédire le comportement de fluides partiellement mouillants. Nous proposons une démonstration simplifiée de l'expression analytique approchée de l'angle de contact donnée par Morris. Cette expression met en lumière le lien très étroit entre le modèle simplifié et le modèle de Stephan.

Cette étude aboutit finalement à une expression analytique approchée de l'angle de contact statique macroscopique pour le modèle de Stephan et pour le modèle de fluide partiellement mouillant.

C.1 Le modèle de micro-région de Stephan

Dans cette partie, on décrit le modèle de micro-région tel qu'il est présenté par Stephan [78]. Wayner en a aussi fait une description très accessible [88]. Le modèle se traduit par un système d'équations différentielles du premier ordre à une dimension dont on rappelle brièvement la construction.

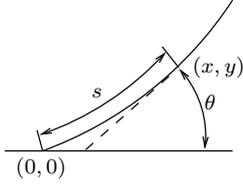
C.1.1 Établissement des équations du modèle



Le liquide s'évapore à petite échelle sous l'effet du flux de chaleur important. Le mouvement du liquide résulte du remplacement du liquide évaporé par du liquide venant des grandes échelles et du déplacement de la ligne de contact. Cet écoulement en régime visqueux s'accompagne d'un gradient de pression. La dif-

férence de pression entre le liquide et la vapeur est équilibrée par la courbure de l'interface lorsque le profil est stationnaire (voir figure ci-contre). À ce mécanisme de base s'ajoutent les effets de la pression de recul, des forces intermoléculaires et de la résistance d'interface.

Comme les très grands angles sont accessibles à notre modèle, l'interface sera représentée par deux fonctions $x(s)$ et $y(s)$ où s est l'abscisse curviligne, plutôt que par une fonction $y(x)$ comme l'ont fait Wayner et Stephan.



Le liquide subit les forces intermoléculaires (voir 1.2) qu'on exprimera sous la forme d'une force de volume $\mathbf{f} = \nabla P_d$. La pression de disjonction P_d dérive du potentiel des forces d'adhésion $P_d = A/y^3$. On suppose que le champ de vitesse et de pression dans le film vérifient l'équation de Navier-Stokes incompressible :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (\text{C.1})$$

$$\partial_t(\rho_l \mathbf{v}) + \mathbf{v} \cdot \nabla(\rho_l \mathbf{v}) + \nabla P - \mu_l \Delta \mathbf{v} = \mathbf{f} \quad (\text{C.2})$$

On élimine le second membre en considérant la pression réduite définie par

$$\tilde{P} \triangleq P - P_d \quad (\text{C.3})$$

et on suppose l'écoulement stationnaire et le nombre de Reynolds petit pour négliger la dérivée temporelle et le terme convectif. L'équation C.2 devient :

$$\nabla \tilde{P} - \mu_l \Delta \mathbf{v} = 0 \quad (\text{C.4})$$

Si l'angle de contact est inférieur à 30 degrés, l'approximation de lubrification convient (voir B.2.4) et conduit à l'expression suivante du gradient de pression :

$$\partial_x \tilde{P} = -\frac{3\mu V}{\delta^3} \quad (\text{C.5})$$

On montre en B.2.4 que cette équation reste assez précise jusqu'à 30° environ à condition de définir l'épaisseur de film δ comme étant la longueur de l'arc $\delta = R\theta = y\theta/\sin\theta$.

Le saut de pression à l'interface liquide-vapeur est la somme du saut de pression de Laplace et de la pression de recul (voir 1.3.2) :

$$P_v - P_l = P_\sigma - P_r = \sigma c - \dot{m}^2 \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) \quad (\text{C.6})$$

On définit la pression capillaire comme la somme du saut de pression à l'interface et de la pression de disjonction :

$$P_c \triangleq P_\sigma - P_r + P_d = \sigma c - \dot{m}^2 \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) + \frac{A}{y^3} \quad (\text{C.7})$$

En supposant que la pression est constante dans la vapeur, on obtient la relation suivante :

$$\partial_x P_c = \partial_x (P_\sigma - P_r) + \partial_x P_d \quad (\text{C.8})$$

$$= \partial_x P_v - \partial_x P_l + \partial_x P_d \quad (\text{C.9})$$

$$= -\partial_x \tilde{P} \quad (\text{C.10})$$

Le débit de liquide V dans le film est égal au signe près au débit de liquide qui s'évapore aux petites échelles (si le ménisque est stationnaire). On fait l'hypothèse que la contribution à l'évaporation du flux de chaleur dans vapeur est négligeable (la vaporisation est provoquée par le flux de chaleur à travers le film de liquide). On a alors

$$V(s) = -\int_0^s \frac{\dot{m}}{\rho_l} ds, \text{ avec } \dot{m} = \frac{q}{\mathcal{L}} \quad (\text{C.11})$$

où q est le flux de chaleur dans le liquide à l'interface. Reprenant la notation de Stephan, on exprime V en fonction du flux de chaleur intégré :

$$V(s) = -\frac{Q(s)}{\rho_l \mathcal{L}}, \text{ avec } Q(s) \doteq \int_0^s q(r) dr \quad (\text{C.12})$$

Par ailleurs, on exprime le flux de chaleur en fonction de la température de paroi, de la conductivité thermique du liquide et de la résistance d'interface

$$q = k_l \frac{T_s - T_{l,i}}{\delta} = \frac{T_{l,i} - T_{sat,local}}{R_i} = k_l \frac{T_s - T_{sat,local}}{\delta + \delta_R} \quad (\text{C.13})$$

où δ_R est l'épaisseur de liquide équivalente à la résistance d'interface (voir 1.1.2), $T_{l,i}$ la température du liquide à l'interface et $T_{sat,local}$ la température de saturation locale, tenant compte de la courbure de l'interface, des forces d'adhésion et de la pression de recul. L'épaisseur δ du film de liquide peut là encore être judicieusement définie comme la longueur de l'arc $r\theta$ pour obtenir une bonne approximation du flux de chaleur aux grands angles (voir A.2.1, transfert unidimensionnel). Rappelons l'expression de la température de saturation locale (voir 1.3.2) :

$$T_{sat,local} \doteq T_{sat}(P_v) \left(1 + \frac{P_\sigma + P_d}{\mathcal{L} \rho_l} \right) \quad (\text{C.14})$$

Il nous reste à exprimer l'équation de la géométrie de l'interface. La dérivée de la coordonnée (x, y) est le vecteur unitaire d'angle θ (angle de contact local). La dérivée de l'angle de contact est la courbure c que l'on déduit de la pression capillaire par l'expression C.7.

$$\partial_s x = \cos \theta \quad (\text{C.15})$$

$$\partial_s y = \sin \theta \quad (\text{C.16})$$

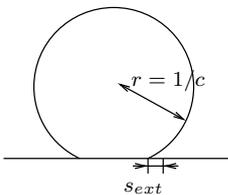
$$\partial_s \theta = c = \frac{1}{\sigma} (P_c + P_r - P_d) \quad (\text{C.17})$$

Le système complet est écrit dans le cadre C.1.

C.1.2 Conditions aux limites et méthode de résolution du système

Pour intégrer ce système d'équations différentielles ordinaires du premier ordre à cinq variables, nous devons spécifier cinq conditions aux limites.

Le profil de ménisque recherché se raccorde à un film adsorbé lorsque $s \rightarrow -\infty$. L'épaisseur δ_{adh} de ce film est telle que la température de saturation locale est égale à la température de la paroi, de sorte que le film est en équilibre thermodynamique et ne s'évapore pas (équation C.35). Cette contrainte fournit une condition aux limites en $s = -\infty$ pour l'épaisseur y (épaisseur du film), l'angle de contact (nul), et le flux de chaleur Q (nul aussi). À l'autre extrémité du ménisque, à l'échelle macroscopique $s = s_{ext}$, il faut imposer une contrainte géométrique sur le ménisque. Par exemple, si l'on sait que le ménisque se raccorde à une goutte de liquide ou à une bulle de vapeur de rayon connu, on peut imposer la courbure de l'interface. On peut aussi choisir d'imposer la pression capillaire P_c (équivalent à la première option car à l'échelle du raccord P_c est peu différent de P_σ). On pourrait aussi imposer un angle de contact macroscopique, mais une telle condition n'a que peu d'intérêt en pratique. La condition aux limites la plus naturelle consiste à imposer la courbure à l'échelle macroscopique. En général, on choisira une échelle de couplage petite devant la taille des bulles ou des gouttes, ce qu'on peut traduire par $c_{ext} \ll 1/s_{ext}$ (voir figure ci-contre). Une condition aux limites de courbure nulle convient donc très bien. Enfin, il faut ajouter une dernière condition aux limites, pour que la position de la ligne



Système différentiel :	Relations de fermeture :
$\partial_s x = \cos \theta$ (C.18)	$c \doteq \frac{1}{\sigma} (P_c + P_r - P_d)$ (C.28)
$\partial_s y = \sin \theta$ (C.19)	$P_\sigma \doteq \sigma c$ (C.29)
$\partial_s \theta = c$ (C.20)	$P_r \doteq \dot{m}^2 \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right)$ (C.30)
$\partial_s P_c = \frac{3 \mu_l V}{\delta^3}$ (C.21)	$P_d \doteq \frac{A}{y^3}$ (C.31)
$\partial_s Q = k_l \frac{T_s - T_{sat,local}}{\delta + \delta_R}$ (C.22)	$V \doteq - \frac{Q}{\rho_l \mathcal{L}}$ (C.32)
Conditions aux limites :	$\delta = \frac{y \theta}{\sin \theta}$ (C.33)
$\lim_{s \rightarrow -\infty} y(s) = \delta_{adh}$ (C.23)	$T_{sat,local} \doteq T_{sat}(P_v) \left(1 + \frac{P_\sigma + P_d}{\mathcal{L} \rho_l} \right)$ (C.34)
$y(0) = \delta_{adh} (1 + \epsilon)$ (C.24)	L'épaisseur initiale du film δ_{adh} est telle que $T_{sat,local} = T_s$. La courbure et le flux de chaleur étant nuls dans le film adsorbé, on a :
$\lim_{s \rightarrow -\infty} \theta(s) = 0$ (C.25)	
$c(s_{ext}) = c_{ext}$ (C.26)	
$\lim_{s \rightarrow -\infty} Q(s) = 0$ (C.27)	$\frac{A}{\delta_{adh}^3} = \mathcal{L} \rho_l \frac{T_s - T_{sat}(P_v)}{T_{sat}(P_v)}$ (C.35)

TAB. C.1 – Système d'équations gouvernant le profil de l'interface dans le modèle de Stephan (modèle original auquel on a ajouté la pression de recul et écrit en paramétrage $x(s), y(s)$).

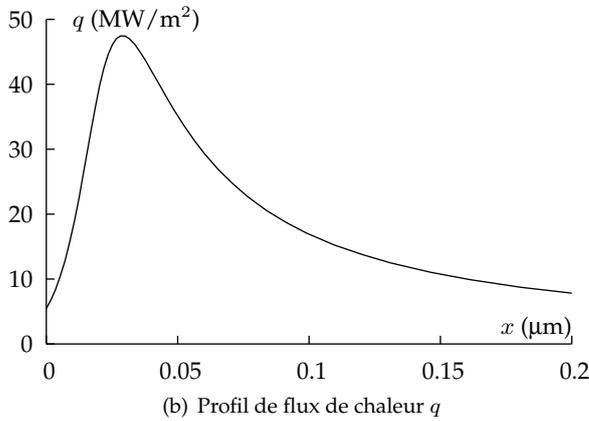
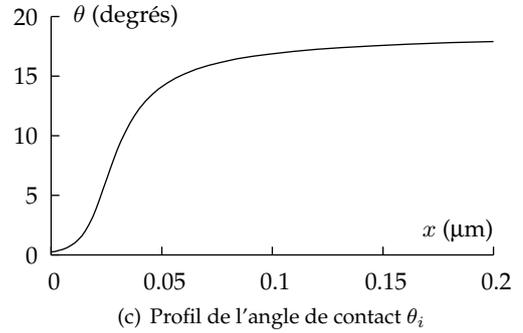
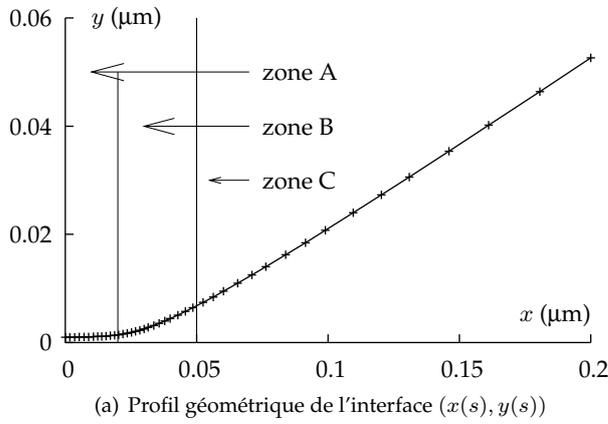
de contact soit proche de l'abscisse $s = 0$. Pour cela, on définit la position du pied du ménisque comme étant l'abscisse où $y = \delta_{adh} (1 + \epsilon)$, avec $\epsilon = 0.1$ par exemple, et on impose que le pied se trouve en $x = 0$ et $s = 0$.

La méthode de résolution du système d'équations est décrite en détail dans l'annexe C. On y analyse aussi le comportement du pied du ménisque en linéarisant le système d'équations. On montre en particulier qu'il existe une famille de solutions qui se raccordent à un film adsorbé en $s = -\infty$ et à une bulle ou une goutte de courbure quelconque en $s = s_{ext}$.

C.1.3 Propriétés générales du modèle de Stephan

La figure C.1 montre quelques profils typiques solutions du modèle de Stephan pour de l'ammoniac. Le cas de l'ammoniac à 300 K a été traité dans [78] et nous sert de référence pour vérifier notre procédure de résolution numérique. Les calculs qui servent d'illustration ont été conduits avec les paramètres physiques du tableau C.1(d).

La figure C.1(a) représente le profil géométrique de l'interface. On remarque la variation d'intervalle entre les points d'intégration liée au pas adaptatif de la méthode numérique. L'angle de contact, défini comme l'angle entre la tangente à l'interface et la paroi, est représenté sur la figure C.1(c). La figure C.1(b) montre le profil de flux de chaleur le long de l'interface. Sur la figure C.1(e), on a représenté la température de saturation locale $T_{sat,local} - T_{sat}$ et la température de surchauffe du liquide à l'interface par rapport à la température de saturation $T_{l,i} - T_{sat}$. Cette figure met en évidence la contribution des différents phénomènes physiques à la chute de température entre la paroi et la vapeur. La température baisse d'abord à la traversée du film de liquide (chute de température ΔT_l), puis à l'interface sous l'effet de la résistance d'interface (chute de ΔT_i), et enfin, une partie de la surchauffe de la paroi est «perdue» à cause de l'augmentation de la température de saturation locale ΔT_{sat} . Le graphique C.1(f) montre l'effet de la courbure



T_{sat}	300	K
T_s	301	K
ρ_l	600	kg m^{-3}
ρ_v	8.237	kg m^{-3}
k_l	0.458	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
\mathcal{L}	$1.159 \cdot 10^6$	J kg^{-1}
μ_l	$130.6 \cdot 10^{-6}$	Pa s
σ	0.02	N m^{-1}
r	488	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ (1)
A	$2 \cdot 10^{-21}$	J
R_i	$1.3 \cdot 10^{-8}$	$\text{K m}^2 \text{W}^{-1}$ (2)

- (1) r est la constante du gaz, avec $r = R/M$, $R = 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et M la masse molaire.
 (2) La résistance d'interface n'est pas exactement un paramètre puisqu'elle se déduit des autres propriétés physiques. On utilise un coefficient d'évaporation de 1 pour le calcul.

(d) Paramètres physiques utilisés pour ce calcul

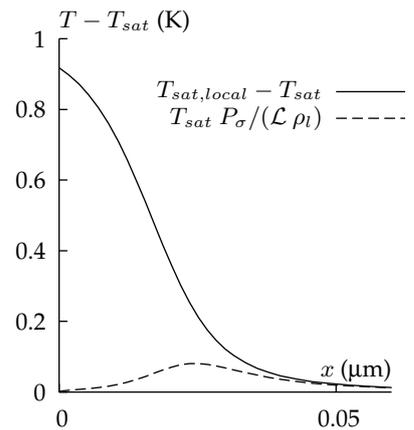
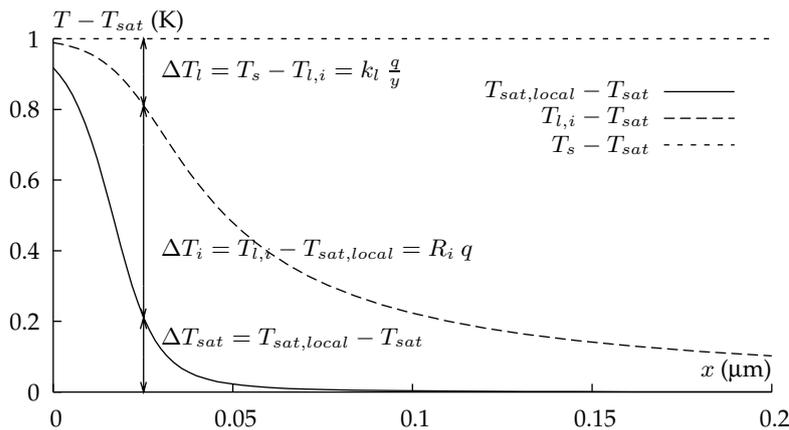


Figure C.1 – Profils typiques des solutions du modèle de Stephan. Les paramètres utilisés correspondent à de l'ammoniac à 20 bar, comme dans [78].

d'interface et des forces intermoléculaires sur la variation de la température de saturation.

Le flux de chaleur représenté sur la figure C.1(b) est proportionnel à ΔT_i .

On distingue trois zones dans le profil :

Zone A : le profil démarre par un film adsorbé dont l'épaisseur est telle que la température de saturation locale est égale à la température de la paroi (figure C.1(e)). Ainsi, le flux de chaleur dans le film adsorbé est nul. L'intégration du système démarre alors que l'épaisseur du film s'écarte déjà de sa valeur asymptotique, ce qui explique que le flux soit visiblement non nul à l'origine.

Zone B : dès que cette épaisseur de film augmente, la température de saturation locale chute et le flux thermique augmente. L'écoulement de liquide provoque une forte variation de la pression, donc de l'angle de contact à travers la relation de Laplace. Dans cette région, la température du liquide à l'interface $T_{l,i}$ est significativement différente de la température de saturation, et le flux de chaleur est essentiellement limité par la résistance d'interface (les courbes de température montrent une faible chute de température dans le film et une forte chute de température à l'interface). La courbure maximale de l'interface est située dans cette région (à $x = 25$ nm dans notre exemple), et survient alors que l'épaisseur de film est deux fois supérieure à sa valeur asymptotique. Dans cet exemple précis, le maximum de courbure coïncide approximativement avec le maximum du flux thermique mais ce résultat n'est pas général (il est lié à la résistance d'interface, dont l'épaisseur équivalente δ_R est particulièrement faible). À cet endroit, la pression de disjonction a été divisée par 8 par rapport à sa valeur dans le film adsorbé. À partir de ce point, la température de saturation locale est plus affectée par la courbure que par les forces intermoléculaires (figure C.1(f)).

