

THÈSE

PRÉSENTÉE À

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE
DES SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

par **Jérémy LEBOI**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : MÉCANIQUE

Dégivrage des pompes à chaleur sur l'air : influence de la mouillabilité des ailettes d'échangeurs extérieurs et contrôle des flux hydriques lors du givrage et du dégivrage.

Soutenue le : 06 juin 2012

Après avis de :

MM. P. HOFFMAN, Professeur à l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne et à l'EMPA	Rapporteur
J.-L. ESTIVALEZES, Ingénieur de Recherche à l'ONERA-CERT et Professeur à l'IMFT .	Rapporteur

Devant la Commission d'examen formée de :

MM. J.-L. BATTAGLIA, Professeur à l'Université Bordeaux I, I2M	Président
P. HOFFMAN, Professeur à l'EPFL et à l'EMPA	Rapporteur
J.-L. ESTIVALEZES, IR à l'ONERA-CERT et Prof. à l'IMFT .	Rapporteur
J.-P. CALTAGIRONE, Professeur à l'Institut Polytechnique de Bordeaux, I2M	Directeur de thèse
S. VINCENT, Maître de Conférence et HDR à l'Institut Polytechnique de Bordeaux, I2M	Co-Directeur de thèse
P. DALICIEUX, Responsable Pompes à Chaleur ECLEER, EDF	Examineur

Résumé

Dans un contexte de limitation de la consommation en énergie fossile et de développement durable, les pompes à chaleur présentent un intérêt majeur. Les obstacles rencontrés, notamment le givrage compact, freinent leur utilisation. La mise en place de nouveaux matériaux, par exemple par des propriétés de mouillage particulières, est une voie innovante. L'étude des déplacements de gouttes et de ponts entre ailettes, par résolution des équations de Navier-Stokes, permet de comprendre localement les écoulements et de caractériser l'effet du mouillage (modèle numérique d'angle de contact) et du confinement. Plusieurs études ont été menées lors desquelles des comportements significatifs ont été mis au jour et permettent de mettre en place des solutions efficaces pour les enjeux industriels. Une approche des phénomènes de mouillage extrêmes (superhydrophobie) a été réalisée et montre leur intérêt d'un point de vue performance. En parallèle, une méthode de changement d'état a été développée dans le code de calculs scientifiques Thétis pour prédire l'évacuation de la glace lors du dégivrage sur des géométries simples. Cette approche originale basée sur la méthode Volume Of Fluid, dérivée de méthodes existantes en Front-Tracking, montre une faisabilité et une efficacité intéressante.

Mots-clés

Pompe à chaleur, Mouillage, Superhydrophobie, Lissage, Ponts liquides, Changement de phase, Givrage

Abstract

In a context of limiting the consumption of fossil energy and of sustainable development, heat pumps are of major interest. Some issues, including icing compaction, reduce its use. The introduction of new materials, including special wetting properties, is an innovative way. The study of displacement of drops and liquid bridges between fins, by solving the Navier-Stokes equations, allows us to understand local flows and to characterize the effect of wetting (numerical model of contact angle which depends on controlling the smoothing of Volume Of Fluid function) and of containment. Several studies have been conducted on drops and liquid bridges submitted to flow on sloping walls, driving to significant behaviors. These studies can implement effective solutions to industrial difficulties. An approach to extreme wetting phenomena (superhydrophobicity) was performed and showed their interest to a good evacuation efficiency. In parallel, a method of phase change was developed in the code of scientific computing Thetis to simulate the evacuation of ice during defrosting periods on simple geometries. An innovative approach based on Volume Of Fluid method, derived from methods available in Front-Tracking shows its feasibility and efficiency.

Keywords

Heat pump, Wetting effects, Superhydrophobicity, Smoothing, Liquid bridges, Phase change, Frost

« Le commencement de toutes les sciences, c'est l'étonnement de ce que les choses sont ce qu'elles sont. »

Aristote – Métaphysique

« L'idée qu'un électron exposé à un rayonnement choisit en toute liberté la manière ou la direction où il doit sauter m'est insupportable. S'il en était ainsi, j'aimerais mieux être cordonnier ou même employé dans un bistrot que physicien. »

Albert Einstein – Débat sur la théorie des quanta

Remerciements

Une thèse est une aventure dont la réussite ne peut être uniquement le fruit d'un travail individuel. Les années passées dans l'Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux (I2M), dans le département Transfert Ecoulement Fluides Energétique (TREFLE), successivement lors de mon stage de fin d'études puis lors de ces travaux de thèse ont été un formidable voyage initiatique dans l'ère numérique scientifique. Cette thèse a été financée par Electricité de France – Recherche et Développement (département EnerBAT, Les Renardières).

Je tiens à remercier tout d'abord le directeur de l'institut I2M, à savoir le professeur Eric ARQUIS, pour m'avoir accueilli en ces lieux, me permettant de découvrir et de réaliser un doctorat dans les meilleures conditions possibles. Je le remercie aussi au passage des cours qu'il prodigue à l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie, Biologie et Physique de Bordeaux (IPB – ENSCBP), qui m'ont insufflé cette envie de poursuivre dans la voie de la science numérique.

J'adresse mes remerciements aux rapporteurs de mes travaux, Patrik HOFFMANN, Directeur du Laboratory Advanced Materials Processing à l'Empa et professeur à l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, et Jean-Luc ESTIVALEZES, ingénieur de recherche à l'ONERA et professeur à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse. Vos remarques et votre intérêt ont été importants pour juger de la qualité de mes travaux. De plus, je remercie Jean-Luc BATTAGLIA, professeur à l'Université Bordeaux 1, pour avoir présidé le jury désigné pour ma soutenance de thèse, ainsi que Pascal DALICIEUX, ingénieur à EDF R&D pour avoir à la fois encadré mes travaux de thèse et avoir porté un regard critique et toujours encourageant sur les résultats et su remettre dans le contexte industriel leurs apports.

Cette thèse n'aurait été possible sans l'encadrement de mes directeurs de thèse, Jean-Paul CALTAGIRONE (professeur de l'IPB) et Stéphane VINCENT (Maître de conférence habilité à diriger des recherches, IPB), avec lesquels les échanges ont toujours été passionnés et passionnants! Je vous remercie sincèrement pour votre partage de savoir et votre motivation et reste impressionné par vos idées!

Pascal DALICIEUX et François COURTOT : merci! Merci pour avoir eu confiance en Stéphane et Jean-Paul afin de monter ce projet numérique, merci de leur avoir fait confiance dans leur choix de me prendre en thèse et merci pour les réunions réalisées en Suisse et en France, les travaux ont avancé tant bien que mal, une thèse supplémentaire sera sans doute nécessaire, mais ce mémoire en pose les futures bases.

Je remercie mes collègues et amis du TREFLE. J'espère que les aides et autres coups de main que j'aurai distillés au laboratoire resteront après mon départ. Je sais que c'est cette partie du manuscrit que vous lirez avant toutes les autres!

Les indispensables : Valérie et Noémie! Courage les filles, mon mail est dispo pour les questions techniques;)

Les plus expérimentés (dans l'ordre des bureaux) : Mejdî (humour fracassant et gentillesse tunisienne!), Arnaud (Windowsien mais dans le bon sens du terme), Jean (dieu de Matlab, merci pour l'équation transcendante et la ps3), Stéphane (gentillesse franco-italienne, disponibilité linuxienne et lucidité scientifique), Pascale Subra (enthousiasme communicatif), Delphine (mac-addict, un de tes derniers remparts Apple s'en va, tiens bon!! et prends soin de ta famille), David (notre expérimentateur fou!), Cédric (le BG du labo, toujours disponible si besoin), Pierre (Deeaaaathhh, tu es le contre-exemple parfait des personnes critiquant les métalleux : scientifique – papa poule – no alcohol).

Les expérimentés, arrivés plus-tard : Thomas (arrivé dans ma dernière année), Faker (collègue de bureau agréable car discret) et Faten, Sylvie (toujours la pêche!! rire communicatif), Sakir.

Les moins expérimentés (dans l'ordre d'apparition au cours de ma thèse) : Arthur, Mathilde, Romain, Delphine V, Céline, Honda, Louis, Ludo (notre coureur de ... voitures, karting forever), Alexandre (geek or not geek ? politigeek assurément), Adrien (well done le mariage et formidable collègue de bureau), Louiza (la classe et la chaleur à l'algérienne!! tu reprends le flambeau de la mouillabilité, ne lâche pas le morceau – coucou à ton homme), Frédéric (je vais te battre ... au tennis!), Antoine (autre geek parmi les geek, tiens le coup car tu seras notre dernier représentant!), Baptiste (l'homme à la moto), Bastien (connait la recette des dred' parfaites), Rabé (cool attitude), Erik (buddy et phase change addict), Manik (india is in da place) et nos amis les stagiaires!!

Je voudrais en profiter pour adresser un salut amicale à toutes les connaissances que j'ai pu réaliser sur internet, notamment les Doozer (équipe de jeu en ligne avec JeffPeachy), Alexandre Baron le lyonnais avec qui je monte des projets selon nos envies, et qui m'a fait découvrir son groupe de rock ParanoidPop, Warhawk notre homme à tout faire et initiateur du BrightGamePanel (magnifique réussite). Enfin, sur ce point, je remercie toujours korben.info, tutos-gameserver.fr, google+, fredzone.org, et pleins d'autres pour les connaissances informageeks apprises et les rencontres enrichissantes!!

Enfin, je tiens à remercier mes proches, Amélie, Romain, Clémence et Maxime, Céline, Antoine, les camarades de promo oubliés. Ma famille tient une place à part dans mon coeur, mes parents qui n'ont pu être là durant ma soutenance mais qui m'ont toujours poussé à aller plus loin, Blanche – ma petite femme – avec qui mon premier bébé, Eléonore, naîtra en septembre (et la belle famille évidemment). Sans vous, rien n'aurait été possible, votre soutien, vos coups de boost et votre amour m'ont été les choses les plus utiles de cette étape de ma vie.

*Je dédie ce manuscrit, le travail qui a été nécessaire
pour le réaliser et la soutenance à mes parents et
Blanche, ainsi qu'à notre fille*

Je vous aime.

Table des matières

Notations	xvii
Introduction Générale	1
I Aspects hydrodynamiques de la mouillabilité	7
1 Physique des écoulements diphasiques sur paroi.	9
1.1 La physique des écoulements diphasiques incompressibles de fluides non miscibles	9
1.1.1 Grandeurs du système et caractéristiques importantes des fluides	9
1.1.2 Déplacement d'une goutte et phénomènes de démouillage.	15
1.1.3 Goutte sur une paroi : vers l'hystérésis d'angle de contact	17
1.1.4 La superhydrophobie	25
1.1.5 Paramètres adimensionnels associés à ces phénomènes	30
1.2 Modèles physiques et équations de conservation de la mécanique des fluides. . .	31
1.2.1 Conservation de la masse	33
1.2.2 Conservation de la quantité de mouvement	34
2 Modélisation et simulation numérique pour les écoulements diphasiques	37
2.1 L'approche de modélisation	37
2.1.1 Le modèle macroscopique : équations de mouvement et conditions de saut	37
2.1.2 Le modèle mésoscopique : le modèle à un fluide	39
2.1.3 La tension superficielle : une force volumique	42
2.2 La simulation numérique pour le calcul des écoulements diphasiques incompressibles	44
2.2.1 La méthode des volumes finis et les domaines fictifs	44
2.2.2 Les méthodes de résolution des équations discrètes	45
2.3 Les méthodes de suivi d'interfaces	50
2.3.1 Suivi de front	50
2.3.2 Suivi d'interface en volume avec reconstruction	50
2.3.3 Suivi d'interface sans reconstruction	52
2.4 Le traitement des conditions aux limites	53

2.4.1	Les conditions aux limites pour les écoulements	53
2.4.2	La modélisation des obstacles	53
2.4.3	L'angle de contact et la mouillabilité apparente	54
2.5	Conclusion	70
3	Déplacements de gouttes et ponts liquides sur des parois	71
3.1	Déplacements gravitaires	72
3.1.1	Etat de l'art et choix à faire	72
3.1.2	Contexte numérique et choix de méthodes de résolution	73
3.1.3	Gouttes tri-dimensionnelles sur plan incliné	74
3.1.4	Ponts liquides	85
3.2	Déplacements sous écoulement forcé	95
3.3	Micro-structuration de la surface : la superhydrophobie	108
3.4	Conclusion et perspectives soulevées	121
II	Aspect thermique : le traitement du changement de phase	123
4	Le givrage	125
4.1	Le changement de phase ou la transition d'état	125
4.1.1	Équation de conservation de l'énergie	125
4.1.2	Terme source : le changement d'état	128
4.1.3	Modèles de givrage	132
4.1.4	Modèle "complet" : Lenic, Trp et Frankovic	136
4.2	Le changement d'état : variation avec la porosité et l'humidité	137
4.2.1	La porosité	137
4.2.2	L'humidité	137
4.2.3	Réécriture de l'équation de conservation de la masse	138
5	Les méthodes numériques pour le changement d'état	141
5.1	Traitement de l'équation de conservation de l'énergie	141
5.2	Traitement de l'équation du changement d'état - méthodes et limitations	142
5.2.1	Domaines séparés	142
5.2.2	New source	142
5.2.3	Chaleur spécifique apparente	143
5.2.4	Méthode enthalpique	143
5.2.5	Relation modèle de changement d'état - méthodes numériques	144
5.3	Première proposition : amélioration de la méthode New Source via la masse volumique variable	146
5.3.1	Développement de la méthode : schéma itératif	146
5.3.2	Modification proposée	147
5.4	VOF-PC : le changement de phase par un schéma VOF-PLIC	148

5.5	Conclusion	150
6	Le changement de phase sous écoulement à masse volumique variable	151
6.1	Cas du changement de phase hors écoulement	151
6.1.1	Le problème de Stefan à masse volumique variable	151
6.1.2	Démarche de validation et résultats	155
6.1.3	Méthode New Source avec correction	156
6.1.4	Méthode VOF-PC pour le changement de phase	161
6.2	Cas du changement de phase sous écoulement latéral	164
	Conclusion	167
A	Choix d'une relation entre C_∞ et l'angle de contact apparent	171
A.1	Objectifs	171
A.2	Description des cas	171
A.2.1	Configurations initiales	171
A.2.2	Paramètres numériques	172
A.3	Résultats	173
A.3.1	Lois existantes	173
A.3.2	Détermination d'une loi continue	175
	Bibliographie	184

Table des figures

1	Schéma de fonctionnement normal d'une PAC air/air.	2
2	Cycle thermodynamique de fonctionnement normal d'une PAC air/air.	3
3	Modélisation d'une batterie d'ailettes constituant un échangeur de chaleur extérieur, pour une PAC aérothermique.	4
1.1	Goutte d'eau après impact sur une surface d'eau libre	10
1.2	Forces interfaciales et forces dans le fluide	11
1.3	Film de liquide tiré par un cadre mobile.	11
1.4	Ligne de contact pour une goutte posée sur un solide : forces de tension en présence	12
1.5	Mouillabilité différente entre deux liquides pour un matériau identique de substrat.	15
1.6	Angle de contact dynamique pour un solide s'enfonçant dans un bain de liquide en mouillage total, en fonction du nombre capillaire tel que défini dans (1.1.5) (tirée de Quéré [Qué03])	16
1.7	Injection (haut) et pompage (bas) d'une goutte : apparition d'un angle avançant et reculant de contact.	17
1.8	Évolution de l'angle de contact sur une surface rugueuse (schéma)	19
1.9	Position de l'interface en fonction de la présence de défaut : création d'un angle de contact.	20
1.10	Configuration pour la mise en évidence de la création d'un angle de contact lorsqu'un défaut apparaît.	20
1.11	Déformation de la ligne de contact lorsqu'une perturbation est mise en place (ajout d'une particule solide)	23
1.12	Évolution de f_m pour un défaut gaussien.	24
1.13	Vue numérique de la surface d'une feuille de lotus en présence de gouttes d'eau et d'impuretés s'y accrochant, <i>Wikimedia sous licence Creative Commons</i>	26
1.14	Vue en microscopie électronique à balayage, d'une surface superhydrophobe : définition des grandeurs associées aux picots pour les cas Wenzel ou Cassie-Baxter (tiré de Barbieri [Bar06])	27
1.15	Définition des surfaces pour le cas Wenzel	28
1.16	Définition des surfaces pour le cas Cassie-Baxter	28
1.17	Définition des énergies de surface associées aux cas Wenzel ou Cassie-Baxter (tiré de Barbieri [Bar06])	29