Zone C : un peu plus loin, les contraintes visqueuses diminuent à mesure que l'épaisseur de film augmente, d'où une courbure faible. L'angle de contact tend ensuite rapidement vers sa valeur limite aux grandes échelles. Dans cette région, la résistance d'interface est négligeable et le flux de chaleur n'est plus limité que par l'épaisseur du film de liquide. La température de saturation locale est très proche de sa valeur normale.

C.1.4 Résolution du système d'équations

Dans cette partie, on s'intéresse à quelques propriétés du système d'équations. Pour commencer, nous construisons un système d'équations adimensionnalisés. Malheureusement, les nombres adimensionnels qui apparaissent sont difficilement interprétables et ne permettent pas d'obtenir une simplification du système.

Construction d'un système en variables adimensionnelles

Les grandeurs adimensionnelles présentées ici sont celles proposées par Stephan [78].

Les longueurs sont naturellement adimensionnalisées à l'aide de l'épaisseur du film adsorbé, dont l'expression se déduit de l'équation C.35 :

$$\delta_{adh} \hat{=} \left(\frac{A}{P_{c,adh}} \right)^{1/3}, \quad \text{avec } P_{c,adh} = \mathcal{L}\rho_l \frac{T_s - T_{sat}(P_v)}{T_{sat}(P_v)} \quad (\text{C.36})$$

Le flux de chaleur caractéristique Q_0 est choisi égal au flux de chaleur traversant une épaisseur δ_{adh} de liquide sur une surface de $\delta_{adh} \cdot 1 \text{ m}^2$:

$$Q_0 \hat{=} k_l (T_s - T_{sat}) \quad (\text{C.37})$$

On définit les grandeurs adimensionnelles suivantes : s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \tilde{y}}{\partial \tilde{x}} = \tilde{y}' \quad (\text{C.46})$$

$$\tilde{x} \triangleq \frac{x}{\delta_{adh}}, \quad \delta_{adh} \triangleq \left(\frac{A}{P_{c,adh}} \right)^{1/3} \quad (\text{C.41}) \quad \frac{\partial \tilde{y}'}{\partial \tilde{x}} = D_1 (1 + \tilde{y}'^2)^{1.5} \left(\tilde{P}_c - \frac{1}{\tilde{y}^3} \right) \quad (\text{C.47})$$

$$\tilde{y} \triangleq \frac{y}{\delta_{adh}} \quad (\text{C.42}) \quad \frac{\partial \tilde{P}_c}{\partial \tilde{x}} = -D_2 \frac{\tilde{Q}}{\tilde{y}^3} \quad (\text{C.48})$$

$$\tilde{\theta} \triangleq \theta \quad (\text{C.43}) \quad \frac{\partial \tilde{Q}}{\partial \tilde{x}} = \frac{1 - \tilde{P}_c}{\tilde{y} + D_3} \quad (\text{C.49})$$

$$\tilde{P}_c \triangleq \frac{P_c}{P_{c,adh}}, \quad P_{c,adh} = \mathcal{L} \rho_l \frac{T_s - T_{sat}(P_v)}{T_{sat}(P_v)} \quad (\text{C.44})$$

$$\tilde{Q} \triangleq \frac{Q}{Q_0}, \quad Q_0 \triangleq k_l (T_s - T_{sat}) \quad (\text{C.45}) \quad D_1 \triangleq \frac{\delta_{adh} P_{c,adh}}{\sigma} \quad (\text{C.50})$$

$$D_2 \triangleq \frac{3 \mu_l k_l (T_s - T_{sat})}{\rho_l \mathcal{L} \delta_{adh}^2 P_{c,adh}} \quad (\text{C.51})$$

$$D_3 \triangleq \frac{R_i k_l}{\delta_{adh}} = \frac{\delta_R}{\delta_{adh}} \quad (\text{C.52})$$

En paramétrage $y = f(x)$, le système d'équations

TAB. C.2 – Système d'équations du modèle de Stephan en variables adimensionnelles.

La définition des variables adimensionnelles et le système d'équations correspondant sont reportés dans le tableau C.2. Pour un système donné, le paramètre qui varie le plus est la température de surchauffe de la paroi $T_s - T_{sat}$. On peut aussi considérer des variations de pression, mais les nombres adimensionnels D_1 , D_2 , et D_3 ne sont sensibles qu'aux variations relatives de pression, qui restent souvent assez faibles dans un système donné. La dépendance des trois nombres adimensionnels envers la température de surchauffe est la suivante :

$$D_1 \sim (T_s - T_{sat})^{2/3} \quad (\text{C.38})$$

$$D_2 \sim (T_s - T_{sat})^{2/3} \quad (\text{C.39})$$

$$D_3 \sim (T_s - T_{sat})^{1/3} \quad (\text{C.40})$$

Solutions du système linéarisé

On s'intéresse aux solutions du système d'équations qui se raccordent à un film de liquide d'épaisseur constante δ_{adh} en $\tilde{x} \rightarrow -\infty$. On étudie le pied du ménisque en linéarisant le système d'équations pour des valeurs des variables proches de la solution du film, c'est-à-dire $\tilde{y} \simeq 1$, $\tilde{y}' \simeq 0$, $\tilde{P}_c \simeq 1$ et $\tilde{Q} \simeq 0$. On définit donc le vecteur suivant, qui tend vers zéro dans le film :

$$\mathbf{X} \triangleq \begin{bmatrix} \tilde{\delta} - 1 \\ \tilde{\delta}' \\ \tilde{P}_c - 1 \\ \tilde{Q} \end{bmatrix} \quad (\text{C.53})$$

Le système linéarisé s'écrit alors sous la forme matricielle suivante :

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \mathbf{X} = \mathbf{M} \mathbf{X}, \quad \text{avec } \mathbf{M} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 3 D_1 & 0 & D_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -D_2 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{1+D_3} & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{C.54})$$

Le polynôme caractéristique de la matrice \mathbf{M} est :

$$P_M(\lambda) = (\lambda^2 - 3 D_1) \left(\lambda^2 - \frac{D_2}{1 + D_3} \right) \quad (\text{C.55})$$

On appelle $\lambda_1, -\lambda_1, \lambda_2$ et $-\lambda_2$ les racines de P_M et X_λ le vecteur propre à droite de la matrice M tel que :

$$M X_\lambda = \lambda X_\lambda \quad (\text{C.56})$$

La solution générale du système d'équations différentielles linéarisées s'écrit :

$$\lambda_1 = \sqrt{3 D_1} \quad (\text{C.57})$$

$$\lambda_2 = \sqrt{\frac{D_2}{1 + D_3}} \quad (\text{C.58})$$

$$\mathbf{X}(\tilde{x}) = a e^{\lambda_1 \tilde{x}} \mathbf{X}_{\lambda_1} + b e^{-\lambda_1 \tilde{x}} \mathbf{X}_{-\lambda_1} + c e^{\lambda_2 \tilde{x}} \mathbf{X}_{\lambda_2} + d e^{-\lambda_2 \tilde{x}} \mathbf{X}_{-\lambda_2} \quad (\text{C.59})$$

Parmi ces solutions, on ne retient que celles qui tendent vers zéro quand $\tilde{x} \rightarrow -\infty$, c'est-à-dire que l'on a $b = d = 0$. L'ensemble des solutions est alors paramétré par a et c . Un paramétrage différent de cet ensemble permet de caractériser l'ensemble des solutions :

$$\mathbf{X}(\tilde{x}) = a \left(e^{\lambda_1(\tilde{x}-\tilde{x}_0)} \mathbf{X}_{\lambda_1} + e^{\lambda_2(\tilde{x}-\tilde{x}_0)} \mathbf{X}_{\lambda_2} \right) \quad (\text{C.60})$$

Les solutions du système linéarisé apparaissent comme des translations et des multiples d'une fonction unique. Or, le degré de liberté \tilde{x}_0 associé à la translation n'est pas imposé dans notre problème et peut être choisi arbitrairement. Il conduit à des profils d'interface identiques mais décalés sur l'axe des abscisses. Le paramètre a conduit par contre à une famille de profils d'interface non superposables.

On vient de démontrer que le système d'équations du modèle de Stephan admet une famille à un paramètre de solutions telles que le ménisque se raccorde à un film en paroi en $\tilde{x} \rightarrow -\infty$ et telles que le pied du ménisque se trouve à une abscisse \tilde{x}_0 imposée. Ce degré de liberté permet de raccorder la ligne de contact au problème macroscopique. Par exemple si on connaît le rayon de courbure du ménisque à grande échelle, le paramètre a peut être choisi de façon à raccorder la solution à cette courbure imposée.

Méthode de résolution numérique

Le modèle de micro-région pour un fluide parfaitement mouillant est le système le plus difficile à intégrer, car les forces de van der Waals sont fortement non linéaires.

L'étude du système linéarisé a montré qu'il existe une classe de solutions du système qui se raccordent à un film de liquide en $s \rightarrow -\infty$. Nous savons que cette classe est un espace vectoriel de dimension 2, et que l'on peut réduire celui-ci à un espace à une dimension si l'on impose la position du pied du ménisque en $s = 0$ et $x = 0$. L'espace vectoriel ne contient plus alors qu'une famille à un paramètre. Celui-ci permet de construire une solution dont la courbure est imposée à l'échelle macroscopique.

Si on cherche à intégrer le système d'équations différentielles sur une courte distance (jusqu'à la sortie de la micro-région par exemple), le calcul numérique est relativement aisé. Il suffit d'utiliser une méthode d'intégration numérique de bonne précision (nous avons utilisé une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 à pas adaptatif, telle qu'elle est décrite dans les Numerical Recipes [1]).

En revanche, si on cherche à intégrer le système jusqu'à l'échelle macroscopique (par exemple pour obtenir en une seule fois le profil du ménisque sur tout le domaine), la précision numérique devient systématiquement insuffisante. En effet, le système d'équations est de type «chaotique», c'est-à-dire que deux solutions pratiquement identiques au niveau de la ligne de contact s'éloignent exponentiellement l'une de l'autre quand \tilde{x} augmente. En règle générale, un écart

relatif de 10^{-16} sur la condition initiale d'intégration conduit à deux solutions complètement différentes dès que $\tilde{x} > 1000$. Il n'est donc pas possible d'utiliser une méthode de tir simple pour raccorder le ménisque à un problème macroscopique pour lequel \tilde{x} est souvent supérieur à 10^5 . C'est pourquoi on intègre le système en plusieurs fois. Après avoir déterminé avec la meilleure précision possible les paramètres initiaux pour intégrer le système jusqu'à $\tilde{x} = 1000$ (ou plus généralement le plus loin possible de sorte que l'angle de contact ne diverge pas), on utilise une nouvelle méthode de tir à partir de ce point en faisant varier des conditions initiales. Le processus est répété jusqu'à l'arrivée à l'échelle macroscopique.

La difficulté d'intégration numérique des équations est un obstacle non négligeable à la mise en œuvre de ce type de modèle. Par ailleurs, nous ne sommes pas parvenus à obtenir une solution simplifiée car les non-linéarités sont très importantes. La solution proposée pour obtenir un modèle facilement applicable consiste à calculer les solutions en fonction de la température de surchauffe et à construire une corrélation de l'angle de contact et du flux de chaleur en fonction de ce paramètre. La corrélation n'est cependant valable que pour un fluide et une pression donnée.

C.2 Modèle de micro-région pour une ligne de contact dynamique

C.2.1 Modèle de fluide parfaitement mouillant

Nous nous proposons d'étendre le modèle de Stephan [78] pour tenir compte du déplacement de la ligne de contact et de la pression de recul. Ce modèle a été décrit dans [53].

Description du modèle, système d'équations

Notre système est construit sur le même principe et on passe donc assez rapidement sur les points communs avec le modèle de Stephan (voir le début de l'annexe pour ces points particuliers).

L'expression de la courbure en fonction du saut de pression est identique à celle du modèle de Stephan. On définit la pression capillaire P_c comme la somme du saut de pression à l'interface et de la pression de disjonction

$$P_c \triangleq P_\sigma - P_r + P_d, \quad \text{avec } P_c \triangleq \sigma c, \quad P_r \triangleq \dot{m}^2 \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right), \quad P_d \triangleq \frac{A}{y^3} \quad (\text{C.61})$$

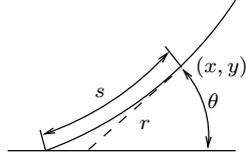
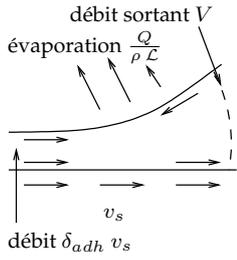
où y est l'épaisseur du film de liquide à l'abscisse s . On a la relation suivante sur le saut de pression à l'interface :

$$P_v - P_l = P_\sigma - P_r = P_c - P_d \quad (\text{C.62})$$

On montre par ailleurs que la pression P_c vérifie :

$$\nabla P_c = -\mu_l \Delta v \quad (\text{C.63})$$

Dans le modèle de Stephan, la vitesse du fluide résulte de l'évaporation du liquide à petite échelle. Dans ce modèle étendu, nous ajoutons le champ de vitesse dû au déplacement de la ligne de contact. On considère que le champ de vitesse est la superposition de deux solutions élémentaires (voir annexe B). La première correspond à un écoulement de liquide en direction de l'origine avec un débit linéique V (compté positivement pour une source de liquide à l'origine) et une vitesse de paroi nulle. Pour calculer ce débit, il faut tenir compte du fait que, dans le



référentiel mobile associé à la ligne de contact, le film de liquide d'épaisseur δ_{adh} se déplace à la vitesse v_s de la paroi et apporte donc un débit $v_s \delta_{adh}$ (voir figure ci-contre). Le débit de liquide évaporé est une fonction du flux de chaleur Q intégré entre l'origine et l'abscisse s . On a :

$$V = -\frac{Q}{\rho_l \mathcal{L}} + v_s \delta_{adh} \quad (\text{C.64})$$

La deuxième solution élémentaire correspond à une vitesse de déplacement v_s de la paroi et un débit V nul. L'expression du gradient de pression à l'interface liquide-vapeur en fonction de V et v_s est déduite des équations B.39 et B.57

$$\frac{\partial P_c}{\partial s} = -\mu_l \left(V \frac{1}{r^3} f_V(\theta_i) + v_s \frac{1}{r^2} f_v(\theta_i) \right) \quad (\text{C.65})$$

avec :

$$f_V(\theta) \hat{=} \frac{8}{2\theta_i \cos(2\theta_i) - \sin(2\theta_i)} = -\frac{3}{\theta^3} + o(\theta^{-3}) \quad (\text{C.66})$$

$$f_v(\theta) \hat{=} \frac{4 \sin(\theta_i)}{2\theta_i - \sin(2\theta_i)} = \frac{3}{\theta^2} + o(\theta^{-2}) \quad (\text{C.67})$$

$$r \hat{=} \frac{y}{\sin \theta} \quad (\text{C.68})$$

Les équivalents des fonctions f_V et f_v sont valables pour les petits angles. Avec ces équivalents, on retrouve bien l'expression du gradient de pression dans l'hypothèse de lubrification :

$$\theta \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{\partial P_c}{\partial s} \sim \mu_l \left(\frac{3V}{y^3} - \frac{3v_s}{y^2} \right) \quad (\text{C.69})$$

Enfin, l'équation qui régit le flux de chaleur \dot{q} à l'interface et son intégrale Q est identique à celle du modèle de Stephan à un détail près : l'épaisseur du film de liquide pour l'évaluation de la résistance thermique du liquide est remplacée par $(r \theta_i)$, qui fournit une meilleure approximation aux grands angles. Rappelons le mécanisme en quelques mots : la température de saturation est localement affectée par la courbure de l'interface au travers de P_σ et par les forces intermoléculaires au travers de P_d . Le flux de chaleur qui passe de la paroi à l'interface est calculé par l'application de la différence de température $T_s - T_{sat,local}$ entre la paroi et l'interface à l'épaisseur du film de liquide. La résistance d'interface s'ajoute à la résistance thermique du film. Ce raisonnement conduit à l'expression suivante du flux de chaleur :

$$\frac{\partial Q}{\partial s} = \dot{q}, \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \dot{q} \hat{=} k_l \frac{T_s - T_{sat,local}}{r \theta_i + \delta_R}, \\ T_{sat,local} \hat{=} T_{sat}(P_v) \left(1 + \frac{P_\sigma + P_d}{\mathcal{L} \rho_l} \right) \end{cases} \quad (\text{C.70})$$

Rappelons que δ_R est l'épaisseur équivalente de résistance d'interface que l'on a construit en 1.1.2 et que l'expression de la température de saturation locale $T_{sat,local}$ a été construite en 1.2.2.

Nous disposons maintenant d'un ensemble fermé d'équations pour décrire le profil du ménisque. Ce système est écrit complètement dans le cadre C.3. La différence essentielle avec les modèles de Wayner et de Stephan se trouve dans l'équation C.74 qui tient compte à la fois de l'évaporation du liquide et du déplacement de la ligne de contact.

Système différentiel :	Relations de fermeture :
$\partial_s x = \cos \theta$ (C.71)	$c \hat{=} \frac{1}{\sigma} (P_c + P_r - P_d)$ (C.81)
$\partial_s y = \sin \theta$ (C.72)	$P_\sigma \hat{=} \sigma c$ (C.82)
$\partial_s \theta = c$ (C.73)	$P_r \hat{=} \dot{m}^2 \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right)$ (C.83)
$\partial_s P_c = -\mu_l \left(V \frac{1}{r^3} f_V(\theta_i) + v_s \frac{1}{r^2} f_v(\theta_i) \right)$ (C.74)	$P_d \hat{=} \frac{A}{y^3}$ (C.84)
$\partial_s Q = k_l \frac{T_s - T_{sat,local}}{r \theta + \delta_R}$ (C.75)	$V \hat{=} -\frac{Q}{\rho_l \mathcal{L}} + v_s \delta_{adh}$ (C.85)
Conditions aux limites :	$r \hat{=} \frac{y}{\sin \theta}$ (C.86)
$\lim_{s \rightarrow -\infty} y(s) = \delta_{adh}$ (C.76)	$T_{sat,local} \hat{=} T_{sat}(P_v) \left(1 + \frac{P_\sigma + P_d}{\mathcal{L} \rho_l} \right)$ (C.87)
$y(0) = \delta_{adh}(1 + \epsilon)$ (C.77)	L'épaisseur initiale du film δ_{adh} est telle que $T_{sat,local} = T_s$. La courbure et le flux de chaleur étant nuls dans le film adsorbé, on a :
$\lim_{s \rightarrow -\infty} \theta(s) = 0$ (C.78)	
$c(s_{ext}) = c_{ext}$ (C.79)	
$\lim_{s \rightarrow -\infty} Q(s) = 0$ (C.80)	$\frac{A}{\delta_{adh}^3} = \mathcal{L} \rho_l \frac{T_s - T_{sat}(P_v)}{T_{sat}(P_v)}$ (C.88)

TAB. C.3 – Système d'équations gouvernant le profil de l'interface dans le modèle de fluide parfaitement mouillant (modèle de Stephan auquel on a ajouté la pression de recul et la dynamique de la ligne de contact).