1.18	Volume matériel contenant une interface Σ entre deux milieux de nature différente.	32
2.1	Différences entre le domaine réel "physique" et le domaine modélisé via l'approche des domaines dits "fictifs".	44
2.2	Maillage de type MAC, décalé en grille pression-vitesse-viscosité, en 3D.	49
2.3	Repérage de l'interface via la méthode VOF-PLIC.	51
2.4	Repérage de l'interface via la méthode VOF-TVD.	52
2.5	Technique de lissage par Brackbill [BKZ92] (à gauche) et Lafaurie [LNS ⁺ 94] (à droite) : stencil nécessaire en gris sombre.	55
2.6	Repérage de l'interface via une méthode Smooth-VOF (vert, courbe centrale) et comparaison avec VOF-PLIC (rouge, créneaux).	57
2.7	Comparaison entre VOF-PLIC, Front-Tracking et SVOF sur l'ascension d'une bulle d'air dans de l'eau, [PVL ⁺ 10].	58
2.8	Condition initiale de gouttes sur des plans horizontaux.	61
2.9	Evolution en fonction du temps de l'angle de contact et équilibre apparent d'une goutte sur une plaque mouillante ($\theta_s = 170^\circ$).	63
2.10	Description de la situation initiale pour le cas de validation de Fujimoto ($d_p, v_0, \alpha = (0.53\text{mm}, 4\text{m.s}^{-1}, 30^\circ)$).	65
2.11	Maillage utilisé pour le cas de validation Fujimoto et mesure réelle réalisée.	66
2.12	Mesure de l'étalement adimensionné de la goutte dans le cas de Fujimoto [HF07] ($d_p, v_0, \alpha = (0.53\text{ mm}, 4.0\text{ m/s}, 30^\circ)$) et vues du dessus de la mise en mouvement.	67
2.13	Vue 2D d'une goutte dans le cas de Fujimoto [HF07] ($d_p, v_0, \alpha = (0.53\text{ mm}, 4.0\text{ m/s}, 30^\circ)$).	68
2.14	Vue 3D d'une goutte dans le cas de Fujimoto [HF07] ($(d_p, v_0, \alpha) = (0.53\text{ mm}, 4.0\text{ m/s}, 30^\circ)$).	69
3.1	Description de l'état initial des cas de gouttes inclinées sur paroi, $\theta_0 = 90^\circ$.	75
3.2	Apparition d'un hystérésis marqué sur l'angle de contact en fonction de l'angle statique imposé à la paroi, à stationnarité, simulation pour un angle d'inclinaison de 45° .	75
3.3	Vue 3D d'une goutte d'eau de volume de $1\mu L$, sur un matériau à angle de contact de 85° et pour un angle d'inclinaison de 30° , lignes de courant dans le repère relatif de la goutte, norme de la vitesse sur les lignes de courant (champ couleur).	79
3.4	Evolution de la hauteur et de l'étalement adimensionnés par le rayon initial, d'une goutte d'eau sur un matériau à angle de contact de 30° en fonction du temps adimensionné par (3.1) pour des angles d'inclinaison et des volumes différents. (légende : Angle de contact θ . angle d'inclinaison α . volume Vol)	80
3.5	Evolution de la hauteur et de l'étalement adimensionnés par le rayon initial, d'une goutte d'eau sur un matériau à angle de contact de 85° en fonction du temps adimensionné par (3.1) pour des angles d'inclinaison et des volumes différents. (légende : Angle de contact θ . angle d'inclinaison α . volume Vol)	81

3.6	Evolution de la hauteur et de l'étalement adimensionnés par le rayon initial, d'une goutte d'eau sur un matériau à angle de contact de 140° en fonction du temps adimensionné par (3.1) pour des angles d'inclinaison et des volumes différents. (légende : Angle de contact θ . angle d'inclinaison α . volume Vol) . . .	82
3.7	Relation entre énergie en excès, E_c , et énergie dissipée par effets de mouillage et visqueux, E_d . (légende : $a\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)	84
3.8	Domaine initial d'étude, vue de haut, des ponts sur des surfaces horizontales. . .	85
3.9	Angle de contact moyen ($(\text{haut}+\text{bas})/2$) mesuré à l'équilibre, lors de l'étude des ponts sur des surfaces horizontales. (légende : $CA\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)	87
3.10	Différence de pression en fonction du demi-écart et de l'angle de contact imposé pour des ponts capillaires laissés au repos. (légende : $CA\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)	87
3.11	Evolution de la différence entre la force \hat{f} et la force moyenne \hat{f}_m en fonction des propriétés de mouillage statiques imposées et du demi-écart. (légende : $CA\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)	88
3.12	Cinétique de mise en équilibre d'un pont pour $\theta = 30^\circ$ avec un demi-écart de $0.25mm$, isosurface (interface eau-air, $C^S = 0.5$) et lignes de courant 3D (norme de la vitesse en couleur sur les lignes de courant, dans le repère du pont) dans le pont	89
3.13	Cinétique de mise en équilibre d'un pont pour $\theta = 85^\circ$ avec un demi-écart de $0.25mm$, isosurface (interface eau-air, $C^S = 0.5$) et lignes de courant 3D (norme de la vitesse en couleur sur les lignes de courant, dans le repère du pont).	90
3.14	Mise en équilibre d'un pont pour $\theta = 140^\circ$ avec un demi-écart de $1mm$, isosurface (interface eau-air, $C^S = 0.5$) et lignes de courant 3D (norme de la vitesse en couleur sur les lignes de courant, dans le repère du pont).	91
3.15	Position initiale des ponts avant chute due à l'inclinaison du domaine.	92
3.16	Vitesse limite de sortie due à l'inclinaison du domaine dans le cas des ponts liquides inclinés à la verticale, pour différents angles de contact et écartements. (légende : $CA\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)	92
3.17	Evolution d'un pont liquide entre 2 surfaces lisses mouillantes (angle de contact 30°), écartées de $0,5mm$ et pour une inclinaison de 90° des parois.	93
3.18	Evolution d'un pont liquide entre 2 surfaces lisses non mouillantes (angle de contact 140°), écartées de $2mm$ et pour une inclinaison de 90° des parois.	98
3.19	Description des mesures réalisées pour vérifier la loi d'Hoffman.	99
3.20	Evolution de l'angle d'avancée en fonction du nombre capillaire, pour différentes propriétés de mouillage. (légende : $CA\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)	99
3.21	Position initiale des ponts sous écoulement latéral de type poiseuille.	100
3.22	Vitesses adimensionnées par la vitesse de sortie et différence de pression int/ext au cours du temps adimensionné par le temps de sortie, pont liquide soufflé entre plans verticaux.	101

3.23	Evolution de la trajectoire d'un pont liquide entre 2 plaques verticales soumis à un écoulement latéral d'air, en fonction de la mouillabilité.	102
3.24	Equilibre des forces appliquées à un pont sous écoulement latéral, vue de profil.	103
3.25	Description de la mesure angulaire de l'angle de contact pour les ponts avec écoulement.	104
3.26	Section transverse dans le plan entre les ailettes (mi-distance entre deux ailettes) et évolution de l'angle de contact apparent en fonction de la position angulaire, pour les ponts en écoulement, mesures relevées sur leur forme stationnaire ou avant rupture selon les cas.	106
3.27	Evolution de l'angle de chute verticale en fonction du nombre capillaire pour les ponts liquides soumis à un écoulement latéral d'air : comparaison entre prédiction et calcul.	107
3.28	Description de la géométrie des picots superhydrophobes, issue de Barbieri [LBH07].	109
3.29	Description de la configuration étudiée pour les cas de superhydrophobie.	109
3.30	Vue au microscope électronique à balayage de la surface de picots expérimentaux.	110
3.31	Evolution de l'angle de contact apparent à l'équilibre, résultant de la présence de picots sur une surface, pour les fluides huile et eau.	111
3.32	Vue 3D d'une goutte d'huile sur un matériau superhydrophobe à angle de contact de 65° à plat avec un pitch de $30\mu m$ (isosurface de l'interface air-huile en bleu).	112
3.33	Vue 2D d'une goutte d'huile sur un matériau superhydrophobe à $\theta_s = 65^\circ$ à plat avec un pitch de $30\mu m$ (coupe pour le diamètre maximal), champ de pression et isocontour en noir de la fonction $VOF = 0.5$	113
3.34	Vue 2D d'une goutte d'huile sur un matériau superhydrophobe à $\theta_s = 65^\circ$ à plat avec un pitch de $40\mu m$ (coupe pour le diamètre maximal), champ de pression et isocontour en noir de la fonction $VOF = 0.5$	114
3.35	Vue 2D d'une goutte d'huile sur un matériau superhydrophobe à $\theta_s = 65^\circ$ à plat avec un pitch de $60\mu m$ (coupe pour le diamètre maximal), champ de pression et isocontour en noir de la fonction $VOF = 0.5$	115
3.36	Vue 2D d'une goutte d'huile sur un matériau superhydrophobe à angle de contact de 65° à plat avec un pitch de $100\mu m$ (coupe pour le diamètre maximal), lignes de courant en noir, isocontour en blanc de la fonction $VOF = 0.5$ et champ de pression.	117
3.37	Vue dessus d'une goutte d'huile sur un matériau superhydrophobe à angle de contact de 65° à plat avec un pitch de $30\mu m$ (coupe à la hauteur de $10\mu m$), isocontour en noir de la fonction $VOF = 0.5$ et champ de pression (points noirs : picots vus de haut).	118
3.38	Vue dessus d'une goutte d'huile sur un matériau superhydrophobe à angle de contact de 65° à plat avec un pitch de $100\mu m$ (coupe à la hauteur de $10\mu m$), isocontour en noir de la fonction $VOF = 0.5$ et champ de pression (points noirs : picots vus de haut).	119

3.39	Motif de la géométrie étudiée apparaissant à cause du maillage, pitch $30\mu m$, pour les cas de superhydrophobie.	120
3.40	Type d'étude à mener pour réaliser une modélisation de l'effet d'une surface texturée sur l'angle de contact, afin de ne pas à décrire cette surface explicitement lors d'autres simulations.	122
4.1	Diagrammes enthalpie-température.	129
4.2	Évolution de la température au cours du temps.	129
4.3	Variation de l'énergie libre G en fonction de la température, pour un corps pur solide ou liquide.	130
4.4	Variation de l'écart d'énergie libre en fonction du rayon du germe.	131
4.5	Germination hétérogène sphérique.	131
4.6	Lois de Fick et de Fourier selon Le Gall <i>et al.</i> [GGJ97]	132
4.7	Comparaison des modèles de tortuosité par Na et Webb [NW04b]	135
4.8	Domaine d'étude valide pour les équations de Lenic <i>et al.</i> [LTF08]	136
6.1	Variation de la hauteur d'eau liquide dans le cas de fusion d'un bloc de glace 1D, méthode New Source avec correction.	157
6.2	Variation de la hauteur d'eau liquide avec la méthode viscosité en moyennes discontinues, en fonction du seuil choisi.	158
6.3	Erreur absolue instantanée, avec la méthode viscosité en moyennes discontinues, en fonction du seuil choisi.	159
6.4	Variation de la hauteur de glace.	160
6.5	Définition de la géométrie étudiée pour le cas de fusion, via l'approche de Stefan.	161
6.6	Position du front de fusion, au cours du temps, pour les modèles présentés (New Source et VOF-PC), vis-à-vis de la solution analytique.	162
6.7	Position du front de fusion, au cours du temps, pour différents maillages (méthode VOF-PC), vis-à-vis de la solution analytique.	163
6.8	Domaine initial d'étude du changement de phase d'une couche de glace sur une plaque chaude en présence d'un écoulement latéral de vapeur chaude.	165
6.9	Domaine initial d'étude du changement de phase d'un bloc de glace sur une plaque chaude en présence d'un écoulement latéral de vapeur chaude.	165
A.1	Configuration initiale pour l'étude des relations existantes, $Bo = 10^{-1}$	172
A.2	Configuration initiale pour l'étude des relations existantes, $Bo = 10^{-4}$	172
A.3	<i>ImageJ</i> - mesure automatique de l'angle de contact (en rouge), $Bo = 10^{-1}$, $C_\infty = 0,7$	174
A.4	Angle mesuré en fonction de l'angle statique imposé, $Bo = 10^{-1}$	175
A.5	Courbes des relations disponibles et points mesurés avec C_∞ imposé, $Bo = 10^{-1}$	176
A.6	Angle mesuré et courbe équation (A.5), $Bo = 10^{-1}$	177
A.7	Comparaison lois gaussienne et polynomiale par morceaux, $Bo = 10^{-1}$	177

Liste des tableaux

1	Comparaison qualitative pour deux températures d'air.	5
1.1	Exemples de valeurs de tension de surface entre différents fluides - tirées de [Hen].	13
2.1	Coefficients des schémas de discrétisation temporelle et ordre correspondant. . .	46
2.2	Résumé des cas étudiés pour les gouttes à l'équilibre et principaux résultats. . .	62
3.1	Résultats numériques des cas étudiés pour les gouttes sur des plans en inclinaison fixe pour un volume de $1\mu L$	76
3.2	Résultats numériques des cas étudiés pour les gouttes sur des plans en inclinaison fixe pour un volume de $25\mu L$	77
3.3	Données numériques des cas étudiés pour les ponts entre des plaques horizontales.	86
3.4	Détails pour les cas étudiés pour les ponts sous écoulement latéral d'air, entre deux plaques verticales.	96
3.5	Calculs de la norme de la résultante des forces capillaires pour les ponts sous écoulement latéral d'air, entre deux plaques verticales.	105
5.1	Compatibilité entre méthodes de suivi d'interface et modèles/méthodes numériques	145
5.2	Compatibilité entre méthodes de suivi d'interface - méthodes numériques et modèles de changement d'état	145
6.1	Erreurs relatives intégrées sur le temps pour les différents seuils testés.	159
6.2	Grandeurs physiques des espèces rencontrées (pour la vapeur, à $T=5^{\circ}C$.)	160
6.3	Ordres de convergence locaux, en fonction du maillage, pour le cas de fusion Stefan 1D avec la méthode VOF-PC.	164
A.1	Comparaison des relations tanh, cubique, bi-linéaire et polynomiale par morceaux pour $Bo = 10^{-1}$	174
A.2	Comparaison des relations gaussienne et polynomiale par morceaux, pour $Bo = 10^{-4}$	176

Notations

Caractères romains

L	longueur caractéristique	m
R	rayon d'une goutte	m
S	terme source	m
T	température	$^{\circ}C$
dS	élément de surface	m^2
dl	élément de longueur	m
\mathbf{g}	gravité	$m.s^{-2}$
h	coefficient d'échange thermique	$W.m^{-2}.^{\circ}C^{-1}$
i, j, k	indices de discrétisation	
l, m, n	nombre de noeuds du maillage dans chaque direction d'espace	
p	pression	Pa
t	temps	s
\mathbf{u}	vitesse	$m.s^{-1}$
x, y, z	coordonnées de \mathfrak{R}^3	m
$B_S, B_V, B_{V,i}$	coefficients de pénalisation de l'écoulement	
F_{TS}	force de tension superficielle	N
R_0	rayon de référence	m
T_0, T_{∞}	températures de référence	$^{\circ}C$
V_1, V_2	volumes des fluide 1 et 2	m^3
\mathbf{n}_i	normale à l'interface	
\mathbf{n}_k	normale à l'interface orientée vers la phase k	
p_1, p_2, p_k	pressions dans les phases 1 et 2	Pa
\mathbf{u}_0	vitesse de référence	$m.s^{-1}$
$\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_k$	vitesse dans les phases 1 et 2	$m.s^{-1}$
$\mathbf{u}_{\infty}, \mathbf{u}_{\infty,i}$	vitesse de référence	$m.s^{-1}$
u_x, u_y, u_z	composantes du vecteur vitesse \mathbf{u}	$m.s^{-1}$

Caractères grecs

Φ	densité de flux thermique	$W.m^{-2}$
Ω	domaine d'étude	
θ	angle de contact	$^{\circ}$
κ	courbure moyenne de l'interface	m^{-1}
μ	viscosité dynamique	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
ρ	masse volumique	$kg.m^{-3}$
σ	coefficient de tension superficielle	$N.m^{-1}$
Γ_a	contour d'un domaine	
δ_i	fonction de Dirac indicatrice de l'interface	
ϕ_1, ϕ_2, ϕ_k	fonctions indicatrices des phases 1 et 2	
κ_1, κ_2	courbures principales de l'interface	m^{-1}
μ_1, μ_2, μ_k	viscosités dynamiques des phases 1 et 2	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
ρ_1, ρ_2, ρ_k	masses volumiques des phases 1 et 2	$kg.m^{-3}$
σ_0	tension de surface de référence	$N.m^{-1}$

Nombres adimensionnels

Bo	nombre de Bond	$\frac{\rho g R^2}{\sigma}$
Oh	nombre d'Ohnesorge	$\frac{\mu}{\sqrt{\rho \sigma L}}$
Re	nombre de Reynolds	$\frac{\rho L u_0}{\mu}$
We	nombre de Weber	$\frac{\rho L u_0^2}{\sigma}$
Ca	nombre capillaire	$\frac{u_0 \mu}{\sigma}$

Introduction générale

Contexte de la thèse

Le contexte actuel d'économie d'énergie, dans une démarche de développement durable, à des fins à la fois économiques et écologiques, démontre que de nombreux efforts restent à entreprendre afin de préserver au mieux les ressources actuelles. Le consortium ECLEER (European Centre and Laboratories for Energy Efficiency Research¹), fondé par EDF R&D (Électricité de France, Recherche et Développement), l'École des Mines de Paris (ParisTech) et l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) en 2007, se veut être une réponse à de nombreuses questions portant sur le thème de l'efficacité énergétique tant pour les bâtiments que pour les procédés industriels. L'objectif fixé en 1999 par le gouvernement français de réduire par 4 les émissions de CO_2 d'ici à 2050 (ainsi que de rendre indépendants les pays vis-à-vis des énergies fossiles) est un des enjeux majeurs qui a contribué à la mise en place d'ECLEER.