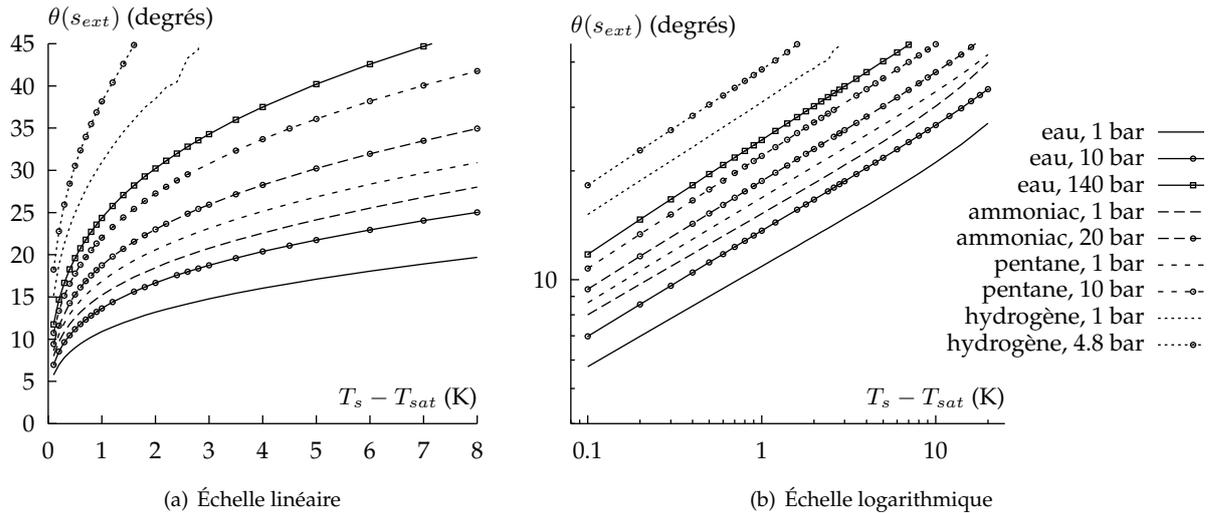


Figure C.2 – Angle de contact statique macroscopique obtenu par le modèle du cadre C.3 (modèle de fluide parfaitement mouillant) pour différents fluides et pour différentes conditions de pression.

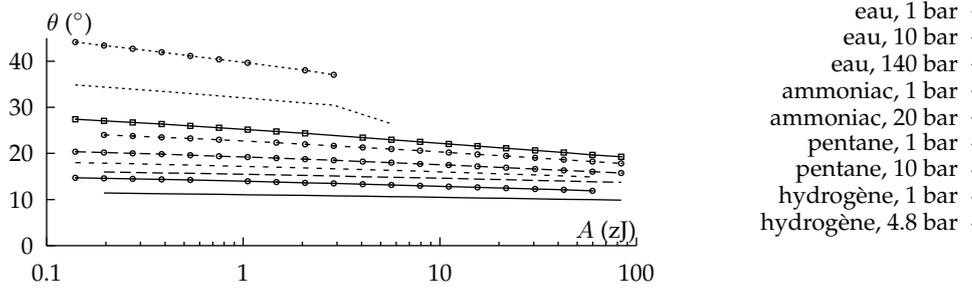


Figure C.3 – Influence de la valeur de la constante de Hamaker sur l’angle de contact macroscopique pour le modèle du cadre C.3. Un zJ représente 10^{-21} J et se lit «zepto Joule». La méthode numérique a échoué lors de l’intégration du système pour l’hydrogène aux grandes valeurs de A.

Influence des paramètres physiques

La figure C.2 montre l’influence de la température et de la pression sur l’angle de contact macroscopique pour différents fluides.

Si on se limite à certains fluides courants (eau, ammoniac, pentane, etc.), on constate que l’angle de contact statique varie de zéro à quelques dizaines de degrés pour des surchauffes de quelques K. Il est rare que cet angle dépasse 40° sauf si la surchauffe de la paroi est très importante. Par ailleurs, l’angle augmente très rapidement pour de faibles surchauffes, si bien qu’au-delà d’une fraction de K de surchauffe l’angle de contact dépasse 5 à 10° . Ainsi, dans une large gamme de régimes d’ébullition, l’angle de contact statique prévu par le modèle est compris entre 5 et 40 degrés.

La gamme de température envisagée est généralement très étendue en comparaison de ce que l’expérience permet d’atteindre. Ainsi, des températures de surchauffe inférieures à 0.1 K ne sont atteintes que dans des transitoires où l’on passe par la température de saturation ou des expériences très finement contrôlées. À l’autre extrémité de la gamme, les liquides sont généralement très instables au-delà de quelques K de surchauffe (et beaucoup moins pour l’hydrogène).

Le graphique en échelle logarithmique montre clairement que la dépendance de l’angle de contact avec la température suit une «loi puissance». Une régression permet de montrer qu’elle s’écrit

$$\theta_i(T_s - T_{sat}) \simeq \theta_0 (T_s - T_{sat})^{0.3} \tag{C.89}$$

où θ_0 représente l’angle de contact pour une surchauffe de 1 K (voir tableau ci-contre). Par ailleurs, on constate qu’à une température de surchauffe donnée, l’angle augmente avec la pression de travail.

fluide	P (bar)	θ_0 ($^\circ$)
eau	1	10.9
eau	10	13.6
eau	140	24.3
ammoniac	1	15.2
ammoniac	20	18.8
pentane	1	16.8
pentane	10	22.0
hydrogène	1	30.1
hydrogène	4.8	38.1

La constante de Hamaker A est un paramètre important du modèle : elle détermine l’épaisseur du film de liquide adsorbé à la paroi. Or, cette constante n’est pas toujours connue avec précision pour tous les couples fluide/paroi. Il est donc intéressant de déterminer si le modèle y est sensible ou non. Ayant mis en évidence une dépendance simple vis-à-vis de la température de la paroi, nous utilisons une température de surchauffe fixée de 1 K. La figure C.3 montre la variation de l’angle de contact en fonction de la valeur de la constante de Hamaker. On peut constater que l’angle de contact est peu sensible à cette valeur. Comme la valeur de la constante de Hamaker de la plupart des fluides est située dans l’intervalle couvert par la figure, la valeur médiane de $A = 2$ zJ utilisée par Stephan convient la plupart du temps. À notre connaissance, aucune expérience ne permet pour l’instant de mettre en évidence l’influence de ce paramètre sur l’angle de contact.

Pour finir cette étude de l’angle de contact statique, il est intéressant de

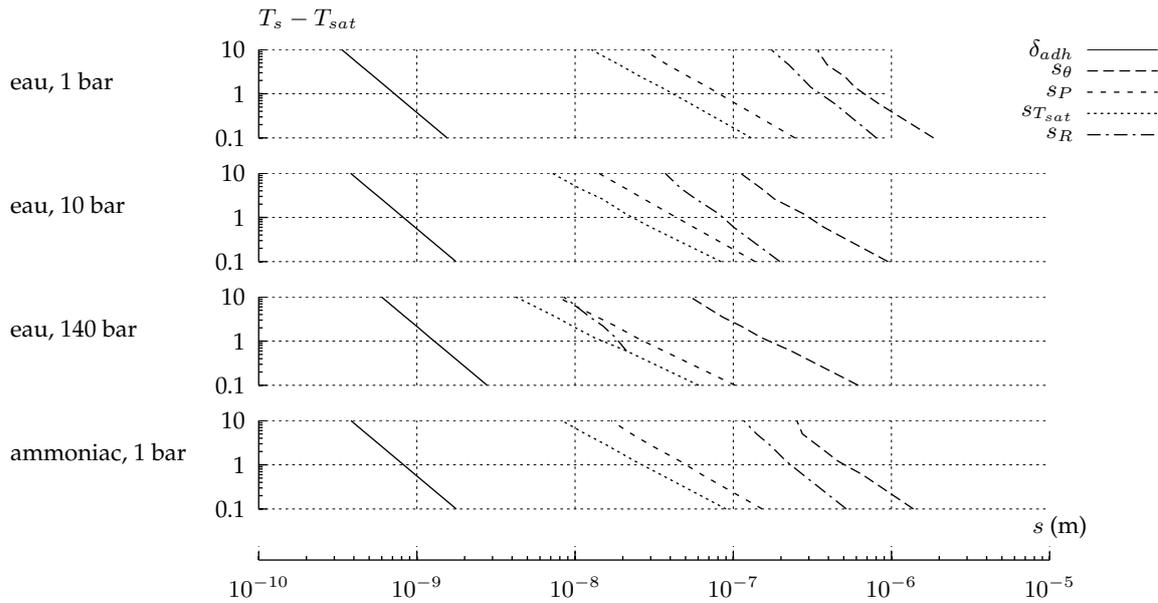


Figure C.4 – Échelles de longueur caractéristiques du modèle de Stephan en fonction de la température.

connaître la taille des différentes régions caractéristiques du modèle :

- l'épaisseur δ_{adh} du film,
- l'échelle s_P où la pression capillaire P_c est dominée par les forces d'adhésion, c'est-à-dire $|P_d| > |P_\sigma|$,
- l'échelle $s_{T_{sat}}$ où la température de saturation atteint la moitié de la surchauffe (échelle de coupure du flux de chaleur),
- l'échelle s_R de coupure de résistance d'interface définie par $s \theta = \delta_R$ (deuxième échelle de coupure du flux de chaleur),
- l'échelle s_θ où l'angle de contact atteint sa valeur asymptotique à 5% près $\theta(s_\theta) = 0.95 \theta_{macro}$ (valeur choisie arbitrairement).

Ces valeurs sont tracées pour quelques cas représentatifs sur la figure C.4. On peut remarquer que la variation de l'angle de contact a lieu sur une région relativement petite qui s'étend sur un à deux ordres de grandeur environ, entre $s_{T_{sat}}$ et s_θ . On peut constater aussi que l'échelle de coupure de la résistance d'interface s_R n'est pas un critère adéquat pour déterminer l'étendue de la micro-région. À haute pression, la résistance d'interface est très réduite et l'angle de contact varie encore significativement dans le domaine conducteur $s > s_R$. Or, la température de la paroi peut y varier significativement si la conductivité thermique de la paroi n'est pas très grande. Cette variation de température de la paroi n'est pas prise en compte dans le modèle de micro-région. C'est pourquoi il faut parfois tenir compte du champ de température dans la paroi dans le calcul de la micro-région.

Conclusion sur le modèle de fluide parfaitement mouillant

Ce modèle fournit un cadre théorique très intéressant pour le calcul de l'angle de contact et du flux de chaleur à la ligne de contact. On ne trouve cependant que très peu de références où ce type de modèle a été confronté à des expériences. Par exemple, Cook *et al.* [13] utilisent l'interférométrie optique pour mesurer le profil d'un ménisque de décane sur du silicium. L'ordre de grandeur du flux linéique de chaleur obtenu (quelques $W m^{-1}$) est en accord avec nos calculs, mais la température de paroi qu'ils mesurent n'est pas directement interprétable. Les angles de contact mesurés sont très faibles, et limités par le principe de mesure retenu.

Des expériences ont donc confirmé la pertinence de ce modèle. Nous voyons

Système différentiel :		Relations de fermeture :	
$\partial_s x = \cos \theta$	(C.90)	$c \hat{=} \frac{1}{\sigma} (P_c + P_r)$	(C.99)
$\partial_s y = \sin \theta$	(C.91)	$P_\sigma \hat{=} \sigma c$	(C.100)
$\partial_s \theta = c$	(C.92)	$P_r \hat{=} \dot{m}^2 \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right)$	(C.101)
$\partial_s P_c = -\mu_l \left(V \frac{1}{r^3} f_V(\theta_i) + v_s \frac{1}{r^2} f_v(\theta_i) \right)$	(C.93)	$V \hat{=} - \frac{Q}{\rho_l \mathcal{L}}$	(C.102)
$\partial_s Q = k_l \frac{T_s - T_{sat,local}}{r \theta + \delta_R}$	(C.94)	$r = \frac{y + l_s}{\sin \theta}$	(C.103)
Conditions aux limites :		$T_{sat,local} \hat{=} T_{sat}(P_v) \left(1 + \frac{P_\sigma}{\mathcal{L} \rho_l} \right)$	(C.104)
$x(0) = y(0) = 0$	(C.95)		
$\theta(0) = \theta_{mic}$	(C.96)		
$c(s_{ext}) = c_{ext}$	(C.97)		
$Q(0) = 0$	(C.98)		

TAB. C.4 – Système d'équations gouvernant le profil de l'interface dans le modèle de fluide partiellement mouillant.

cependant au moins deux raisons de ne pas fonder une modélisation générale de la ligne de contact sur ce modèle :

- la première est qu'il représente des fluides parfaitement mouillants, ce qui ne convient généralement que sur des métaux chimiquement propres (non oxydés) ou pour de l'eau sur du verre. Les surfaces courantes montrent systématiquement un angle de contact isotherme non nul.
- La deuxième raison est qu'il donne un rôle fondamental à l'hydrodynamique du fluide à des échelles inférieures à 1 μ m. À ces échelles, peu de surfaces peuvent être considérées comme parfaitement planes et homogènes. Il suffit par exemple d'observer une goutte d'eau sur une plaque métallique : l'angle de contact peut prendre pratiquement n'importe quelle valeur entre quelques degrés et l'angle droit ou plus encore. Dans ce cas, il est impossible d'appliquer le modèle pour calculer le flux de chaleur.

Pour ces deux raisons, nous avons choisi un modèle un peu différent dans lequel l'angle de contact est un paramètre ajustable. Un tel modèle pourrait alors être utilisé pour décrire n'importe quelle ligne de contact.

C.2.2 Modèle de fluide partiellement mouillant

Le modèle proposé s'appuie à la fois sur les arguments de Dussan sur le glissement du liquide à la paroi et sur le modèle de Stephan pour décrire le transfert de chaleur à petite échelle. Nous l'avons décrit dans [54]. Ce modèle a aussi été proposé par Morris [60] sous une forme très similaire (au lieu de relaxer la contrainte visqueuse par une condition de glissement, Morris suppose l'existence d'une couche de liquide sur la paroi, ce qui se traduit exactement de la même façon dans les équations mais limite le modèle à un angle de contact microscopique nul).

Le modèle consiste à remplacer les forces d'adhésion par une hypothèse de glissement à la paroi, caractérisée par une longueur de glissement l_s . Dans ce modèle, on ne suppose plus la présence d'un film adsorbé en paroi mais celle d'une vraie ligne de contact. On impose alors l'angle de contact microscopique θ_{mic} , qui est un paramètre du modèle. Enfin, la température de saturation ne dépend plus que de la courbure de l'interface et non des forces d'adhésion. L'écriture du modèle est peu différente du modèle de Stephan étendu à la ligne de contact dynamique et les méthodes de résolution numériques sont très similaires. Les équations du modèle sont écrites dans le cadre C.4.

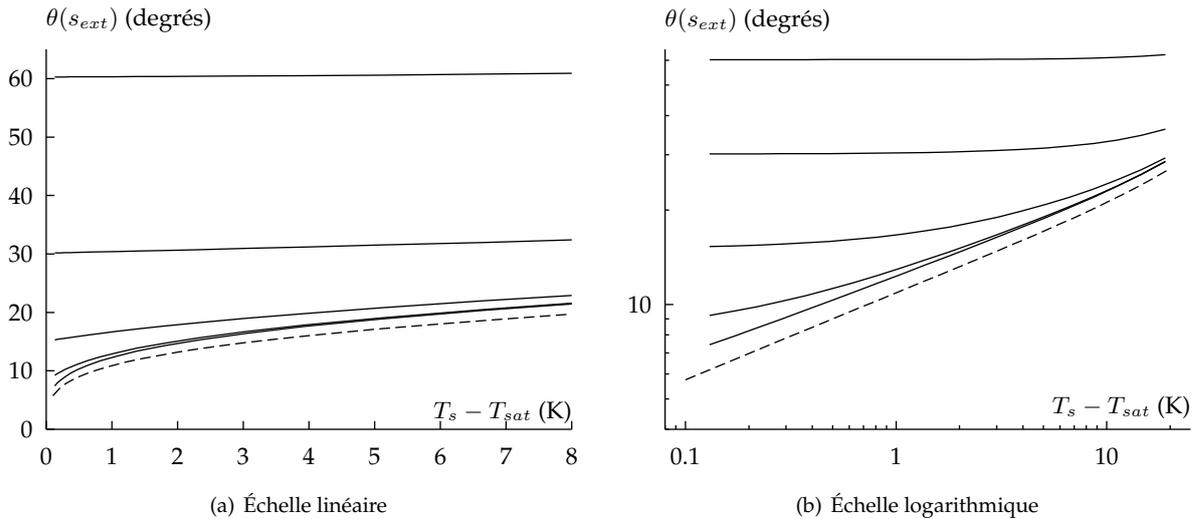


Figure C.5 – Angle de contact statique macroscopique obtenu par le modèle du cadre C.4 (modèle de fluide partiellement mouillant pour de l'eau à pression atmosphérique et différents angles de contact microscopiques (dans l'ordre croissant : $\theta_i \in \{4^\circ, 8^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 60^\circ\}$). La longueur de glissement a été fixée à 10^{-10} m. On a tracé en pointillés la solution du modèle de fluide parfaitement mouillant pour de l'eau dans les mêmes conditions : la pente est très légèrement différente sur le graphique en échelle logarithmique et la courbe est décalée vers le bas.

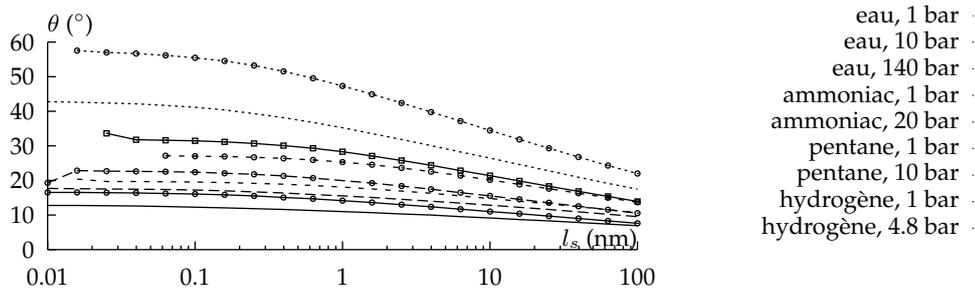


Figure C.6 – Influence de la valeur de la longueur de glissement l_s sur l'angle de contact statique macroscopique pour le modèle du cadre C.4 (fluide partiellement mouillant). On a choisi un angle de contact microscopique très faible de 4° correspondant aux plus fortes variations d'angle de contact.