La faculté de ce consortium à développer des innovations à la fois dans le domaine socio-culturel (de nombreuses études comportementales sur des échantillons de population sont réalisées afin de déceler des habitudes et de comprendre les besoins de ces populations sur les énergies, leur consommation ou la manière de les consommer) que dans le domaine technologique de ce partenariat, a depuis été démontrée à maintes reprises, notamment via de nombreuses publications ou brevets. Les principaux axes de recherche portent sur l'efficacité énergétique dans l'industrie et dans les bâtiments avec une attention particulière pour les pompes à chaleur, ainsi que sur les technologies solaires pour le bâtiment ou encore sur la demande en énergie et les dynamiques de consommation.



Ce mémoire s'inscrit dans cette problématique, via un travail réalisé avec de EDF R&D département EnerBAT (Energie dans les Bâtiments et les Territoires) et co-financé par EDF et l'Association Nationale de la Recherche et de la Technologie (ANRT) via une bourse CIFRE. Pour mener ces travaux, une collaboration a été mise en place entre EDF R&D et le département TREFLE de l'Institut d'Ingénierie et de Mécanique - Bordeaux (I2M), ainsi que l'École

1. site internet du consortium : <http://www.ecler.com>

Polytechnique Fédérale de Lausanne qui a réalisé une partie des travaux expérimentaux. Le groupe de recherche du professeur Patrik Hoffmann a été sollicité pour ses compétences en caractérisation des propriétés de surface des matériaux.

Avant-propos

Le développement des pompes à chaleur, souvent siglées par leur acronyme "PAC", représente un enjeu important, à la fois énergétique, économique et environnemental, pour le chauffage des habitations individuelles ou des habitations collectives. En effet, le principe de fonctionnement des PAC se définit par prélever de l'énergie "gratuite" au niveau d'une source froide (à basse température), pouvant être constituée par l'air extérieur, pour la délivrer à un puits chaud (à plus haute température) représenté par l'intérieur du logement à chauffer.

La consommation énergétique du système réside alors dans le transfert d'énergie entre les deux niveaux de température, au détriment du plus froid. Une partie de l'énergie fournie au secteur chaud n'est donc pas créée, mais uniquement transformée. Cette partie d'énergie gratuite est bien souvent très majoritaire.

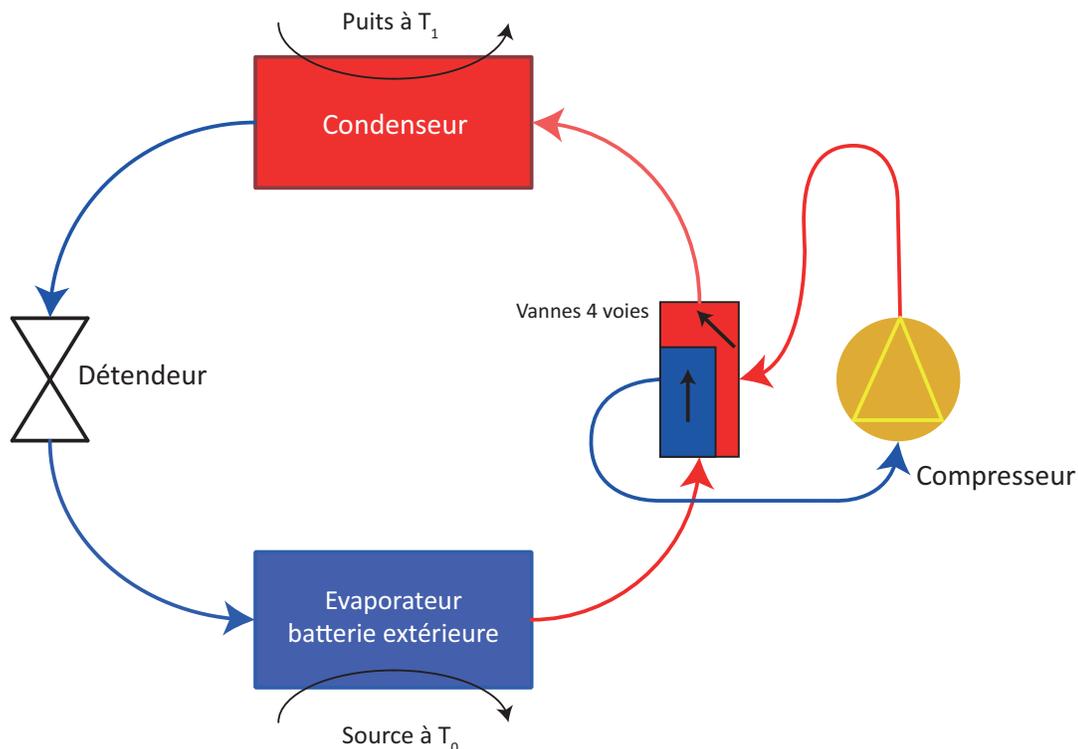


FIGURE 1 – Schéma de fonctionnement normal d'une PAC air/air.

Dans le cadre de notre étude, la PAC décrite fonctionne par compression de la vapeur d'un fluide caloporteur (frigorigène). Le compresseur consomme de l'énergie électrique qu'il

transforme d'une part en comprimant la vapeur surchauffée du fluide frigorigène, pour transférer l'énergie de la source froide vers le puits chaud. Le rapport de l'énergie thermique fournie sur l'énergie électrique consommée est dénommé coefficient de performance calorifique (COP).

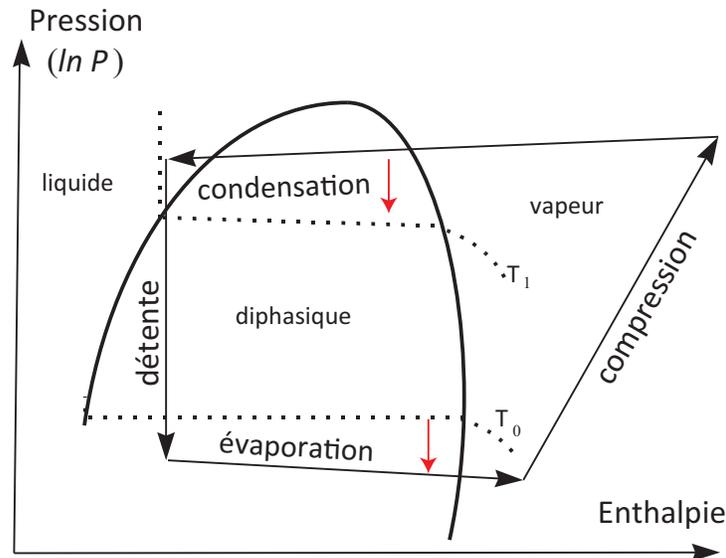


FIGURE 2 – Cycle thermodynamique de fonctionnement normal d'une PAC air/air.

Sa valeur dépend des températures de la source froide et du puits chaud, elle est en général supérieure à quatre au point normatif à 7°C extérieur pour les PAC destinées au secteur résidentiel. Ainsi, de telles performances énergétiques peuvent avoir des conséquences multiples :

- environnementales : bénéfiques pour l'environnement via la limitation de la production des gaz à effets de serre et de la surconsommation actuelle des énergies fossiles. Plus de deux tiers des énergies utiles sont renouvelables sur notre planète.
- économiques : grâce à la diminution de la consommation d'énergie électrique par un facteur de l'ordre de 3 pour le client final.

L'enjeu économique est important, autant pour le producteur de tels systèmes que pour le client. En effet, à une époque où le réchauffement climatique est source de nombreuses interrogations (tant dans le monde scientifique qu'économique ou politique), le concept même d'une énergie non polluante et renouvelable est séduisant. De plus, selon le type d'émetteur de chaleur, certains systèmes sont réversibles, et permettent pour le même investissement, le rafraîchissement des locaux en été et leur chauffage en hiver.

Motivations

Enjeux industriels

Nous voyons que le principal enjeu du point de vue industriel est de rendre le plus efficace possible ces systèmes basés sur des échangeurs sur l'air extérieur. Avant de développer plus avant les critères sur lesquels jouer afin d'optimiser notre système, il convient de définir les principales difficultés.

Bien sûr, la température de l'air présente une influence plus marquée sur des systèmes aérothermiques avec un COP et une puissance de chauffage disponible se dégradant lorsque la température extérieure baisse. De plus, dans ces conditions hivernales, la diminution de la température des surfaces d'échange extérieures (typiquement, un échangeur extérieur est constitué de batteries d'ailettes parallèles, constituées d'alliages d'aluminium particuliers, cf. figure 3) accroît un phénomène bien connu des avionneurs : le givrage.

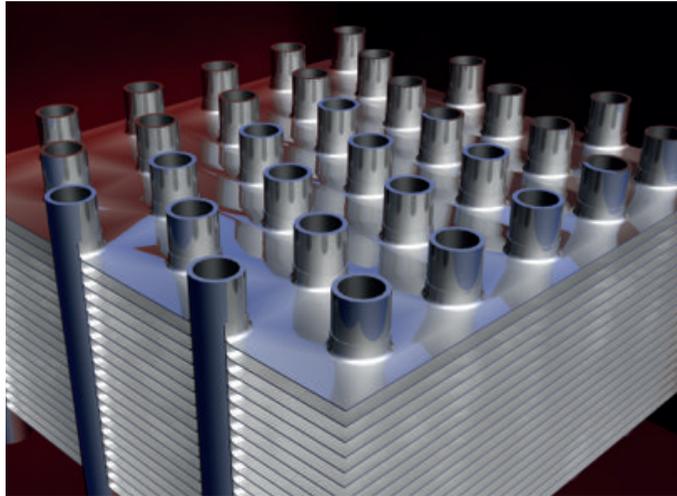


FIGURE 3 – Modélisation d'une batterie d'ailettes constituant un échangeur de chaleur extérieur, pour une PAC aérothermique.

Ce dernier va avoir tendance à pénaliser les performances des PAC en amplifiant les pertes énergétiques, la croissance du givre sur les ailettes, initialement bénéfique pour le transfert de chaleur, finit par colmater les échangeurs jusqu'à boucher le flux d'air et faire chuter l'échange thermique, au point où il devient indispensable de dégivrer l'échangeur. Ces opérations successives de dégivrage sont consommatrices d'énergie et viennent dégrader les performances de la machine.

De plus, les dégivrages par inversion de cycles contribuent à l'usure du compresseur, la réduction de la fréquence des dégivrages augmenterait la durée de vie des machines. Enfin, réduire voire éliminer les phénomènes de colmatage des batteries par le givre permettrait de

Température de l'air	$-7^{\circ}C$	$2^{\circ}C$
ΔT entre ailette et air	petit	grand
Humidité relative	faible	élevée
	(saturation de l'air rare)	(saturation fréquente)
Humidité absolue	faible	parfois élevée

TABLE 1 – Comparaison qualitative pour deux températures d'air.

rendre les échangeurs plus compacts en réduisant le pas d'ailettes. Le tableau (1) résume les conditions rencontrées.

Ces données montrent donc que l'humidité et sa déposition initiale avant givrage, ou au contraire son élimination après dégivrage ont des répercussions importantes sur le fonctionnement de la PAC.

Objectifs

Il convient dès lors de mettre en place des parades pour assurer un COP optimal à notre pompe à chaleur. Afin de répondre à cette attente, nous devons améliorer la période de pré-givrage, en allongeant cette durée le plus possible avant colmatage. Au contraire, nous devons aussi assurer une période de dégivrage la plus courte possible, en éliminant le plus efficacement l'eau liquide formée.

Pour cela, nous devons sélectionner un matériau propre à répondre à ces attentes, via une propriété de surface spécifique et optimale. Ainsi, nous mènerons une étude physique (via l'outil numérique) du comportement de liquides déposés sur des surfaces particulières, en nous intéressant à leur dynamique. Nous montrerons que l'utilisation de matériaux soit hydrophiles soit hydrophobes peuvent avoir des conséquences différentes selon les attentes.

Afin de mener à bien notre étude, la mise en place d'un modèle de mouillage dans un code de calcul numérique sera le point principal, modèle à éprouver vis-à-vis d'études expérimentales. Nous utiliserons ce modèle sur des configurations simples et complexes, notamment les matériaux superhydrophobes.

Enfin, nous attacherons de l'importance à mettre en place une méthode numérique efficace pour simuler le changement de phase, et notamment le givrage/dégivrage. Cette méthode devra répondre à des problématiques complexes, comme la possibilité de mettre en mouvement la glace formée, être peu couteuse en temps de calcul ou encore assurer un bon comportement en givrage comme en dégivrage.

Première partie

Aspects hydrodynamiques de la
mouillabilité

Chapitre 1

Physique des écoulements diphasiques sur paroi.

1.1 La physique des écoulements diphasiques incompressibles de fluides non miscibles

Dans cette partie, l'intérêt sera focalisé sur la compréhension des phénomènes mis en jeu lors du déplacement d'une goutte de liquide sur une surface. Les caractéristiques des constituants en présence (fluide de la goutte, fluide ambiant et substrat) ainsi que les conditions mécaniques influencent à la fois l'écoulement de la goutte et son comportement à l'équilibre. Cette dynamique est la résultante des énergies développées dans cette configuration d'étude. Afin de mieux comprendre les mécanismes nécessaires à ce cas précis, nous détaillerons les grands modèles existants et permettant d'approcher avec justesse les énergies associées. De plus, les grandeurs caractéristiques seront aussi définies et décrites.

1.1.1 Grandeurs du système et caractéristiques importantes des fluides

Les paramètres du système, comme les conditions initiales ou encore les caractéristiques des matériaux, influencent l'écoulement. Cet écoulement est la traduction des compétitions entre les énergies (aux différentes échelles, micro/méso/macrosopiques) internes au système étudié.

La tension superficielle

Lors de la chute d'une goutte de pluie (figure 1.1), la forme prise par cette dernière est la résultante de la compétition entre les forces de cohésion des molécules constitutives de la goutte (molécules d'eau) et la résistance de l'air. Cette dernière dépend de la vitesse de chute de la goutte. Prédire la forme de la goutte consiste donc à déterminer la vitesse de chute et la force de friction dans l'air. La force de cohésion des molécules d'eau peut être représentée à l'échelle qui nous intéressera pour toute la suite de l'étude et du manuscrit, l'échelle macroscopique, par une grandeur appelée tension de surface.



FIGURE 1.1 – Goutte d’eau après impact sur une surface d’eau libre

La surface séparant deux fluides, nommée interface, est caractérisable par sa position et par les forces agissant sur celle-ci (figure 1.2). Les contraintes extérieures sont la source de ces forces, elles sont imposées sur les fluides et leur écoulement en agissant sur une interface. Un paramètre, noté σ et appelé tension superficielle ou tension de surface, est caractéristique des fluides en présence et leur est associé. σ peut être caractérisé par l’étude de Guyon, Hulin et Petit [GHP91], portant sur des lames liquides. La figure (1.3) est une représentation de cette étude : soit un rectangle de côté AB , mobile, supportant un film liquide. Ce film pouvant être tiré par le mouvement du côté AB , si on relâche ce segment mobile, le film aura tendance à se remettre dans une position d’équilibre minimisant la surface (en réalité, minimisant l’énergie superficielle). La force nécessaire pour écarter le film de cette position d’équilibre est donc proportionnelle à la largeur du cadre, si on veut créer une différence de surface $dS = Ldl$, il faut exercer la force F telle que décrite dans l’équation 1.1 :

$$F = 2\sigma L \quad (1.1)$$

où le facteur 2 rappelle qu’il y a deux interfaces à minimiser (les deux forces du film supposé mince par rapport à L et AB).

Cette force est exprimée en $N.m^{-1}$. elle symbolise l’action de la pression (de la différence de pression) de part et d’autre de l’interface entre les deux fluides, cette différence de pression pouvant être calculée à partir de la loi de Laplace ([LL94]), loi reliant les courbures principales et la pression (1.2) :

$$\Delta p = \sigma(\kappa_1 + \kappa_2) \quad (1.2)$$

où κ_1 et κ_2 sont les courbures principales de l’interface.