Comportement de l'angle de contact statique

La figure C.5 représente l'angle de contact macroscopique en fonction de la température du surchauffe de la paroi et de l'angle de contact microscopique calculé pour de l'eau à pression atmosphérique à partir du modèle de fluide partiellement mouillant. Dans le modèle de fluide parfaitement mouillant, le paramètre physique qui déterminait le comportement du fluide à l'échelle moléculaire était la constante de Hamaker A . Dans ce modèle, ce paramètre a été remplacé par la longueur de glissement l_s . La figure C.6 montre l'influence de l_s sur l'angle de contact macroscopique pour différents fluides.

Ces graphiques permettent de tirer des conclusions générales sur le modèle de fluide partiellement mouillant :

- L'angle de contact macroscopique est très sensible à la température de la paroi lorsque l'angle microscopique est petit (inférieur à 20°). Pour des angles θ_{mic} supérieurs à 30° , l'influence de la température devient négligeable.
- Pour des angles de contact θ_{mic} intermédiaires compris entre 5° et 20° , l'angle de contact macroscopique est constant jusqu'à une certaine tempé-

rature, puis il augmente en suivant une loi indépendante de θ_{mic} . Cette remarque permet de construire une expression approchée de l'angle de contact macroscopique.

- L'angle de contact macroscopique dépend assez peu de la longueur de glissement. Il décroît de moins d'un facteur 2 lorsque l_s varie de plusieurs ordres de grandeur.
- Le modèle de fluide parfaitement mouillant et le modèle de fluide partiellement mouillant sont très similaires comme le montre la courbe en pointillé de la figure C.5. En regardant les courbes de la figure C.6, on constate qu'il est facile de trouver une valeur de la longueur de glissement telle que les deux modèles se recoupent. La figure C.6 suggère qu'il existe une relation entre l'épaisseur du film de liquide adsorbé du modèle C.3 et la longueur de glissement du modèle C.4. Dans les deux cas, l'angle de contact diminue lentement quand cette longueur caractéristique augmente.

Ce modèle semble être en mesure de rendre compte du comportement d'un fluide parfaitement mouillant pour peu que l'on choisisse une valeur adéquate de la longueur de glissement. De plus, il décrit de façon cohérente les fluides partiellement mouillants. Comme il n'existe encore aucune donnée expérimentale à ce sujet, on ne dispose d'aucun argument concret pour affirmer que ce modèle est valide. Cependant, son comportement est *a priori* satisfaisant :

- il décrit les fluides parfaitement mouillants comme le cas limite d'un fluide partiellement mouillant dont l'angle de contact tend vers zéro,
- la sensibilité de l'angle de contact macroscopique à la température diminue rapidement lorsque l'angle de contact dépasse 30° , ce qui expliquerait pourquoi seuls des fluides très mouillants ont été testés expérimentalement (les autres ne présentent aucune dépendance mesurable vis-à-vis de la température de paroi).

De plus, ce modèle apporte la preuve qu'une modélisation très fidèle des forces intermoléculaires à longue portée n'est pas indispensable pour expliquer le comportement des fluides très mouillants. Il suffit d'introduire une longueur de glissement d'amplitude correcte pour retrouver le comportement du modèle d'origine (de plus, nous avons constaté que le modèle est assez peu sensible à la longueur de glissement).

Nous avons remarqué que le cas limite du fluide parfaitement mouillant, caractérisé par $\theta_{mic} = 0$, joue un rôle particulier : l'angle de contact macroscopique pour un fluide quelconque est une combinaison de l'angle constant (pour les surchauffes faibles) et de cette solution particulière (pour les surchauffes élevées). Ceci motive une étude plus particulière de ce cas limite.

C.2.3 Étude analytique du modèle de fluide partiellement mouillant

Dans cette partie, nous étudions une version simplifiée du système d'équations du modèle de fluide partiellement mouillant. Cette étude nous permettra d'obtenir une expression analytique approchée de l'angle de contact macroscopique. L'étude commence par la simplification du système et son écriture sous forme adimensionnelle. Puis nous ferons des hypothèses sur les grandeurs adimensionnelles qui nous permettront de réduire à un seul le nombre de paramètres du système. Enfin, une résolution numérique du système en fonction de ce paramètre suivie d'une corrélation nous conduira à une expression analytique approchée de la solution.

Construction d'un système d'équations adimensionnel

Si on met de côté l'équation sur la coordonnées x , qui n'intervient pas dans les autres équations, le modèle s'écrit sous la forme suivante

$$\begin{aligned}\partial_s y &= \sin \theta \\ \partial_s \theta &= \frac{1}{\sigma} \left(P_c + \frac{\dot{q}^2}{\mathcal{L}^2} \frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_l \rho_v} \right) \\ \partial_s P_c &= -\mu_l \left(V \frac{1}{r^3} f_V(\theta_i) + v_s \frac{1}{r^2} f_v(\theta_i) \right) \\ \partial_s Q &= \dot{q}\end{aligned}\tag{C.105}$$

avec :

$$\begin{aligned}\dot{q} &= k_l \frac{1}{r \theta + \delta_R} (T_s - T_{sat,local}) \\ &= k_l \frac{1}{r \theta + \delta_R} \left(1 - \frac{T_{sat}}{T_s - T_{sat}} \frac{P_c}{\rho_l \mathcal{L}} \right) (T_s - T_{sat}) \\ V &\hat{=} - \frac{Q}{\rho_l \mathcal{L}} \\ r &\hat{=} \frac{y + l_s}{\sin \theta}\end{aligned}\tag{C.106}$$

On pose les définitions suivantes des variables adimensionnelles :

$$\begin{aligned}\tilde{s} &\hat{=} \frac{s}{y_0} & y_0 &\hat{=} \delta_R & \tilde{P} &\hat{=} \frac{P_c}{P_0} & P_0 &\hat{=} \frac{\sigma}{\delta_R} \\ \tilde{y} &\hat{=} \frac{y}{y_0} & \tilde{q} &\hat{=} \frac{\dot{q}}{\dot{q}_0} & \dot{q}_0 &\hat{=} k_l \frac{T_s - T_{sat}}{\delta_R} \\ \tilde{\theta} &\hat{=} \theta & \tilde{Q} &\hat{=} \frac{Q}{Q_0} & Q_0 &\hat{=} \dot{q}_0 \delta_R\end{aligned}\tag{C.107}$$

Le système prend alors la forme suivante en fonction de ces variables

$$\begin{aligned}\partial_{\tilde{s}} \tilde{y} &= \sin \theta \\ \partial_{\tilde{s}} \tilde{\theta} &= \tilde{P} + D_1 \tilde{q}^2 \\ \partial_{\tilde{s}} \tilde{P} &= D_3 \frac{\sin^3 \theta f_V(\theta) \tilde{Q}}{(\tilde{y} + D_2)^3} - D_4 \frac{\sin^2 \theta f_v(\theta)}{(\tilde{y} + D_2)^2} \\ \partial_{\tilde{s}} \tilde{Q} &= \tilde{q} = \frac{1 - D_5 \tilde{P}}{\frac{\theta}{\sin \theta} \tilde{y} + 1}\end{aligned}\tag{C.108}$$

où apparaissent les nombres adimensionnels suivants :

$$\begin{aligned}D_1 &\hat{=} \frac{\delta_R \dot{q}_0^2}{\mathcal{L}^2} \frac{\rho_l - \rho_v}{\sigma \rho_l \rho_v} & D_4 &\hat{=} \frac{\mu_l v_s}{\sigma} = \text{Ca} \\ D_2 &\hat{=} \frac{l_s}{\delta_R} & D_5 &\hat{=} \frac{T_{sat}}{T_s - T_{sat}} \frac{\sigma}{\delta_R \rho_l \mathcal{L}} \\ D_3 &\hat{=} \frac{\mu_l \dot{q}_0}{\sigma \rho_l \mathcal{L}}\end{aligned}\tag{C.109}$$

Le nombre D_1 indique si la courbure de l'interface est déterminée par l'écoulement de liquide ou par la pression de recul. Son interprétation n'est pas immédiate car ce rapport de force dépend encore de \tilde{P} et \tilde{q} .

Le nombre D_2 mesure le rapport entre l'échelle de coupure hydrodynamique l_s et l'échelle de coupure du flux de chaleur δ_R . Nous verrons que c'est

le paramètre le plus important du modèle. En principe, la longueur l_s est inférieure à une fraction de nm tandis que la longueur δ_R vaut typiquement entre quelques nm et quelques μm (voir la figure 1.1 du premier chapitre). Le nombre D_2 est donc généralement compris entre 10^{-4} et 1.

Le nombre D_3 est un nombre de capillarité construit à partir de la vitesse caractéristique d'évaporation du liquide $\dot{q}_0/(\sigma \rho_l)$. Il mesure la sensibilité de l'angle de contact au flux de chaleur. Par la suite, nous simplifierons le système et éliminerons ce paramètre par un changement de variable adéquat.

Le nombre D_4 est le nombre de capillarité construit à partir la vitesse v_s de la paroi, qui indique la sensibilité du profil de l'interface à la vitesse de déplacement de la ligne de contact.

Enfin, le nombre D_5 indique l'influence de la pression sur la température de saturation locale et donc sur le flux de chaleur.

Simplification du système d'équations

Une fois le système écrit en variables adimensionnelles, il est théoriquement possible de déterminer les termes prépondérants et de simplifier ce système. L'évaluation de l'importance des différents termes n'est cependant pas simple *a priori* car la pression \tilde{P} et le flux de chaleur \tilde{q} peuvent varier dans de grandes proportions entre les différentes échelles. Nous allons faire des hypothèses simplificatrices pour obtenir un système ayant beaucoup moins de paramètres, et vérifierons ces hypothèses *a posteriori*. Il est clair que le nombre D_4 peut être arbitrairement grand si on choisit une vitesse v_s suffisamment élevée. Il n'est donc pas possible d'éliminer ce paramètre. Néanmoins, on suppose qu'il existe deux cas de figures extrêmes :

- si la valeur du nombre de capillarité Ca construit sur la vitesse de la paroi est petite, le terme en D_4 est négligeable et l'angle de contact ne dépend que du terme en D_3 ,
- si au contraire Ca est grand, l'angle de contact est déterminé par ce dernier et le terme en D_3 est négligeable. Dans ce cas, le système se réduit au modèle de Dussan, pour lequel nous disposons déjà d'une solution analytique.

Il reste donc à obtenir une solution du premier cas. Nous étudions donc maintenant le cas particulier où $D_4 = 0$. Nous allons de plus faire les hypothèses suivantes :

- la pression de recul est négligeable, soit $D_1 \simeq 0$,
- la variation de la température de saturation est négligeable, soit $D_5 \simeq 0$,
- l'angle de contact est petit, ce qui permet d'utiliser l'approximation de lubrification (voir l'équation C.69) :

$$\begin{aligned} \sin \theta &\simeq \theta, \\ \sin^3 \theta f_V(\theta) &\simeq -3 \end{aligned} \quad (\text{C.110})$$

Le système simplifié s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} \partial_{\tilde{y}} \tilde{y} &= \theta \\ \partial_{\tilde{y}} \tilde{\theta} &= \tilde{P} \\ \partial_{\tilde{y}} \tilde{P} &= -3 D_3 \frac{\tilde{Q}}{(\tilde{y} + D_2)^3} \\ \partial_{\tilde{y}} \tilde{Q} &= \frac{1}{\tilde{y} + 1} \end{aligned} \quad (\text{C.111})$$

Sa résolution fait l'objet de la partie suivante.

Résolution du système simplifié

Pour résoudre ce système, nous commençons par faire un changement de variables pour éliminer le paramètre D_3 . Pour cela, on définit de nouvelles variables :

$$\begin{aligned}\hat{s} &\doteq \tilde{s}/\tilde{s}_0 & \hat{Q} &\doteq \tilde{s}_0 \tilde{Q} \\ \hat{\theta} &\doteq \theta/\theta_0 & \hat{y} &\doteq \tilde{y} \\ \hat{P} &\doteq \tilde{P}/\tilde{P}_0\end{aligned}\quad (\text{C.112})$$

Avec ces définitions, le système prend la forme suivante :

$$\begin{aligned}\partial_{\hat{s}}\hat{y} &= \tilde{s}_0 \theta_0 \hat{\theta} & \partial_{\hat{s}}\hat{P} &= -\frac{3 D_3 \tilde{s}_0^2}{\tilde{P}_0} \frac{\hat{Q}}{(\hat{y} + D_2)^3} \\ \partial_{\hat{s}}\hat{\theta} &= \frac{\tilde{s}_0 \tilde{P}_0}{\theta_0} \hat{P} & \partial_{\hat{s}}\hat{Q} &= \frac{1}{\hat{y} + 1}\end{aligned}\quad (\text{C.113})$$

Pour obtenir un système invariant par rapport à la grandeur D_3 , il suffit de poser :

$$\begin{aligned}\theta_0 &\doteq (3 D_3)^{\frac{1}{4}} \\ \tilde{s}_0 &\doteq 1/\theta_0 \\ \tilde{P}_0 &\doteq \theta_0^2\end{aligned}\quad (\text{C.114})$$

Le système ne comporte alors plus qu'un seul paramètre D_2 , qui ne fait intervenir que les propriétés physiques du fluide (en particulier, il est indépendant de la température de la paroi) :

$$\begin{aligned}\partial_{\hat{s}}\hat{y} &= \hat{\theta} & \partial_{\hat{s}}\hat{P} &= -\frac{\hat{Q}}{(\hat{y} + D_2)^3} \\ \partial_{\hat{s}}\hat{\theta} &= \hat{P} & \partial_{\hat{s}}\hat{Q} &= \frac{1}{\hat{y} + 1}\end{aligned}\quad (\text{C.115})$$

Ainsi, on peut déjà prédire la dépendance de l'angle de contact macroscopique en fonction de la température :

$$\theta_{macro} \sim \theta_0 \sim D_3^{1/4} \sim \dot{q}_0^{1/4} \sim (T_s - T_{sat})^{1/4}\quad (\text{C.116})$$

Pour obtenir la constante multiplicative, il faut résoudre le système C.115 en fonction du paramètre D_2 . Les conditions aux limites du système sont les suivantes :

$$\begin{aligned}\lim_{\hat{s} \rightarrow 0} \hat{y} &= 0 & \lim_{\hat{s} \rightarrow \infty} \hat{P} &= 0 \\ \lim_{\hat{s} \rightarrow 0} \hat{\theta} &= 0 & \lim_{\hat{s} \rightarrow 0} \hat{Q} &= 0\end{aligned}\quad (\text{C.117})$$

Nous avons utilisé pour cela une méthode d'intégration numérique associée à une méthode de tir : on cherche la valeur $\hat{P}(0)$ à l'origine de sorte que la condition aux limite de pression nulle à l'infini soit vérifiée. Les profils d'angle de contact sont représentés sur la figure C.7 pour quelques valeurs de D_2 . On y a représenté aussi la valeur de l'angle de contact macroscopique en fonction de D_2 ainsi qu'une corrélation qui représente cette fonction. La corrélation proposée a une précision de 0.2% sur l'intervalle $D_2 \in [10^{-8}, 1]$. Elle s'écrit :

$$\lim_{\hat{s} \rightarrow \infty} \hat{\theta} \simeq \Theta(\ln D_2), \quad \text{avec}$$

$$\Theta(x) \doteq 1.3707 - 0.1720 x - 0.00797 x^2 - 0.000172 x^3\quad (\text{C.118})$$

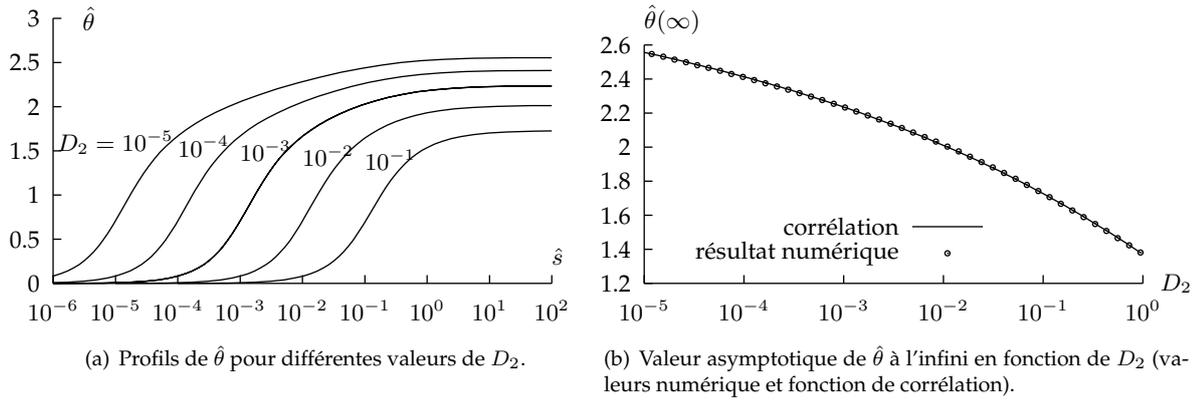


Figure C.7 – Solution du système d'équations C.115

On remarque que la valeur asymptotique de l'angle de contact est atteinte à quelques pour-cent près pour $\hat{s} > 1$. Quant à la pression $\hat{P}(0)$ à l'origine, l'expression suivante en donne une approximation à 2% sur l'intervalle $D_2 \in [10^{-6}, 0.1]$ et à 10% pour $0.1 < D_2 < 1$:

$$\hat{P}(0) \simeq 0.83 \frac{1}{D_2} \quad (\text{C.119})$$

C.2.4 Solution approchée du modèle de micro-région

Corrélation partielle à vitesse nulle

Nous sommes maintenant en mesure de fournir une expression de l'angle de contact macroscopique pour le modèle de fluide partiellement mouillant. Pour un angle de contact microscopique nul, l'angle de contact macroscopique statique $\theta_{macro,0}$ exprimé en radians est approché par l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \theta_{macro,0} &= (3 D_3)^{1/4} \Theta(\ln D_2), \quad \text{avec} \\ D_2 &\hat{=} \frac{l_s}{\delta_R} \\ D_3 &\hat{=} \frac{\mu_l \dot{q}_0}{\sigma \rho_l \mathcal{L}} \\ \dot{q}_0 &\hat{=} k_l \frac{T_s - T_{sat}}{\delta_R} \\ \Theta(x) &\hat{=} 1.3707 - 0.1720 x - 0.00797 x^2 - 0.000172 x^3 \end{aligned} \quad (\text{C.120})$$

La valeur asymptotique de l'angle de contact statique est atteinte à une abscisse $s_{macro,v=0}$ telle que $\hat{s} \simeq 1$, soit :

$$s_{macro,v=0} = (3 D_3)^{-1/4} \delta_R \quad (\text{C.121})$$

Pour un angle de contact microscopique θ_{mic} non nul, la corrélation suivante fournit une approximation de l'angle de contact macroscopique statique en fonction de la température de la paroi :

$$\theta_{macro,v=0} = (\theta_{macro,0}^3 + \theta_{mic}^3)^{1/3} \quad (\text{C.122})$$

Variation de la température de saturation

Il est temps maintenant de vérifier les hypothèses sur les grandeurs adimensionnelles D_1 et D_5 . Dans l'équation C.108, la variation de la température de saturation est négligeable si :

$$D_5 \tilde{P} \ll 1, \quad \text{avec} \quad \begin{cases} D_5 \hat{=} \frac{T_{sat}}{T_s - T_{sat}} \frac{\sigma}{\delta_R \rho_l \mathcal{L}} \\ \tilde{P} = \sqrt{3 D_3} \hat{P} < \sqrt{3 D_3} \hat{P}(0) \simeq \frac{\sqrt{3 D_3}}{D_2} \end{cases} \quad (\text{C.123})$$

On remarquera en particulier la majoration de \tilde{P} par sa valeur à l'origine. Ainsi, on obtient la condition suivante sur les valeurs adimensionnelles :

$$D_{T_{sat}} = D_5 \sqrt{3 D_3} \frac{\delta_R}{l_s} = \frac{T_{sat}}{l_s} \sqrt{\frac{3 \mu_l \sigma}{(\rho_l \mathcal{L})^3 R_i}} \frac{1}{\sqrt{T_s - T_{sat}}} \ll 1 \quad (\text{C.124})$$

Cette condition fait intervenir en particulier la longueur de glissement au dénominateur. En particulier, il existe une valeur de la longueur de glissement telle que $D_{T_{sat}} = 1$. Cette condition permet donc de définir une nouvelle longueur caractéristique $l_{T_{sat}}$ en dessous de laquelle la variation de température de saturation représente une fraction significative de la surchauffe de la paroi.