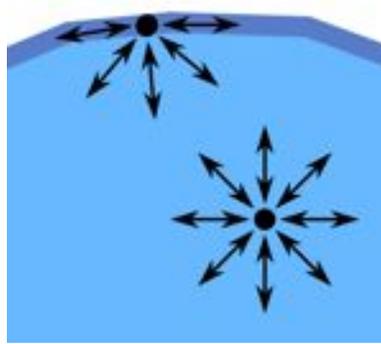


FIGURE 1.2 – Forces interfaciales et forces dans le fluide

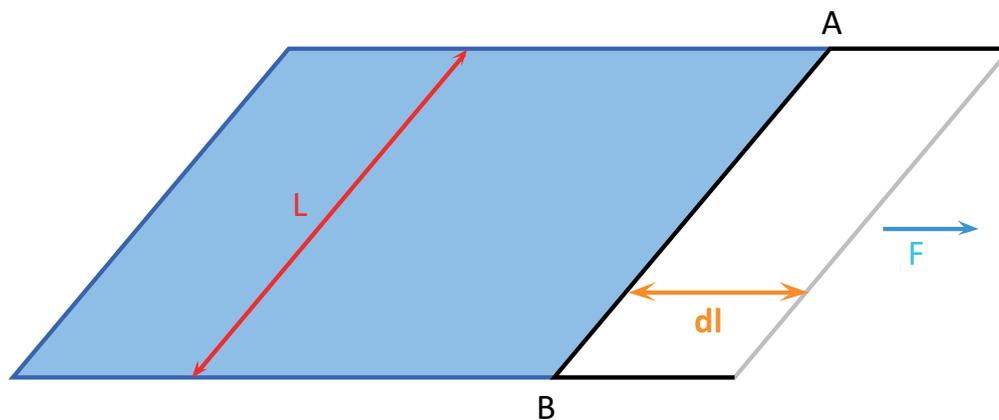


FIGURE 1.3 – Film de liquide tiré par un cadre mobile.

Cette loi montre que la pression augmente lorsque nous traversons l'interface du côté convexe vers le côté concave. Nous pouvons noter aussi que pour une interface plane, la courbure étant nulle, la différence de pression l'est aussi. Elle peut en particulier être appliquée au cas des gouttes, si nous considérons une gouttelette sphérique de rayon R , toute l'interface est sous tension. La goutte pouvant être considérée comme en équilibre sur elle-même, la pression p_1 qui règne à l'intérieur de la gouttelette est supérieure à la pression atmosphérique p_0 comme le fluide la constituant qui est incompressible. Si nous voulions calculer la force de tension de cette géométrie, nous pourrions calculer la surface apparue en augmentant le rayon de la goutte de dR . Celle-ci serait plus grande d'une valeur $8\pi R dR$, l'énergie superficielle serait alors augmentée, augmentation correspondant à un travail de la force de tension que nous pouvons déduire :

$$f = 8\pi R\sigma \quad (1.3)$$

la valeur de la force interfaciale. Cette force agissant sur toute la surface $4\pi R^2$ de la goutte, nous obtenons la loi de Laplace valable pour une sphère (1.4) :

$$\Delta p = \frac{2\sigma}{R} \quad (1.4)$$

Le tableau 1.1 rassemble une série de valeurs de la tension de surface pour différents composés, à différentes températures. Nous pouvons y voir des variations parfois sensibles de cette propriété en fonction de la température, car elle est finalement une des grandeurs résultantes de l'agitation thermique moléculaire.

Les propriétés de mouillage

La tension de surface joue un rôle prédominant dans les phénomènes multiphasiques, caractérisant le contact entre deux fluides. Dans notre travail, les fluides en présence sont en contact avec les ailettes de l'échangeur et avec une phase solide (ailette) éventuellement évolutive (recouverte de glace ou de givre, dont la position du front est différente à tout instant), il y a un contact solide/liquide qui intervient, contact que nous pouvons caractériser par une combinaison des tensions de surfaces entre le solide, les liquides et la phase gazeuse (si existante). Cette combinaison est exprimée dans l'équation (1.5), appelée équation de Marangoni, permettant de caractériser l'étalement S en fonction des tensions de surface des fluides et solides en présence :

$$S = \sigma_{SV} - \sigma_{SL} - \sigma_{LV} \quad (1.5)$$

où les indices L , S et V renvoient aux phases liquide, solide et gazeuse.

- Si S est positif, le solide a abaissé son énergie en étant mouillé : on parle de mouillage **total** ;
- dans le cas opposé, S négatif, le mouillage est dit **partiel**.

Après avoir caractérisé le mouillage, il est intéressant de dégager un paramètre macroscopique permettant de définir la mouillabilité. Revenons au cas d'une gouttelette posée sur une surface partiellement mouillante. L'idée est de regarder ce qu'il se passe au niveau de la ligne de contact entre la gouttelette et le solide. Cette ligne est un point de raccord entre trois interfaces, solide, liquide et vapeur, où coexistent trois tensions tendant à minimiser la surface de l'interface correspondante (figure 1.4).

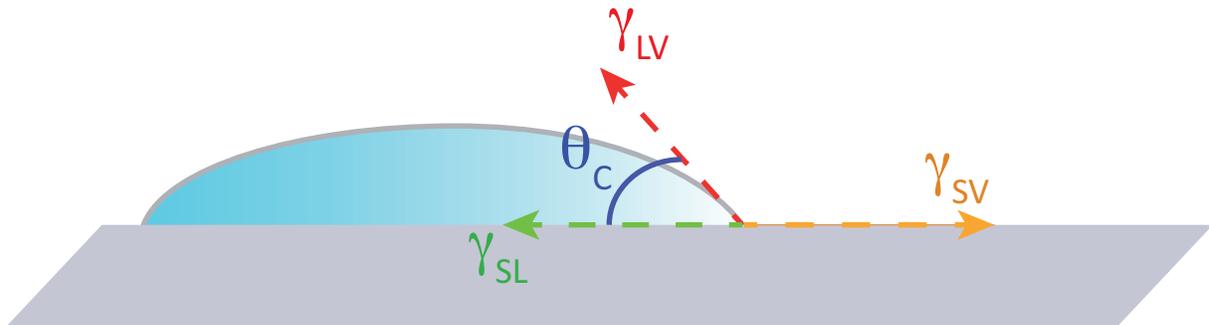


FIGURE 1.4 – Ligne de contact pour une goutte posée sur un solide : forces de tension en présence

Liquide	Température (°C)	Tension de surface σ ($mN \cdot m^{-1}$)
Acide acétique	20	27,6
Acide acétique (40,1%) + Eau	30	40,68
Acide acétique (10,0%) + Eau	30	54,56
Acétone	20	23,7
Diéthyl éther	20	17
Éthanol	20	22,27
Éthanol (40%) + Eau	25	29,63
Éthanol (11,1%) + Eau	25	46,03
Glycérol	20	63
Isopropanol	20	21,7
Mercure	15	487
Mercure	20	436
Méthanol	20	22,6
Octane	20	21,8
Eau	0	75,64
Eau	20	73
Eau	25	71,97
Eau	37	70
Eau	50	67,91

TABLE 1.1 – Exemples de valeurs de tension de surface entre différents fluides - tirées de [Hen].

Un déplacement infinitésimal de la ligne de contact ne provoque pas de variation de l'énergie surfacique. Si nous notons L la longueur latérale de la ligne de contact, cette variation d'énergie provoquée par ce déplacement dx peut s'écrire par (1.6) :

$$dE = (\sigma_{SL} - \sigma_{SV})Ldx + \sigma_{LV}Ldx\cos\theta_c \quad (1.6)$$

Comme la variation dE est nulle pour le déplacement dx , nous obtenons l'équation d'Young (1805, équation 1.7) :

$$\cos\theta_c = \frac{\sigma_{SV} - \sigma_{SL}}{\sigma_{LV}} \quad (1.7)$$

qui peut être exprimée en fonction du paramètre d'étalement S ,

$$\cos\theta_c = 1 + \frac{S}{\sigma}$$

où dans cette expression σ correspond à la tension de surface liquide/vapeur. Nous garderons cette notation par la suite.

Dans ces expressions, nous pouvons faire intervenir un angle θ_c , appelé angle de contact, correspondant à l'angle entre la gouttelette et le solide, mesuré entre le liquide et le solide (comme défini dans la figure 1.4). Il est nul dans le cas d'une paroi totalement mouillante (hydrophile dans le cas de l'eau) et il vaut 180° dans le cas d'une paroi totalement non-mouillante (ou hydrophobe dans le cas de l'eau). Pour des angles de contact intermédiaires, nous parlerons de mouillage partiel. Ces différents cas sont illustrés sur le schéma de la figure (1.5).

Il faut souligner tout de même que la présence de composés chimiquement actifs peut déstabiliser la tension de surface, comme les surfactants et les impuretés. Localement, la tension de surface peut varier fortement de part la présence de ces surfactants, comme elle peut aussi varier par la présence d'un gradient de température. Ces variations peuvent être modélisées et intégrées dans les applications qui le nécessitent. De ces variations peuvent donc découler des changements sur les propriétés de mouillage des parois qu'il faudra aussi prendre en compte.