Pour un fluide donné et dans des conditions de pression fixées, la valeur de $D_{T_{sat}}$ est la plus grande lorsque la surchauffe de la paroi est petite. Pour de l'eau à 1 bar et une surchauffe de 1 K, elle est de l'ordre de 1 si la longueur de glissement est de 10^{-10} m, et cette valeur augmente avec la pression. Par conséquent, l'approximation faite en négligeant D_5 n'est pas correcte aux plus petites échelles.

Cependant, le raisonnement heuristique suivant conduit à une corrélation qui tient compte de la température de saturation : *la température de saturation introduit une échelle de coupure $l_{T_{sat}}$ semblable à l'échelle de coupure hydrodynamique. Cette échelle de coupure est telle que le paramètre adimensionnel $D_{T_{sat}}$ suivant soit égal à 1/2 :*

$$D_{T_{sat}} \hat{=} D_5 \sqrt{3 D_3} \frac{\delta_R}{l_{T_{sat}}} = \frac{T_{sat}}{l_{T_{sat}}} \sqrt{\frac{3 \mu_l \sigma}{(\rho_l \mathcal{L})^3 R_i}} \frac{1}{\sqrt{T_s - T_{sat}}} \quad (\text{C.125})$$

L'échelle de coupure ainsi définie correspond à l'échelle où le flux de chaleur est réduit de moitié par l'augmentation de la température de saturation locale. Ainsi, on propose la corrélation suivante pour l'angle de contact macroscopique :

$$\begin{aligned} l_{T_{sat}} &\hat{=} \frac{1}{2} D_5 \sqrt{3 D_3} \delta_R \\ l_0 &\hat{=} l_s + l_{T_{sat}}, \quad \text{soit} \quad \frac{l_0}{\delta_R} = D_2 + \frac{1}{2} D_5 \sqrt{3 D_3} \\ \theta_{macro,0} &\simeq (3 D_3)^{1/4} \Theta \left(\ln \frac{l_0}{\delta_R} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.126})$$

Pression de recul et vitesse de déplacement

Ces deux paramètres sont étudiés en 2.4.2 car leur influence s'étend au-delà de la micro-région. Pour la validation de la corrélation, il nous suffit de savoir que pour des surchauffes de paroi inférieures à 10 K, la pression de recul a une influence négligeable sur l'angle de contact.

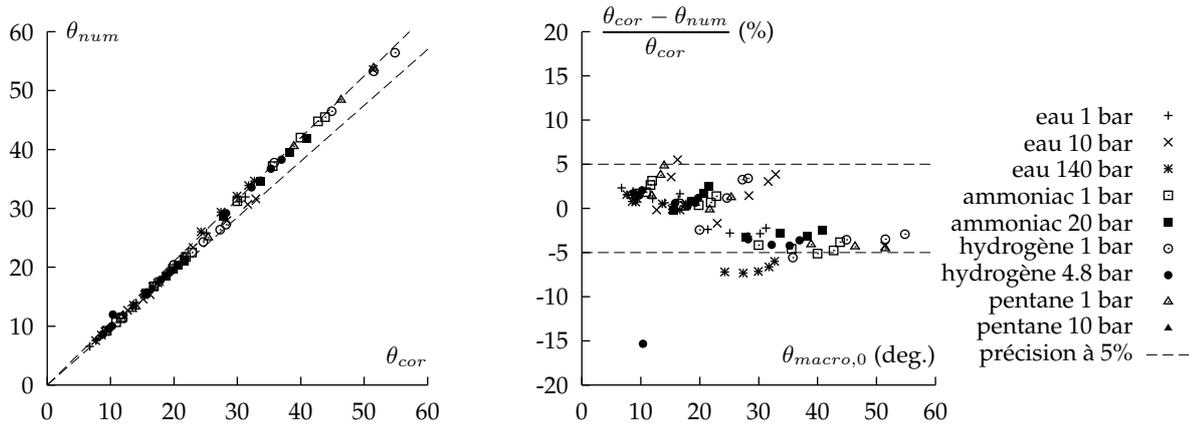


Figure C.8 – Comparaison entre la corrélation et le calcul numérique de l’angle de contact statique macroscopique pour différents fluides et un angle de contact microscopique nul (températures de surchauffe de 0.1, 1 et 10 K, longueurs de glissement comprises entre 0.001 et 3 nm). N’ayant pas pu mettre en évidence de tendance marquée de l’erreur vis-à-vis d’un paramètre précis, nous traçons celle-ci en fonction de l’angle de contact macroscopique.

Validation de la corrélation

Nous vérifions globalement la corrélation en comparant l’angle de contact macroscopique θ_{cor} donné par la corrélation à l’angle θ_{num} obtenu par un calcul numérique de la solution du système d’équations. Ces calculs sont menés pour différents fluides typiques, avec un angle de contact microscopique nul et en faisant varier la longueur de glissement l_s et la température de surchauffe $T_s - T_{sat}$. Les résultats sont représentés sur la figure C.8.

Les très hautes pressions sont généralement moins bien prédites car les différentes longueurs caractéristiques l_s , $l_{T_{sat}}$ et δ_R sont toutes du même ordre de grandeur, ce que l’on peut constater aussi avec le modèle de Stephan (voir figure C.4). Rappelons que dans cette configuration, l’erreur liée à la viscosité de la phase vapeur est très importante. Le cas de l’hydrogène est aussi un peu particulier car la surchauffe admissible de l’hydrogène liquide ne dépasse pas une fraction de K. Dans les autres cas, on peut compter sur une précision de $\pm 5\%$ sur la valeur de l’angle de contact.

L’expression C.122 est elle-aussi confrontée à des résultats numériques sur la figure C.9. Là encore, on peut compter sur une précision de $\pm 5\%$ de la corrélation.

Application de la corrélation au modèle de Stephan

Le modèle de fluide partiellement mouillant semble aussi pouvoir être appliqué à des fluides parfaitement mouillants. En effet, les courbes de variation de l’angle de contact en fonction de la température sont très similaires si on choisit un angle de contact microscopique nul (voir figure C.5). Il nous suffit d’utiliser un angle $\theta_{mic} = 0$ et de définir la longueur de glissement équivalente à appliquer dans les corrélations. Le choix de cette longueur est évident : il faut utiliser l’épaisseur δ_{adh} du film adsorbé, dont on rappelle ici l’expression :

$$\delta_{adh} = \left(\frac{A}{\rho_l \mathcal{L}} \frac{T_{sat}}{T_s - T_{sat}} \right)^{1/3} \quad (\text{C.127})$$

En posant $l_s = 2 \delta_{adh}$, on obtient la loi de variation suivante :

$$\frac{\partial \ln l_s}{\partial \ln(T_s - T_{sat})} = -\frac{1}{3} \quad (\text{C.128})$$

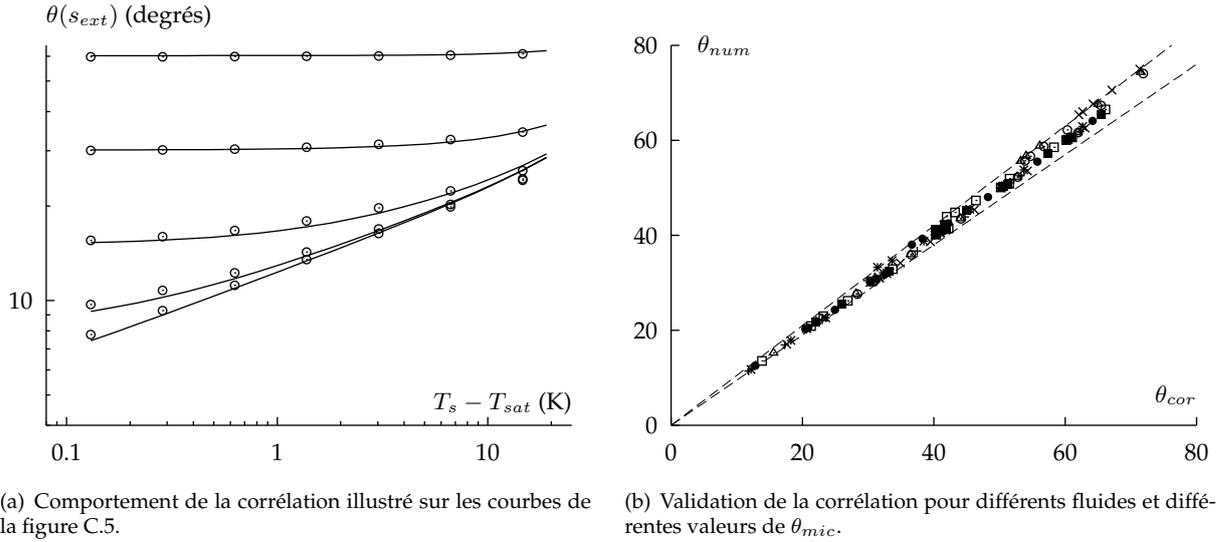


Figure C.9 – Validation de l'expression C.122. Sur la figure de droite, les mêmes fluides que sur la figure C.8 sont utilisés avec des valeurs de θ_{mic} comprises entre 10 et 60 degrés.

On peut donc prévoir la loi de variation de l'angle de contact avec la température, que l'on note $\Delta T = T_s - T_{sat}$. Avec l'expression C.120, on a :

$$\frac{\partial \ln \theta_{macro,0}}{\partial \ln(\Delta T)} = \frac{1}{4} \underbrace{\frac{\partial \ln D_3}{\partial \ln(\Delta T)}}_{=1} + \underbrace{\frac{\partial \ln(\Theta(x))}{\partial x}}_{\simeq -0.125} \underbrace{\frac{\partial \ln(D_2)}{\partial \ln(\Delta T)}}_{=-1/3} \quad (C.129)$$

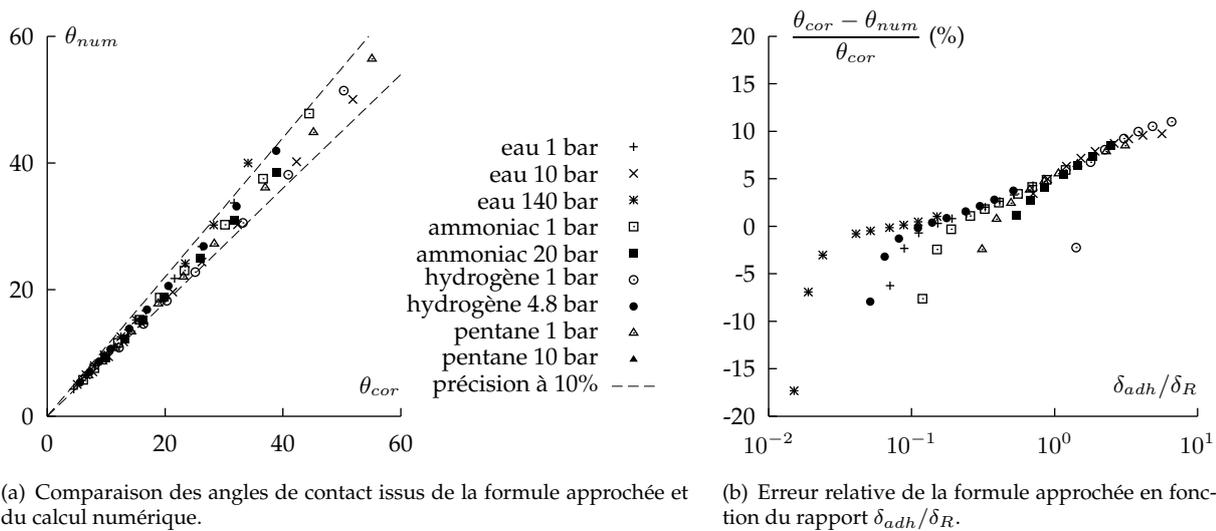
$$\simeq 0.291$$

On retrouve bien la loi en $\Delta T^{0.3}$ du modèle de Stephan. On vérifie enfin que l'angle de contact prédit a bien la bonne valeur. Les calculs numériques montrent que la corrélation est un peu meilleure si on pose $l_s = 2 \delta_{adh}$ que si on pose $l_s = \delta_{adh}$. La figure C.10 montre que cette approximation est moins précise que dans le cas d'un fluide partiellement mouillant. On ne retrouve les résultats numériques qu'à 10% près et l'erreur de la formule approchée est bien corrélée avec le rapport δ_{adh}/δ_R . En particulier, on utilise l'approximation dans une configuration où elle n'est pas adaptée, lorsque $\delta_{adh}/\delta_R > 1$. Par ailleurs, il n'est pas très étonnant que cette précision soit moins bonne : on a remplacé le phénomène des forces intermoléculaires en $1/y^3$ par un modèle de glissement qui n'a pas la même singularité à l'origine, et on a négligé son effet sur la température de saturation. Malgré cette imprécision, le fait de disposer d'une approximation de l'angle de contact sous forme d'une expression analytique est très intéressant.

Conclusion

Après avoir rappelé le modèle original de Stephan, nous l'avons étendu de façon très simple pour tenir compte du déplacement des lignes de contact. Nous avons ensuite proposé un autre modèle, fondé sur une physique plus simple, où l'effet des forces intermoléculaires à petite échelle est remplacé par deux paramètres : un angle de contact microscopique et une longueur de glissement.

En choisissant de façon pertinente les grandeurs caractéristiques du problème, nous avons abouti à un système d'équations où les groupes adimensionnels qui apparaissent ont une interprétation simple. Le fait d'avoir choisi l'échelle de coupe δ_R pour adimensionnaliser les distances et non l'échelle microscopique δ_{adh} ou l_s est très important pour la suite du calcul.



(a) Comparaison des angles de contact issus de la formule approchée et du calcul numérique.

(b) Erreur relative de la formule approchée en fonction du rapport δ_{adh}/δ_R .

Figure C.10 – Validation de la corrélation sur le modèle de Stephan pour des températures $T_s - T_{sat}$ comprises entre 0.02 et 20 K. La précision est de 10% environ et semble affectée par le rapport δ_{adh}/δ_R .

Ensuite, en ne conservant que deux groupes adimensionnels et en résolvant un système simplifié, nous avons obtenu une solution fondamentale du problème (l'équation C.126), où apparaît un nombre de capillarité D_3 et le rapport des échelles caractéristiques l_0/δ_R . La longueur l_0 est une combinaison des longueurs caractéristiques de coupure de la contrainte visqueuse l_s et du flux de chaleur $l_{T_{sat}}$. Elle représente en quelque sorte la synthèse de l'ensemble des phénomènes microscopiques à l'échelle moléculaire. Ces résultats ont été obtenus par une voie très similaire par Morris [60].

Nous avons ensuite montré comment retrouver les résultats du modèle de Stephan en interprétant la longueur l_0 en fonction de l'épaisseur du film adsorbé.

Ainsi, nous avons abouti à un modèle où l'ensemble des phénomènes liés à l'échelle microscopique est représenté par seulement deux grandeurs caractéristiques :

- l'angle de contact microscopique θ_{mic} ,
- et l'échelle caractéristique de coupure l_0 ,

et qui prend la forme d'une expression analytique très facile à évaluer.

Nous avons montré que cette formulation permet de représenter au moins deux types de modélisations assez différentes : celle de Wayner ou celle de Stephan d'une part et la modélisation que nous proposons pour les fluides partiellement mouillants d'autre part. De plus, elle semble facilement généralisable à d'autres modèles de micro-région, où l'on voudrait par exemple tenir compte d'un autre type d'interactions moléculaires.

Annexe **D**

Calculs techniques relatifs à la méthode de front-tracking

D.1 Construction des opérateurs d'interpolation entre maillages

On note $\bar{\mathcal{G}}$ l'opérateur permettant de passer d'une grandeur surfacique à une grandeur volumique, et $\hat{\mathcal{G}}$ l'opérateur réciproque. Pour des champs discrets \hat{f} et \bar{f} , on note :

$$\hat{f} = \hat{\mathcal{G}}(\bar{f}) \quad (\text{D.1})$$

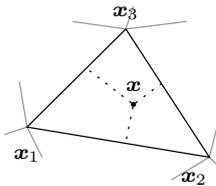
$$\bar{f} = \bar{\mathcal{G}}(\hat{f}) \quad (\text{D.2})$$

Remarque importante : ces relations ne sont pas inverses l'une de l'autre. Si l'on passe d'une grandeur surfacique à une grandeur volumique, puis à nouveau à une grandeur surfacique, l'intégrale est conservée mais les valeurs aux nœuds subissent une diffusion numérique due aux interpolations successives :

$$\hat{\mathcal{G}}(\bar{\mathcal{G}}(\hat{f})) \neq \hat{f} \quad (\text{D.3})$$

D.1.1 Relations de passage conservatives entre grandeur discrète sur les nœuds et grandeur continue sur les interfaces

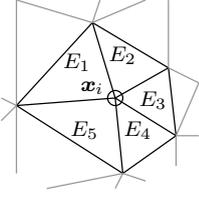
On définit des opérateurs d'interpolation permettant de passer dans les deux sens d'une grandeur aux nœuds du maillage surfacique à une grandeur surfacique définie en tout point du maillage de façon conservative. On note $\alpha_{E,i}(\mathbf{x})$, $i = 1 \dots 3$ les coefficients barycentriques d'un point \mathbf{x} de l'élément d'interface E (dans le cas général d'un problème tridimensionnel) :



$$\mathbf{x} = \sum_i \alpha_{E,i}(\mathbf{x}) \mathbf{x}_i \quad \text{avec} \quad \sum_i \alpha_{E,i} = 1 \quad (\text{D.4})$$

Pour une grandeur surfacique \hat{f} discrétisée à chaque nœud \mathbf{x}_i , on définit la grandeur surfacique interpolée $\tilde{f}(\mathbf{x})$ de la façon suivante :

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = \sum_i \alpha_{t,i} \hat{f}(\mathbf{x}_i) \quad (\text{D.5})$$



On définit d'autre part la surface $\hat{S}(x_i)$ affectée à un nœud à partir des éléments adjacents $E_1 \dots E_n$:

$$\hat{S}(x_i) = \sum_{E=E_1 \dots E_n} \int_E \alpha_{E,i}(x) ds = \sum_{E=E_1 \dots E_n} \frac{1}{3} \text{surface}(E) \quad (\text{D.6})$$

On définit une grandeur aux nœuds en fonction de sa valeur surfacique continue $f(x)$ comme suit :

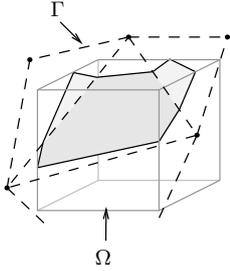
$$\hat{f}(x_i) = \frac{1}{\hat{S}(x_i)} \sum_{E=E_1 \dots E_n} \int_E \alpha_{E,i}(x) f(x) ds \quad (\text{D.7})$$

Notons $\Gamma = \bigcup E_i$ une réunion complète d'éléments du maillage surfacique (définition en 3.2.1). On a alors la propriété de conservation suivante :

$$\int_{\Gamma} f(x) ds = \sum_i \hat{f}(x_i) \hat{S}(x_i) = \int_{\Gamma} \tilde{f}(x) ds \quad (\text{D.8})$$

D.1.2 Relations de passage conservatives entre grandeur continue sur les interfaces et grandeur sur le maillage fixe

Soit une grandeur surfacique $f(x)$ définie sur la surface du maillage Γ des interfaces. On définit la grandeur volumique $\bar{f}(\Omega)$ sur un élément Ω du maillage eulérien comme suit :



$$\bar{f}(\Omega) = \frac{1}{\overline{V_{\Omega}}} \int_{\Gamma \cap \Omega} f(x) ds \quad (\text{D.9})$$

On définit réciproquement une grandeur surfacique interpolée à partir d'une grandeur volumique comme suit (en fait d'interpolation, la fonction surfacique est constante par morceaux, donc pas très régulière) :

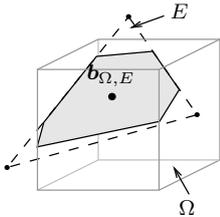
$$\forall x \in \Omega \cap \Gamma, \quad f(x) = \frac{\bar{f}(\Omega) \overline{V_{\Omega}}}{\text{surface}(\Gamma \cap \Omega)} \quad (\text{D.10})$$

On a alors la propriété de conservation suivante, où Ω représente l'ensemble des éléments du maillage volumique contenant des interfaces :

$$\int_{\Omega} \bar{f}(\Omega) d\Omega = \int_{\Gamma} f(x) ds \quad (\text{D.11})$$

D.1.3 Remarques sur la mise en œuvre de ces opérateurs

Si les interfaces sont représentées par des segments ou des triangles, les opérateurs de passage ont une expression analytique simple qui les rend conservatifs à la précision machine.



Il suffit pour cela de disposer de l'opérateur suivant, qui calcule l'intégrale sur $\Omega \cap E$ d'une fonction f linéaire sur l'élément de surface E . Cette intégrale s'écrit

$$\int_{\Omega \cap E} f(x) ds = f \left(\int_{\Omega \cap E} x ds \right) \quad (\text{D.12})$$

$$= f(\mathbf{b}_{\Omega,E}) \times \text{surface}(\Omega \cap E) \quad (\text{D.13})$$

$$= \left(\sum_{i=1 \dots 3} \alpha_{E,i}(\mathbf{b}_{\Omega,E}) \hat{f}(x_i) \right) \times \text{surface}(\Omega \cap E) \quad (\text{D.14})$$

où $\mathbf{b}_{\Omega,E}$ est le barycentre du polygone $\Omega \cap E$.

Le polygone $\Omega \cap E$ est calculé lors de la construction de l'indicatrice \bar{I} . On en profite donc pour calculer les coefficients suivants :

$$\beta(\Omega, i) = \sum_E \alpha_{E,i}(\mathbf{b}_{\Omega,E}) \times \text{surface}(\Omega \cap E) \quad (\text{D.15})$$

Les opérateurs de passage s'écrivent alors facilement :

$$\bar{\mathcal{G}}(\hat{f})(\Omega) = \frac{1}{V_\Omega} \sum_i \beta(\Omega, i) \hat{f}(\mathbf{x}_i) \quad (\text{D.16})$$

$$\hat{\mathcal{G}}(\bar{f})(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{\hat{S}(\mathbf{x}_i)} \sum_\Omega \beta(\Omega, i) \bar{f}(\Omega) \quad (\text{D.17})$$

D.2 Démonstration de l'existence d'un «maillage d'équilibre»

Dans un domaine Ω compact de \mathbb{R}^3 (fermé borné), on considère l'ensemble des maillages délimitant avec les bords de Ω un volume fermé.

On suppose qu'à chaque maillage, caractérisé par un nombre N de nœuds, un graphe de connectivité G et les coordonnées $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_i, i = 1 \dots N\} \in \mathbb{R}^{3N}$ des nœuds, on associe :

- une fonction volume $V(\mathbf{X})$, qui définit le volume de fluide inclus dans le maillage,
- une fonction énergie $E(\mathbf{X})$ (par exemple la somme de l'énergie de surface du maillage et de l'énergie de pesanteur).

On suppose que les fonctions V et E sont continues sur Ω par rapport à la position des nœuds.

À N fixé, le nombre de graphes de connectivité différents est fini. Considérons un graphe de connectivité, et construisons l'ensemble A des coordonnées \mathbf{X} telles que le volume $V(\mathbf{X}) = V_0$ est constant. Cet ensemble est un fermé car image réciproque du singleton $\{V_0\}$ par une fonction continue. Il est borné car inclus dans Ω et c'est un compact car fermé borné d'un espace de dimension finie. La fonction E est continue sur l'ensemble A compact, donc elle admet un minimum qui est atteint en un point de A .

Pour chaque graphe de connectivité entre N points, il existe un maillage minimal. Comme les graphes sont en nombre fini, il existe un maillage qui réalise le minimum sur l'ensemble des maillages à N points.

Ainsi, si Ω est borné, si on impose le nombre N de nœuds du maillage et si les fonctions volume et énergie du maillage sont des fonctions continues de la position des points, alors il existe un maillage dont l'énergie est minimale.

Le fait que le nombre de points soit imposé vient du fait qu'on peut toujours diminuer l'énergie de surface en ajoutant des nœuds pour se rapprocher d'une surface différentiable (exemple de la sphère qui minimise le rapport surface/volume). Le fait que le domaine soit borné empêche d'avoir une bulle de gaz qui monte indéfiniment (l'énergie potentielle de pesanteur n'est alors pas minorée).

Annexe **E**

Électronique de commande et de mesure du prototype CESSIL

L'objectif de l'expérience CESSIL est de valider quantitativement le modèle de transfert singulier à la ligne de contact. Il faut pour cela mesurer des flux de chaleur et des températures avec une très bonne précision dans une gamme très réduite (gamme imposée par la surchauffe admissible du liquide).

En raison de l'expérience du SETEX en matière de mesures par des thermocouples et de la capacité de ce type de capteur à réaliser naturellement des mesures différentielles, c'est la solution que nous avons retenue pour mesurer les températures. Or, le matériel disponible dans le commerce ne permet pas d'atteindre des précisions inférieures à 0.1 K. C'est pourquoi nous avons fait le pari de construire un système de mesure d'un coût modeste (hors coût de développement par le thésard...) qui permette de réaliser de telles mesures.

Nous avons aussi construit des étages de commande de puissance pour piloter les résistances électriques de chauffage à partir d'un ordinateur. L'ensemble permet de réaliser un système automatique de contrôle thermique de l'expérience.

Faut-il justifier la conception d'un tel système alors que l'on aurait pu sous-traiter cette partie ? La phase de conception et de réalisation a permis d'acquérir une expérience inestimable en matière d'électronique et de mesure (connaissance des propriétés des composants électroniques, caractérisation des sources d'erreur et de bruit, problèmes de réalisation). D'autre part, il est clair après coup que cette expérience aurait cruellement manqué s'il avait fallu commander la réalisation d'un tel système. Il semble évident maintenant que ce système doit être conçu dans son ensemble, depuis les capteurs jusqu'au système de digitalisation, et le coût de réalisation à l'extérieur d'un système complet aurait été prohibitif alors même que le succès de l'expérience n'est pas garanti (et que les crédits alloués à l'expérience préliminaire ne sont pas sans limite)

E.1 Conditionnement des signaux thermocouples

E.1.1 Cahier des charges

Nous nous sommes fixé comme objectif pouvoir mesurer des différences de température de un à quelques degrés à l'aide d'un thermocouple et avec une

précision de

$$|\Delta T| < \max(0.01 \text{ K}, 0.01 (T - T_{sat})) \quad (\text{E.1})$$

soit une précision de 0.01 K pour les différences inférieures à 1 K et 1% pour les différences supérieures à 1 K. Les températures étant inférieures à 300°C, les thermocouples les plus courants de type K conviennent très bien (on peut même les réaliser au sein même du département).

Ces thermocouples ont une sensibilité de 40 $\mu\text{V}/\text{K}$. Une précision de $\pm 0.01 \text{ K}$ correspond donc à une mesure de potentiel électrique avec une précision de $\pm 0.4 \mu\text{V}$. De tels signaux sont bien plus faibles que les signaux électroniques habituels. Ils sont extrêmement sensibles aux bruits électrostatique et électromagnétique, aux effets thermocouples parasites (toute soudure entre deux fils constitue un thermocouple susceptible de décaler le niveau du signal), et même aux efforts appliqués sur les fils.

À l'autre extrémité de la chaîne de mesure se trouve une carte de digitalisation. Nous disposons d'une carte National Instruments AT-MIO-16XE-50 qui permet d'acquérir des signaux de $\pm 10 \text{ V}$ avec une résolution de 16 bits (soit des incréments de 0.3 mV). La précision annoncée pour la gamme $\pm 10 \text{ V}$ après un an de fonctionnement est de $\pm(0.5 + U \cdot 0.01\%) \text{ mV}$ où U est l'amplitude du signal d'entrée en mV. Il faut donc amplifier le signal du thermocouple d'un facteur minimal de 1500 pour que la précision de la digitalisation soit égale à la précision demandée. Il est évident cependant que l'amplificateur sera une source importante d'erreur et nous cherchons donc à minimiser l'erreur liée à la digitalisation. Un compromis intéressant consiste à choisir un gain de 8000, qui conduit à une dynamique de $\pm 30 \text{ K}$. En pratique, les amplificateurs auront deux gains sélectionnables par des ponts, d'environ 2000 et d'environ 8000. Le gain de 2000 permet d'atteindre une dynamique de 120°C parfaite pour tester le système en mesurant le point de fusion et le point d'ébullition de l'eau.

Le développement du système comporte deux tâches principales :

- caractériser les sources d'erreur et de bruit sur l'ensemble de la chaîne de mesure, et compléter les spécifications de l'amplificateur,
- développer un amplificateur électronique de gain 2000 ou 8000, avec une précision de $\pm(\max(0.4 \mu\text{V}, 0.01 U_{in}))$.

E.1.2 Système de mesure et sources d'erreur

Au cours des essais (nous disposions déjà d'un prototype d'amplificateur...) nous avons répertorié les sources d'erreur suivantes :

Bruits électromagnétique et électrostatique

C'est la source d'erreur la plus évidente. Les ordinateurs, l'éclairage, les appareils électroniques divers et en général tout conducteur électrique traversé par un courant variable émet un rayonnement électromagnétique. Ce rayonnement induit un courant ou une tension dans les fils qui relient le capteur à l'amplificateur. Les niveaux enregistrés sont couramment de l'ordre de quelques mV, soit plus de mille fois le niveau du signal à enregistrer.

La solution est bien connue : le fil doit être une paire torsadée blindée et l'amplificateur doit fonctionner en mode différentiel. Ainsi, le potentiel induit est réduit par le blindage, et il est de plus identique dans les deux fils. La différence de potentiel entre les deux extrémités est alors relativement insensible aux perturbations électromagnétiques. Pour que ce système fonctionne, les deux fils et les deux entrées de l'amplificateur doivent être parfaitement symétriques (même longueur, même impédance d'entrée, etc.).

Pour que le potentiel du capteur ne soit pas flottant, il faut le relier à la masse quelque part. Le seul point de liaison qui ne brise pas la symétrie du système est le capteur lui-même. La solution consiste à mettre l'extrémité du thermocouple en contact électrique avec la pièce dont il mesure la température, et à mettre celle-ci à la masse. Ainsi, l'utilisation de thermocouples isolés (les plus courants semble-t-il) n'est pas idéale dans ce cas. Nous avons d'ailleurs pu vérifier qu'il est très difficile de réduire le niveau de bruit avec un tel thermocouple dont les fils ne sont d'ailleurs pas torsadés à l'intérieur de la gaine.

L'utilisation de ce montage implique que l'amplificateur devra mesurer une différence de potentiel $(U_1 + U_0) - (U_2 + U_0)$ où U_0 est différence entre la référence de l'amplificateur et le potentiel de la masse (c'est le mode commun). Dans un environnement bruyant, ce potentiel peut être très important. On supposera qu'il peut aller jusqu'à 1 V. Pour obtenir la précision de $0.4 \mu\text{V}$, il faut donc que la réjection de mode commun de l'amplificateur soit supérieure à $1/(0.4 \cdot 10^{-6}) = 2.5 \cdot 10^6$.

L'utilisation d'un «plan de masse» (épaisse feuille métallique reliée à la masse et couvrant l'ensemble du plan de travail) élimine un grand nombre de parasites provenant de sources éloignées. Si c'est possible, la meilleure solution consiste à enfermer l'installation dans une cage de Faraday.

Contraintes mécaniques sur le câble

Les câbles de compensation de type K ont la propriété particulière de générer un potentiel lorsqu'on leur applique une contrainte mécanique (lorsqu'on les courbe en particulier). Cet effet a été constaté et produit des erreurs de plusieurs dixièmes de degrés si on fait vibrer le câble par exemple.

Cas des alimentations électriques

Les alimentations électriques sont un point faible de ce type de montage. Les petites alimentations utilisées dans les montages électroniques génèrent une quantité de bruit impressionnante, surtout s'il s'agit d'alimentations à découpage. Il faut donc les éloigner le plus possible des zones sensibles et éventuellement filtrer la tension en sortie, ou utiliser des piles ou des batteries (c'est d'ailleurs la solution retenue dans le domaine médical pour la mesure de signaux bioélectriques par exemple, où les niveaux de tension sont très faibles eux aussi).

Courant de masse

Un autre problème survient lorsque l'on tente de relier les différents points du système à la masse. Les électroniciens recommandent généralement d'éviter les «boucles de masse», notamment avec les gaines de blindage des fils de mesures. Celles-ci doivent être mises à la masse bien entendu, mais à une seule extrémité du câble.

Notre expérience semble contredire l'avis général sur ce point. Le fait que ne conservions que les basses fréquences du signal semble produire l'effet inverse : on observe souvent un niveau de bruit plus faible si les deux extrémités du blindage sont mises à la masse.

Offset

L'amplificateur est lui aussi une source d'erreur de mesure. La plus évidente est l'offset : la tension mesurée est affectée d'un décalage V_{os} . Les spécifications

des amplificateurs opérationnels fournissent un offset maximal, une dérive en température et parfois une dérive en temps. L'offset instantané est égal à une valeur qui varie d'un composant à l'autre dans les bornes de l'offset maximal, à laquelle on ajoute une fonction de la température et du temps (d'habitude le temps écoulé depuis la fabrication du composant). L'offset doit être maîtrisé à hauteur de la précision demandée sur le signal d'entrée (soit $0.4 \mu\text{V}$).

Impédance d'entrée

Les amplificateurs électroniques se comportent comme si une résistance reliée à la masse était placée à leur entrée. Si l'impédance de sortie du capteur est élevée, l'impédance d'entrée de l'amplificateur fait baisser le potentiel mesuré.

L'impédance du capteur thermocouple complet est égale à la résistance électrique des fils. Pour du fil de taille moyenne (0.3 mm) et des longueurs de l'ordre du mètre, l'impédance est d'une centaine d'Ohm. Pour que l'erreur de mesure du potentiel soit inférieure à 1%, l'impédance d'entrée de l'amplificateur doit être au moins cent fois plus grande, et ceci sans tenir compte du mode commun. En tenant compte de ce dernier, l'impédance d'entrée doit être supérieure à $250 \text{ M}\Omega$.

Courant de fuite

Un autre défaut des amplificateurs électroniques est le courant de fuite. Celui-ci se traduit par un courant drainé par l'amplificateur sur ses entrées. Associé à l'impédance du capteur, ce courant se traduit par une erreur sur le potentiel mesuré. Pour un capteur de 100Ω et une précision de $0.4 \mu\text{V}$, le courant de fuite ne doit pas dépasser 3 nA.

E.1.3 Conception de l'amplificateur

Les caractéristiques de l'amplificateur différentiel à construire sont les suivantes :

- offset + bruit $< 0.4 \mu\text{V}$ (DC - 1 Hz),
- gain de 2000 et 8000, erreur de gain $< 1\%$,
- taux de réjection de mode commun $> 2.5 \cdot 10^6$ (DC - 1 Hz),
- impédance d'entrée $> 1 \text{ G}\Omega$,
- courant de fuite $< 1 \text{ nA}$.

On peut noter que l'on a un peu forcé le trait sur certaines spécifications, car on envisage d'utiliser des thermocouples de petit diamètre dont l'impédance est plus élevée.

Aucun composant disponible ne réalise ces performances. Il faut donc construire l'amplificateur à partir de plusieurs composants. La solution retenue est un montage classique à trois amplificateurs opérationnels, représenté sur la figure E.1.

Choix de l'amplificateur du premier étage

Un critère de choix saute aux yeux au premier coup d'œil : c'est la spécification de l'offset. Sur les amplificateurs opérationnels, il peut parfois être corrigé par l'ajout de résistances extérieures, mais ces résistances ont elles-aussi un coefficient de température.

Pour atteindre cet objectif, deux approches sont possibles :

- corriger l'offset par des résistances extérieures et tenir compte de la dérive

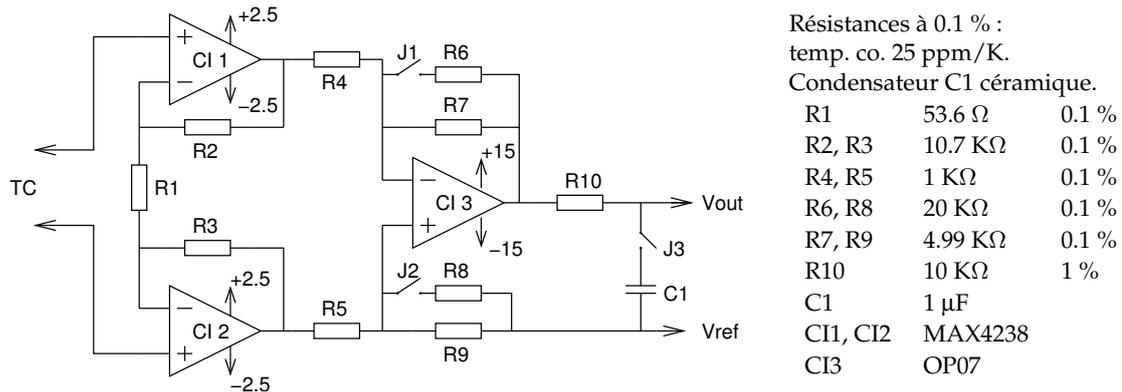


Figure E.1 – Schéma de l'amplificateur différentiel utilisé comme conditionneur de signal pour les thermocouples.

- en température (en enfermant l'amplificateur dans un thermostat ou en appliquant une correction en fonction de la température ambiante),
- utiliser un amplificateur dont l'offset est inférieur à la l'incertitude recherchée.

Si on choisit la première, on peut trouver des composants ayant des valeurs d'offset et de dérive raisonnables et d'excellentes caractéristiques de bruit (par exemple le OP27A). Malheureusement, on trouve presque toujours un critère qui ne convient pas pour ces amplificateurs (dans le cas de l'OP27A, l'importante dérive en température obligerait à utiliser un thermostat précis à 0.3°C près et le courant d'entrée est un peu élevé). Ces caractéristiques sont courantes des amplificateurs à très faible bruit. Ils sont donc plutôt adaptés à des mesures de signaux variables où on ne se sert pas de la composante continue.

Avec la deuxième approche, le choix se réduit aux amplificateurs dits «chopper-stabilized» ou «auto-zero». Disposant d'un très faible offset et d'une dérive en température encore bien plus faible, ces amplificateurs ont souvent des impédances d'entrée élevées et des courants de fuites qui se mesurent en pA. Cependant, le système intégré à l'amplificateur et permettant de compenser l'offset en continu génère du bruit et des pics de courant à la sortie qui imposent quelques précautions lors de la conception. Ces amplificateurs ne fourniront un niveau de bruit acceptable qu'après filtrage des hautes fréquences, et ne conviennent donc pas pour les mesures à des fréquences supérieures à 100 Hz.

Par chance, le constructeur Maxim annonçait récemment la distribution d'un composant idéal pour notre application, le MAX4238 :

- offset < 1 μV (0.1 μV typique),
- dérive < 0.01 μV/K,
- courant de fuite < 3 pA,
- bruit < 1.5 μV p-p.

À l'aide d'un filtrage analogique et numérique, cet amplificateur permet d'atteindre les performances requises sans avoir recours à un thermostat. Cerise sur le gâteau, il coûte moins de 2 euros pièce et Maxim fournit des échantillons gratuits !

À noter que le gain maximal du MAX4238 est de 1000 (il est instable pour des valeurs supérieures à 1000). Il en existe une autre version, le MAX4239 qui est stable jusqu'à un gain de 6000, mais ce dernier est instable pour un gain inférieur à 10. Or, il existe une situation (lors du démarrage de l'amplificateur ou si les tensions d'entrée dépassent la dynamique de l'amplificateur) où l'un des deux amplificateurs se retrouve dans une configuration de gain unité. L'ensemble devient alors instable.

Mise en œuvre

L'amplificateur du deuxième étage est un OP07 ou équivalent. Pour ne pas introduire d'erreur d'offset supplémentaire, nous avons choisi un amplificateur de précision qui fait parfaitement l'affaire avec un offset inférieur à 60 μV .

En raison des pics de courant de sortie du MAX4238, il n'est pas possible d'utiliser des résistances R2 et R3 de forte valeur. Les pics de courant se transformeraient en pics de tension et augmenteraient le niveau de bruit. Pour cette raison, l'ensemble des résistances est choisi avec une valeur aussi faible que possible en évitant cependant que le courant ne dépasse quelques mA (les forts courants obligent à utiliser une alimentation plus puissante, mais surtout ils font chauffer l'amplificateur ce qui peut induire des dérives en température et créer des potentiels thermocouples parasites.

La précision des résistances est primordiale pour atteindre les performances de réjection de mode commun visées. Nous avons acquis des résistances précises à 0.1% en pensant uniquement au critère sur le gain. Or, la combinaison au hasard des résistances conduit à un offset global supérieur à 1 μV et une grande sensibilité au mode commun. Nous avons ensuite apparié les résistances à l'aide d'un multimètre de précision. Disposant d'une vingtaine de résistances, les 6 couples formés ont typiquement des valeurs identiques à moins de 0.003% près à 20°C après appariement alors que les écarts atteignent 0.1% sans cette opération). L'offset est alors descendu jusqu'aux valeurs typiques annoncées (0.1 μV) et une tension de mode commun de 1V est devenue indécélable à la sortie.

À la sortie de l'amplificateur, un filtre passe-bas avec une fréquence de coupure de 16 Hz réalise une partie du filtrage des hautes fréquences et permet une fréquence de digitalisation plus basse. Ce filtre passif augmente considérablement l'impédance de sortie de l'amplificateur. Comme l'impédance d'entrée de la carte d'acquisition est supérieure à 1 G Ω , cette impédance ne pose cependant aucun problème.

Lors du dessin de la carte nous avons veillé à limiter au maximum les longueurs de pistes (impédance des pistes) et l'encombrement de la carte (gradients de température, effets thermocouples et sensibilité au bruit électromagnétique). Un amplificateur complet est ainsi logé sur une plaque de 7x3 cm. Nous en avons réalisé 13, logés dans un petit boîtier en métal en guise de blindage.

Pour donner une indication, le coût des pièces s'élève à environ 30 euros par amplificateur, mais il faut disposer d'un nombre minimal de résistances pour pouvoir les appairer, et leur coût est significatif (soit 10 à 15 euros par amplificateur). Ce coût est complètement négligeable si on le compare à l'effort de réalisation (soit une centaine d'heures de travail au bas mot pour ce prototype).

Choix des valeurs des résistances

La valeur de la résistance R1 choisie est la plus faible possible tout en restant très supérieure à celle des pistes en cuivre et des soudures. La valeur de 50 Ω est un bon compromis.

Les résistances R2 et R3 sont choisies de sorte à maximiser le gain du premier étage tout en évitant une amplification des pics de courants à la sortie des amplificateurs opérationnels. Le gain du premier étage est aussi limité par la dynamique que l'on veut atteindre : 120 K —soit 5 mV en entrée— doivent conduire à une tension de 2.5 V en sortie au maximum —soit la tension d'alimentation de l'amplificateur opérationnel. Le premier étage doit donc avoir un gain inférieur à 500. La valeur choisie est de l'ordre de 10 K Ω et conduit à un gain de 400 pour le premier étage.

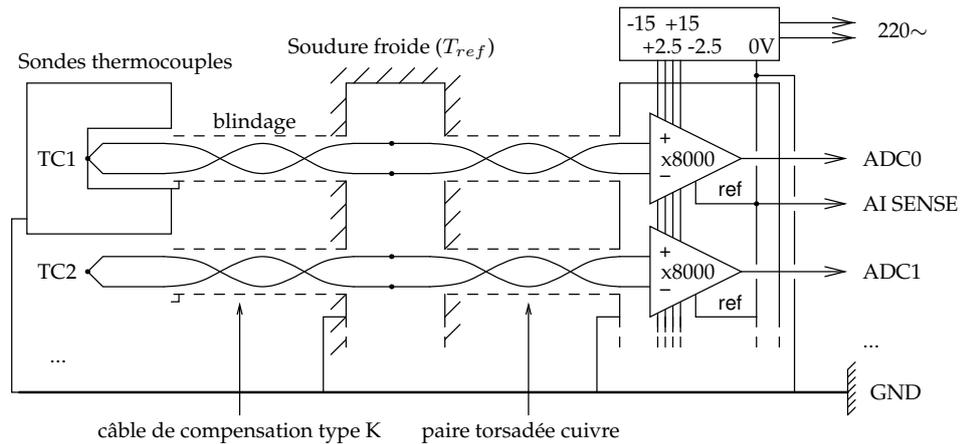


Figure E.2 – Schéma d'ensemble du système de mesure de température.

Le deuxième étage doit donc avoir un gain sélectionnable de 5 et 20 pour que le gain total soit de 2000 ou 8000. Nous avons choisi de régler le gain en connectant ou non les résistances supplémentaires R6 et R8 en parallèle aux résistances de base R7 et R9. Si les ponts sont ouverts (résistances déconnectées), le gain du deuxième étage est maximal, égal au quotient $R7/R4$. Si les ponts sont fermés, la résistance équivalente vaut $R_{eq}=1/(1/R6+1/R7)$ et le gain $R_{eq}/R4$. Les valeurs sont choisies de sorte à obtenir un courant d'une fraction de mA à travers les résistances.

La figure E.1 donne les valeurs précises. Les deux valeurs de gain obtenues sont les suivantes :

- Ponts ouverts : gain $1992 \pm 0.4 \%$
- Ponts fermés : gain $7985 \pm 0.4 \%$

Les incertitudes sont les valeurs maximales, obtenues si toutes les résistances sont aux bornes de la spécification. En pratique, autour de 20°C , la précision est bien meilleure, inférieure à 0.1 %.

E.1.4 Plan d'ensemble

Le système de mesure est schématisé sur la figure E.2.

- Les capteurs sont reliés électriquement à la pièce mesurée et celle-ci est mise à la masse.
- L'ensemble des sorties «ref» sont reliées entre elles, au 0 V de l'alimentation des amplificateurs et à l'entrée AI-SENSE de la carte de digitalisation.
- La carte est configurée en mode asymétrique non référencé, dans lequel la référence de niveau zéro est fournie par le montage extérieur à travers l'entrée AI-SENSE (un léger courant circule à travers le fil de référence à cause des résistances R8 et R9 et des condensateurs C1. Or la carte n'est pas prévue pour fournir du courant à sa sortie GND, ce qui impose d'utiliser le mode non référencé. Ce mode évite par ailleurs l'erreur due à l'éventuelle impédance de la sortie GND de la carte. Avec ce mode de fonctionnement, nous avons pu vérifier que l'erreur de digitalisation est inférieure à 0.6 mV, soit deux niveaux. La solution idéale consiste à utiliser le mode différentiel, mais on ne dispose alors plus que de 8 entrées analogiques, et comme les longueurs de fil entre l'amplificateur et la carte sont petites le mode asymétrique convient tout à fait.
- L'alimentation électrique des amplificateurs est une petite alimentation régulée 250 mA ± 15 V, dont les sorties sont flottantes. Nous avons ajouté

	consigne (V)	$U_{C+} - U_{C-}$ (V)	I_{mes} (mA)	$U_M - U_{REF}$ (V)	$R_{eq} = \frac{U_M - U_{REF} - V_{os}}{I_{mes}}$ (Ω)
ampli 1 ($V_{os}=1.5mV$)	0.1	0.300	27.424	$0.136+V_{os}$	4.9592
	1	3.0003	282.75	$1.4031+V_{os}$	4.9623
	5		1406.3	$6.9716+V_{os}$	4.9574
ampli 2 ($V_{os}=-1mV$)	0.1	0.2905	27.307	$0.1364+V_{os}$	4.9950
	0.5	1.491	140.89	$0.7030+V_{os}$	4.9897
	1	2.9991 (?)	283.50	$1.4142+V_{os}$	4.9883
	5	14.988	1405	$7.0013+V_{os}$	4.983

TAB. E.1 – Test des deux amplificateurs de puissance réalisés (l’amplificateur 1 est réalisé avec un OP27, le deuxième avec un OP07). “consigne” est la valeur fournie au logiciel de pilotage, I_{mes} est l’intensité réelle obtenue en sortie (mesurée avec un multimètre de précision), $U_M - U_{REF}$ la tension de sortie de l’étage de mesure de courant et $U_{C+} - U_{C-}$ la tension obtenue aux bornes de la charge.

à proximité des amplificateurs une carte fournissant une tension de ± 2.5 V pour les amplificateurs du premier étage. Le boîtier d’alimentation est placé le plus loin possible des amplificateurs car il génère un peu de bruit. Par ailleurs, le 0 V de l’alimentation est relié à la masse à proximité des amplificateurs, au même point que celui où est pris le niveau de référence «ref».

Il faut s’assurer que la masse de la carte d’acquisition et la masse du montage sont bien reliées d’une façon ou d’une autre. Ceci est normalement assuré par la masse des différentes prises d’alimentation du secteur. Cette liaison n’a aucun rôle dans la précision des mesures mais assure que les différences de potentiel entre l’électronique de l’expérience et la carte d’acquisition restent dans le domaine supporté par la carte.

E.2 Alimentation de précision des résistances de chauffage

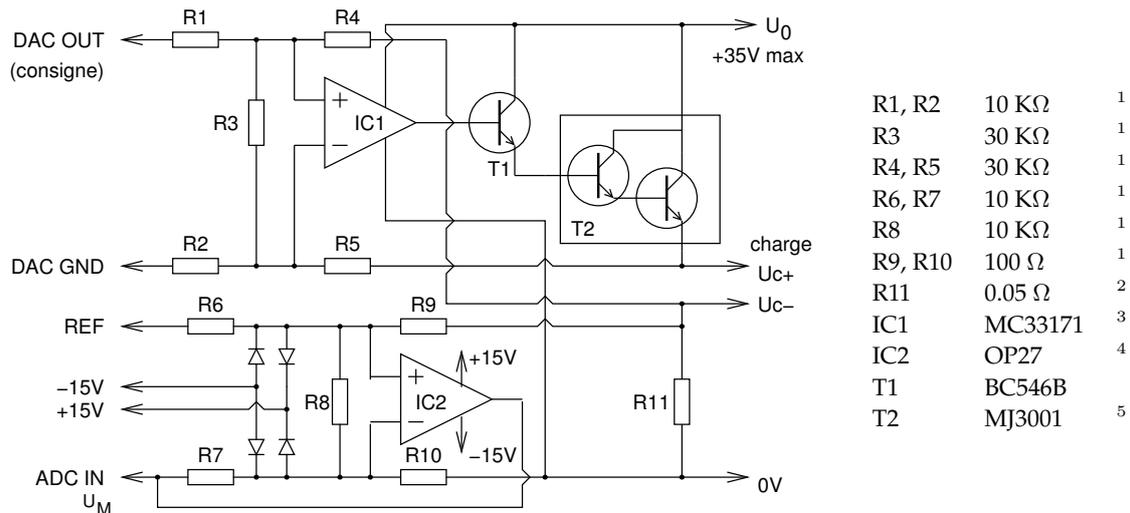
Le chauffage des deux pièces métalliques centrales de l’expérience est confié à des résistances électriques de puissance. L’un des deux moyens retenus pour mesurer le flux de chaleur et de masse est la mesure de la puissance électrique de chauffage. Il faut pour cela disposer d’une alimentation électrique contrôlée en tension et en intensité. La valeur ohmique des résistances de chauffage peut varier considérablement à haute température et on ne peut donc pas se contenter de mesurer la tension appliquée pour calculer la puissance. Une mesure simultanée de l’intensité est nécessaire. Nous avons donc conçu un montage permettant d’appliquer une tension de consigne aux bornes de la résistance de chauffage et de mesurer le courant qui la traverse. La précision requise sur chaque valeur est fixée à 1 %.

E.2.1 Schéma du montage

Le montage est détaillé sur la figure E.3. Les résistances utilisées sont des résistances relativement peu précises, mais on a pris soin de les sélectionner parmi un lot de 50 pour les apparier et obtenir des gains aussi proches que possible de 3 pour IC1 et 100 pour IC2. Le tracé des pistes autour de la résistance shunt R11 est lui aussi particulièrement soigné pour éviter que la résistance électrique des pistes ne s’ajoute à celle du shunt.

E.2.2 Limites d’utilisation

La tension maximale d’utilisation est de 35V. Les transistors de puissance sont montés sur un radiateur de petite dimension (résistance de $2.5^\circ C/W$). La puis-



- 1 Résistances film métallique à 1 % (sélectionnées et appariées)
- 2 Résistance shunt à 1 %. La liaison avec l'amplificateur de mesure et les bornes font l'objet d'une attention particulière pour ne pas fausser la valeur de la résistance (voir figure ci-contre).
- 3 Ce composant est un amplificateur opérationnel mono-tension dont la tension maximale d'alimentation est de 44V.
- 4 Amplificateur opérationnel de précision (offset < 50 μV). Ce composant est protégé par des diodes pour éviter sa destruction s'il n'est pas alimenté.
- 5 Transistor Darlington ($V_{CB} < 80V$, $I_C < 10A$, $P_{tot} < 150W$).

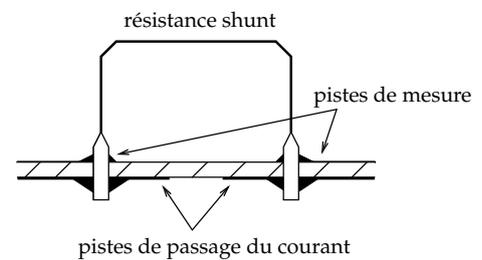


Figure E.3 – Schéma de l'amplificateur de puissance et du système de mesure du courant.

sance totale dissipée par l'amplificateur ne doit pas dépasser 40W, soit 20W par canal.

La puissance maximale dissipée par l'amplificateur est atteinte lorsque la tension aux bornes de la charge est la moitié de la tension d'alimentation de l'amplificateur. La puissance dissipée par un amplificateur est alors égale à

$$P_{tot} = \frac{U_0^2}{4R} \quad (E.2)$$

où U_0 est la tension d'alimentation et R la résistance de la charge. Pour $U_0 = 33V$ et $R = 20\Omega$ et pour $U_0 = 18V$ et $R = 5\Omega$, la puissance maximale n'est jamais dépassée. De toute évidence, on a intérêt à alimenter l'amplificateur avec une tension la plus faible possible pour limiter la dissipation dans les transistors de puissance. Attention cependant à la chute de tension de 3V associée aux transistors.

E.2.3 Validation

On a réalisé quelques tests sur les deux amplificateurs construits (voir tableau E.1). Ces tests montrent que la précision de 1% demandée est largement atteinte. En tenant compte des gains réels des amplificateurs et de la résistance équivalente effective du système de mesure de l'intensité, on peut même obtenir une précision encore plus élevée.

Nomenclature

Lettres latines :

A	J	constante de Hamaker (voir 1.2.1)
c	m^{-1}	courbure de l'interface (définie par $c \hat{=} \partial_s \theta_i$)
\tilde{c}	-	courbure adimensionnelle de l'interface (définie par $\tilde{c} \hat{=} s c$)
c_P	$J kg^{-1} K^{-1}$	capacité thermique massique à pression constante
Ca	-	nombre de capillarité $Ca \hat{=} \mu v / \sigma$
g	$J kg^{-1}$	enthalpie libre massique
g	$m s^{-2}$	gravité
I	-	indiatrice de phase, égale à 1 dans la vapeur et 0 dans le liquide (voir 3.2.4)
k	$W m^{-1} K^{-1}$	conductivité thermique
Kn	-	nombre de Knudsen $Kn \hat{=} L/l$ (L libre parcours moyen, l dimension caractéristique)
l_s	m	longueur de glissement (voir 2.1.1)
\mathcal{L}	$J kg^{-1}$	enthalpie de vaporisation
\dot{m}	$kg m^{-2} s^{-1}$	flux de masse à travers l'interface (positif vers la vapeur)
M	$kg mol^{-1}$	masse molaire
n_i	-	vecteur unitaire normal à l'interface (vers la vapeur)
\mathcal{N}	mol^{-1}	nombre d'Avogadro $\mathcal{N} = 6.02 \cdot 10^{23}$
Oh	-	nombre d'Ohnesorge $Oh \hat{=} \mu / \sqrt{\sigma \rho L}$
P	$J m^{-3}$	pression
P_i	$J m^{-3}$	pression du liquide à l'interface liquide-vapeur
Pe_s	-	nombre de Péclet local (voir 2.2.1)
Pr	-	nombre de Prandtl $Pr \hat{=} Pe/Re$
\dot{q}	$W m^{-2}$	densité de flux de chaleur
\tilde{q}	-	puissance thermique adimensionnelle par décade ($\tilde{q} \hat{=} \dot{q} \tilde{s} \ln 10$, voir 2.2.2)
Q	$W m^{-1}$	flux thermique linéique (dépend d'une longueur caractéristique d'intégration)
R	$J mol^{-1} K^{-1}$	constante des gaz parfaits $R = 8.314$
R_i	$K m^2 W^{-1}$	résistance d'interface (voir 1.1.2)
Re	-	nombre de Reynolds $Re \hat{=} \rho v l_{caract} / \mu$
s	m	abscisse curviligne le long du ménisque
s_{ext}	m	abscisse de raccordement du modèle de ligne de contact au problème extérieur
t_i	-	vecteur unitaire tangent à l'interface (la vapeur est à gauche)
T_{sat}	K	température de saturation
u	$J kg^{-1}$	énergie interne massique du fluide
v	$m s^{-1}$	vitesse scalaire
v_s	$m s^{-1}$	vitesse scalaire du solide en repère entraîné (par convention, dans la première partie les parois seront parallèles à l'axe des abscisses et $v_s \hat{=} v_s \cdot x$)
v_i	$m s^{-1}$	vitesse d'un point non matériel situé sur l'interface liquide-vapeur
v	$m s^{-1}$	vecteur vitesse
V	$m^2 s^{-1}$	débit volumique linéique
We	-	nombre de Weber $We \hat{=} \sigma / ((\rho_l - \rho_v) g l^2)$ (l dimension caractéristique)

Lettres grecques :

α	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	diffusivité thermique $\alpha \hat{=} k/\rho c_P$
Γ_{sl}		interface solide-liquide
Γ_{lv}		interface liquide-vapeur
Γ_{sv}		interface solide-vapeur
δ	m	épaisseur de film ou distance à une paroi selon le contexte
δ_R	m	longueur caractéristique de la résistance d'interface (voir 1.1.2)
θ_i	-	angle de contact (angle entre la tangente au ménisque et la paroi)
λ	-	paramètre d'ordre des solutions des équations harmoniques (voir l'annexe A)
θ_{mic}	-	angle de contact microscopique
ν	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	viscosité cinématique
μ	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$	viscosité dynamique
τ^D	J m^{-3}	tenseur des contraintes dissipatives

Indices courants :

l	grandeur relative au liquide
s	grandeur relative au solide (paroi)
v	grandeur relative à la vapeur

Références

- [1] *Numerical recipes in C++*. Cambridge University Press.
- [2] J.-L. Achard. Le phénomène de Leidenfrost gazeux. Communication personnelle, 2003.
- [3] D. M. Anderson. The spreading of volatile liquid droplets on heated surfaces. *Phys. Fluids*, 2:248–265, 1995.
- [4] D. M. Anderson and S. H. Davis. Two-fluid viscous flow in a corner. *J. Fluid Mech.*, 257:1–31, 1993.
- [5] D. M. Anderson and S. H. Davis. Local fluid and heat flow near contact lines. *J. Fluid Mech.*, 268:231–265, 1994.
- [6] R. Aris. *Vectors, tensors and the basic equations of fluid mechanics*. Prentice-Hall International, 1962.
- [7] E. Aulisa, S. Manservigi, R. Scardovelli and S. Zaleski. A geometrical area-preserving volume-of-fluid advection method. *submitted to J. Comp. Phys.*, 2003.
- [8] J. U. Brackbill, D. B. Kothe and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comp. Phys.*, 100:335–354, 1992.
- [9] C. Brandt and Stephan P. Theoretical investigation of advanced capillary structures in grooved heat pipe evaporators for space applications. In *12th International Heat Transfer Conference, Grenoble, 2002*.
- [10] F. P. Bretherton. The motion of long bubbles in tubes. *J. Fluid Mech.*, 10:166–188, 1961.
- [11] J. B. Cain, D. W. Francis, R. D. Venter and A. W. Neumann. Dynamic contact angles on smooth and rough surfaces. *J. Colloid Interface Sci.*, 94(1):123–130, 1983.
- [12] Van P. Carey. *An introduction to the thermophysics of vaporization and condensation processes in heat transfer equipment*. Hemisphere Publishing Corporation, 1992.
- [13] R. Cook, C. Y. Tung and P. C. Jr. Wayner. Use of scanning microphotometer to determine the evaporative heat transfer characteristics of the contact line region. *J. Heat Transfer*, 103:325–330, 1981.
- [14] M. G. Cooper and J. P. Loyd. The microlayer in nucleate pool boiling. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 12:895–913, 1969.
- [15] R. G. Cox. The spreading of a liquid on a rough solid surface. *J. Fluid Mech.*, 131:1–26, 1983.
- [16] R. G. Cox. The dynamics of the spreading of liquids on a solid surface - Part 1. Viscous flow. *J. Fluid Mech.*, 168:169–194, 1986.
- [17] R. G. Cox. Inertial and viscous effects on dynamic contact angles. *J. Fluid Mech.*, 357:249–278, 1998.
- [18] J. M. Delhaye. Jump conditions and entropy sources in two-phase systems, local instant formulation. *Int. J. Multiphase Flow*, 1:395–409, 1974.
- [19] J. M. Delhaye, M. Giot and M. L. Riethmuller. *Thermohydraulics of two-phase systems for industrial design and nuclear engineering*. Hemisphere Publishing Corp., 1981.
- [20] J. Drelich, J. D. Miller and R. J. Good. The effect of drop (bubble) size on advancing and receding contact angle for heterogenous and rough solid surfaces as observed with sessile-drop and captive-bubble techniques. *J. Colloid Interface Sci.*, 179:37–50, 1996.
- [21] C. Duquennoy. *Développement d'une approche de simulation numérique directe de l'ébullition en paroi*. Thèse de doctorat, INP Toulouse, 2000.
- [22] C. Duquennoy, O. Lebaigue and J. Magnaudet. A numerical model of gas-liquid-solid contact line. In A.C. King and Y.D. Shikhmurzaev, editors, *Fluid Mechanics and its Applications*, vol. 62. Kluwer Academic Publishers, July 2000.
- [23] E. B. V. Dussan. The moving contact line: the slip boundary condition. *J. Fluid Mech.*, 77:665–684, 1976.
- [24] E. B. V. Dussan and S. H. Davis. On the motion of a fluid-fluid interface along a solid surface. *J. Fluid Mech.*, 65:71–95, 1974.

- [25] E. B. Dussan V., E. Ramé and S. Garoff. On identifying the appropriate boundary conditions at a moving contact line: an experimental investigation. *J. Fluid Mech.*, 230:97–116, 1991.
- [26] I. W. Eames, N. J. Marr and H. Sabir. The evaporation coefficient of water: a review. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 40(12):2963–2973, 1997.
- [27] P. Emonot. *Méthodes de volumes-éléments finis : application aux équations de Navier-Stokes et résultats de convergence*. Thèse de doctorat, Université Claude Bernard, Lyon I, 2003.
- [28] M. Fermigier and P. Jenffer. An experimental investigation of the dynamic contact angle in liquid-liquid systems. *Journal of Colloid and Interface Science*, 146:226–241, 1991.
- [29] P. G. Gennes. Wetting, statics and dynamics. *Reviews of Modern Physics*, 57(3):827–863, 1985.
- [30] G. A. Georgiou and P. M. Eagles. The stability of flows in channels with small wall curvature. *J. Fluid Mech.*, 159:259–287, 1985.
- [31] H. Gouin. Energy of interaction between solid surfaces and liquids. *J. Phys. Chem. B*, 102:1212–1218, 1998.
- [32] H. Gouin and S. Gavriluk. Wetting problem for multi-component fluid mixtures. *Physica A*, 268:291–308, 1999.
- [33] N. G. Hadjiconstantinou. Hybrid atomistic-continuum formulations and the moving contact-line problem. *J. Comp. Phys.*, 154:24–265, 1999.
- [34] S. Heib. *Nouvelles discrétisations non structurées pour des écoulements de fluides à incompressibilité renforcée*. Thèse de doctorat, Université Paris VI, 2003.
- [35] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comp. Phys.*, 39:201, 1981.
- [36] L. M. Hocking. A moving fluid interface. - Part 2. The removal of the force singularity by a slip flow. *J. Fluid Mech.*, 79:209–229, 1977.
- [37] L. M. Hocking and A. D. Rivers. The spreading of a drop by capillary action. *J. Fluid Mech.*, 121:425–442, 1982.
- [38] M. Ishii. *Thermo-fluid theory of two-phase flow*. Eyrolles, 1975.
- [39] J. N. Israelachvili. *Intermolecular and surface forces*. Academic Press, 1985.
- [40] D. Jamet. *Etude des potentialités de la théorie du second gradient pour la simulation numérique directe des écoulements liquide-vapeur avec changement de phase*. Thèse de doctorat, ECP, 1998.
- [41] D. Jamet, O. Lebaigue, N. Coutris and J. M. Delhaye. The second gradient method for the liquid-vapor flows with phase change. *J. Comp. Phys.*, 169:624–651, 2001.
- [42] D. Jamet, D. Torres and J. U. Brackbill. On the theory and computation of surface tension: The elimination of parasitic currents through energy conservation in the second gradient method. *J. Comp. Phys.*, 182:262–276, 2002.
- [43] R. E. Johnson, R. H. Dettre and D. A. Brandreth. Dynamic contact angles and contact angle hysteresis. *J. Colloid Interface Sci.*, 62(2):205–212, 1977.
- [44] D. Juric. A new discretization of surface tension to remove parasitic currents. Communication personnelle, 2003.
- [45] J. Kern and P. Stephan. Effect of microscale heat and mass transfer on the nucleate boiling heat transfer of binary refrigerant mixtures. In *20th International Congress of Refrigeration*, Sydney, 1999.
- [46] I-Y. Kim and P. C. Wayner. The shape of an evaporating completely wetting extended meniscus. *J. Thermophys. Heat Transfer*, 10:320–325, 1997.
- [47] O. Lebaigue, D. Jamet, C. Duquennoy and N. Coutris. Review of existing methods for direct numerical simulation of liquid-vapor two-phase flows. In *6th International Conference on Nuclear Engineering*, 1998.
- [48] S. L. Lednovich and J. B. Fenn. Absolute evaporation rates for some polar and nonpolar liquids. *AIChE Journal*, 23(4):454–459, 1977.
- [49] J. Lienhard. *A heat transfer textbook*. Prentice-Hall, 1981.
- [50] M. Mann, K. Stephan and P. Stephan. Influence of heat conduction in the wall on nucleate boiling heat transfer. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 43:2193–2203, 2000.
- [51] R. Marek and J. Straub. Analysis of the evaporation coefficient and the condensation coefficient of water. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 44(1):39–53, 2001.
- [52] B. Mathieu. Approche par un schéma de relaxation de la résolution des équations du second gradient. Rapport de DEA, Analyse Numérique, Université Pierre et Marie Curie, 1999.

- [53] B. Mathieu, L. Tadrist and O. Lebaigue. Numerical investigation of a dynamic contact line model for perfectly wetting liquids on a heated wall of finite conductivity. In *12th International Heat Transfer Conference*, 2002.
- [54] B. Mathieu, L. Tadrist and O. Lebaigue. Modélisation physique et numérique d'une ligne de contact dynamique avec changement de phase. In *Micro-écoulements liquides et gazeux : phénomènes physiques et applications*. Société Hydrotechnique de France, décembre 2002.
- [55] B. Mathieu, L. Tadrist and O. Lebaigue. Dynamic contact line model applied to single bubble growth. 41th European Two-Phase Flow Group Meeting, 2003.
- [56] B. Maury. Characteristics ALE method for the unsteady 3d navier-stokes equations with a free surface. *Int. J. Comp. Fluid Dynamics*, 6:175–188, 1996.
- [57] H. K. Moffatt. Viscous and resistive eddies near a sharp corner. *J. Fluid Mech.*, 18:1–18, 1963.
- [58] H. K. Moffatt and B. R. Duffy. Local similarity solutions and their limitations. *J. Fluid Mech.*, 96:299–313, 1980.
- [59] S. J. S. Morris. A phenomenological model for the contact region of an evaporating meniscus on a superheated slab. *J. Fluid Mech.*, 411:59–89, 2000.
- [60] S. J. S. Morris. Contact angles for evaporating liquids predicted and compared with existing experiments. *J. Fluid Mech.*, 432:1–30, 2001.
- [61] C. G. Ngan and E. B. Dussan V. On the dynamics of liquid spreading on solid surfaces. *J. Fluid Mech.*, 209:191–226, 1989.
- [62] J. G. Petrov, J. Ralson, M. Schneemilch and R. A. Hayes. Dynamics of partial wetting and dewetting in well-defined systems. *J. Phys. Chem. B*, 107:1634–1645, 2003.
- [63] O. Pironneau. *Méthodes d'éléments finis pour les fluides*. Masson, 1988.
- [64] Y. Pomeau. Recent progress in the moving contact line problem: a review. *C. R. Mécanique*, 330:207–222, 2002.
- [65] S. Popinet. *Stabilité et formation de jets dans les bulles cavitantes : développement d'une méthode de chaîne de marqueurs adaptée au traitement numérique des équations de Navier-Stokes avec surfaces libres*. Thèse de doctorat, Université Paris 6, 2000.
- [66] S. Popinet and S. Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *Int. J. Numerical Methods in Fluids*, 6(30):775–793, 1999.
- [67] M. Potash and P. C. Wayner. Evaporation from a two-dimensional extended meniscus. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 15:1851–1863, 1972.
- [68] A. Prosperetti. Motion of two superposed viscous fluids. *Phys. Fluids*, 24:1217–1223, 1981.
- [69] I. Proudman and M. Asadullah. Steady viscous flow near a stationary contact line. *J. Fluid Mech.*, 187:35–43, 1988.
- [70] M.-Y. Rhou and P. Sheng. Dynamics of immiscible-fluid displacement in a capillary tube. *Phys. Rev. Letters*, 64:882–885, 1990.
- [71] Y. Rocard. *Thermodynamique*. Masson, 1952.
- [72] E. S. Sabisky and C. H. Anderson. Verification of the Lifshitz theory of the van der Waals potential using liquid-helium films. *Phys. Rev. A*, 7:790–806, 1973.
- [73] R. W. Schrage. *A theoretical study of interphase mass transfer*. Columbia University Press, 1953.
- [74] Y. D. Shikhmurzaev. Moving contact lines in liquid/liquid/solid systems. *J. Fluid Mech.*, 334:211–249, 1997.
- [75] Y. D. Shikhmurzaev, T. D. Blake and M. Bracke. Experimental evidence of nonlocal hydrodynamic influence of the dynamic contact angle. *Physics of Fluids*, 11:1995–2007, 1999.
- [76] S. Shin and D. Juric. Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity. *J. Comp. Phys.*, 2001.
- [77] M. Shoji and X. Y. Zhang. Study of contact angle hysteresis. *JSME International Journal, series B*, 37(3):560–567, 1994.
- [78] P. Stephan. *Wärmedurchgang bei Verdampfung aus Kapillarrillen in Wärmerohren*. VDI-Verlag GmbH, 1992.
- [79] P. Stephan. Microscale heat and mass transfer phenomena and their influence on macroscopic evaporator performance. In *Proceedings 9th International Heat Pipe Conference*, 1995.
- [80] P. C. Stephan and C. A. Busse. Analysis of heat transfer coefficient of grooved heat pipe evaporator walls. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 35:383–391, 1992.
- [81] K. Stoev, E. Ramé, T. Leonhardt and S. Garoff. The effects of thin films on the hydrodynamics near moving contact lines. *Physics of Fluids*, 10(8):1793–1803, 1998.

- [82] K. Stoev, E. Ramé and S. Garoff. Effects of inertia on the hydrodynamics near moving contact lines. *Phys. Fluids*, 11(11):3209–3216, 1999.
- [83] S. O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous incompressible multi-fluid flows. *J. Comp. Phys.*, 100:25–37, 1992.
- [84] P. C. Wayner. A constant heat flux model of the evaporating interline region. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 21:362–364, 1978.
- [85] P. C. Wayner. Effect of interfacial phenomena in the interline region on the rewetting of a hot spot. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 22:1033–1040, 1979.
- [86] P. C. Wayner. Interfacial profile in the contact line region of a finite contact angle system. *J. Colloid Interface Sci.*, 77(2):495–500, 1980.
- [87] P. C. Wayner. Adsorption and capillary condensation at the contact line in change of phase heat transfer. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 25(5):707–713, 1982.
- [88] P. C. Wayner. *Series in Chemical and Mechanical Engineering*, chapter 6, Microscale energy transport. Taylor & Francis, 1997.
- [89] P. C. Wayner and C. L. Coccio. Heat and mass transfer in the vicinity of the triple interline of a meniscus. *AIChE Journal*, 17(3):569–574, 1971.
- [90] P. C. Wayner, Y. K. Kao and L. V. LaCroix. The interline heat-transfer coefficient of an evaporating wetting film. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 19:487–492, 1976.
- [91] F. M. White. *Viscous Fluid Flow*. McGraw Hill, 1974.
- [92] F. Yan. *Modélisation de l'autovaporisation en écoulements subcritiques et critiques*. Thèse de doctorat, Université Catholique de Louvain, 1991.
- [93] T. Ytrehus. Molecular-flow effects in evaporation and condensation at interfaces. *Multiphase Science and Technology*, 9:205–327, 1997.