La rugosité

Une surface n'est jamais parfaitement lisse dans la nature. Des pics et des creux existent à une échelle microscopique (voire plus petite que le micromètre) et ce sont eux qui forment ce que nous nommons la rugosité de surface. Cet état de surface du substrat correspond à la hauteur moyenne de ces pics et creux et est caractérisée par le nombre Ra qui sera détaillé plus loin. A titre d'exemple, pour $Ra = 0$, nous serons en présence d'une surface lisse et sinon, nous aurons affaire à une surface rugueuse. Il est accepté de façon universelle qu'une surface sera considérée lisse pour de l'impact de goutte pour un nombre Ra inférieur à la dizaine de nanomètres.

La rugosité est souvent responsable à forte échelle d'un phénomène (décrit dans la sous-section suivante) qui est clairement perturbateur lors de la mise en équilibre d'une goutte

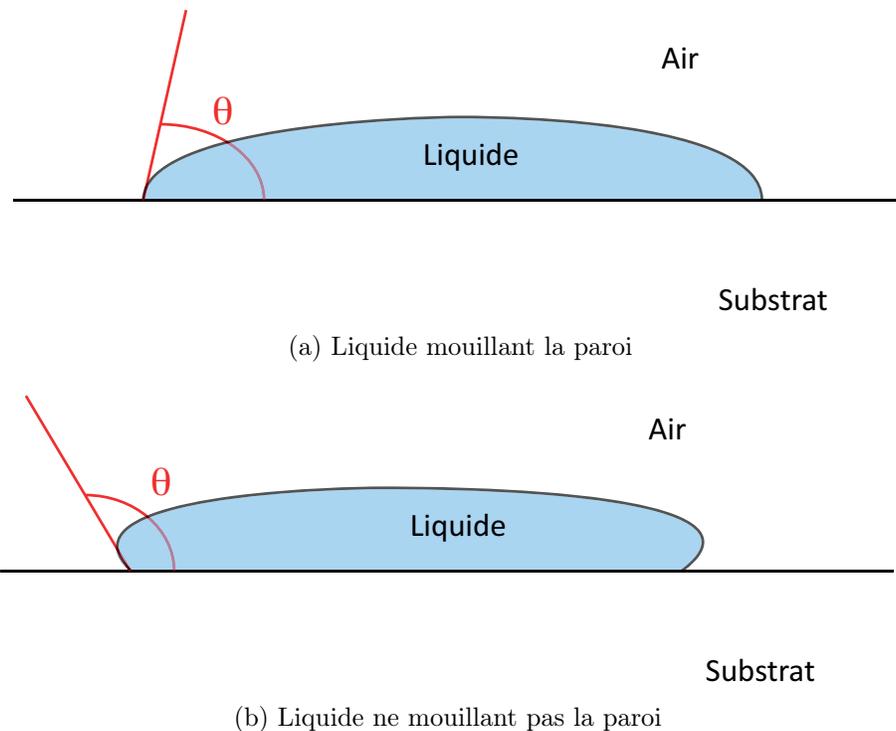


FIGURE 1.5 – Mouillabilité différente entre deux liquides pour un matériau identique de substrat.

en déposition (voire en impact pour de fortes vitesses) : la superhydrophobie. De plus, il se peut que localement, la hauteur des pics et des creux soit nettement plus importante que la hauteur moyenne : les effets rencontrés lors de la déposition d'une goutte seront donc nettement différents que le comportement moyen auquel nous pouvons nous attendre. Le paramètre de rugosité ne doit donc pas faire oublier les effets provoqués par un substrat non parfaitement homogène. Numériquement, les surfaces peuvent atteindre la perfection $Ra = 0$, rugosité nulle. Nous serons majoritairement dans cette configuration sauf précision contraire.

1.1.2 Déplacement d'une goutte et phénomènes de dé mouillage.

Une des grandes inconnues de la physique du mouillage est le déplacement d'une goutte sur une surface, où la ligne de contact avance (ou recule) sur un solide. L'apparition d'un angle dit dynamique peut survenir dans le cas où nous forçons une goutte à avancer sur un matériau qui lui est totalement mouillant, angle fonction de la vitesse de la ligne de contact. L'expérience de Hoffman [Hof75] montre que la relation entre l'angle de contact dynamique et la vitesse est finalement assez simple à poser. La figure (1.6) montre ses résultats, permettant de constater que l'angle de contact augmente avec le nombre capillaire à la puissance $1/3$.

De Gennes [dG85] a permis d'expliquer et de comprendre pourquoi cette loi est réaliste. Si nous nous plaçons au niveau de la ligne de contact, nous pouvons écrire la force capillaire

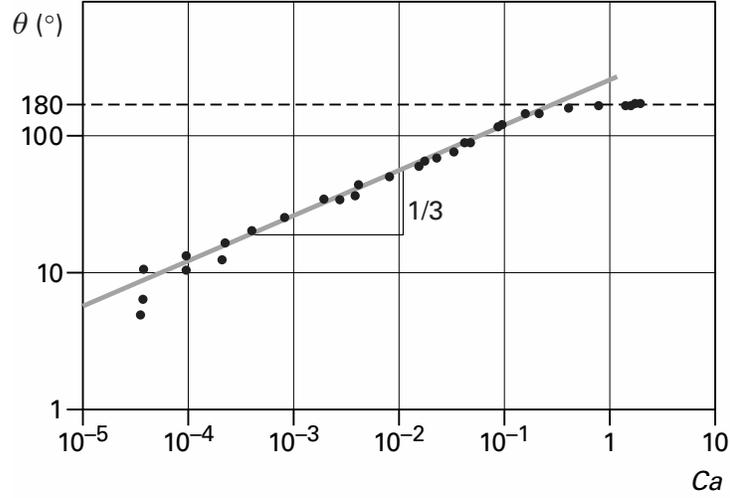


FIGURE 1.6 – Angle de contact dynamique pour un solide s’enfonçant dans un bain de liquide en mouillage total, en fonction du nombre capillaire tel que défini dans (1.1.5) (tirée de Quéré [Qué03])

agissant sur celle-ci :

$$F(\theta) = 1/2\sigma\theta^2 \quad (1.8)$$

Cette force est valable pour les petits angles et est obtenue via la relation d’Young (1.7). F est contrebalancée par une force visqueuse au voisinage de la ligne de contact, provenant de la présence de gradients de vitesse importants. Cette force visqueuse peut s’écrire comme :

$$F = \int_{coin} \frac{\eta V}{\theta x} dx \quad (1.9)$$

avec η la viscosité du fluide considéré.

Cette équation (1.9) a été source de nombreuses discussions dans la communauté scientifique. Pour traiter cette intégrale, la méthode des coupures naturelles est intéressante : soit a la taille moléculaire d’un côté et L_c une taille macroscopique de l’autre. Nous pouvons obtenir ainsi :

$$F = \frac{\eta V \ln(L_c/a)}{\theta} \quad (1.10)$$

avec L_c la longueur capillaire telle que définie par le nombre de Bond, en (1.1.5). Le logarithme de l’expression (1.10) vaut environ 15 en pratique ([Qué03]).

L’équilibre des forces conduit donc à :

$$\theta^3 = \frac{\eta V}{\sigma} \quad (1.11)$$

Nous retrouvons bien la loi d’Hoffman [Hof75], obtenue empiriquement. Cette loi vérifiant en théorie une relation pour l’angle dynamique petit est aussi valable comme la figure (1.6) le

montre, pour des angles de contact très importants. Ceci peut en théorie aussi expliquer les phénomènes de démouillage observés lors du passage d'un essui-glace sur un pare-brise par exemple. Le film résiduel laissé par l'essui-glace est d'épaisseur faible devant la longueur capillaire assortie d'une fonction de l'angle de contact.

La vitesse de démouillage est directement donnée par la loi d'Hoffman :

$$V = \frac{\sigma}{\eta} \theta_0^3 \quad (1.12)$$

avec θ_0 l'angle de contact statique. La dynamique montre une nucléation de trous d'air (zones sèches) puis leur croissance, dans le film de liquide étalé initialement.

1.1.3 Goutte sur une paroi : vers l'hystérésis d'angle de contact

Présentation du phénomène d'hystérésis d'angle de contact

Dans les cas réels, la loi d'Young (1.7) est mal vérifiée. En effet, si nous considérons une goutte de liquide sur une surface dans laquelle nous injectons plus de liquide, elle grossit en faisant un angle de contact θ_a avec la surface. Cependant, si nous la forçons à diminuer de taille (par exemple, en pompant son liquide), elle formera un angle de contact θ_r plus petit que l'angle lors de l'injection.

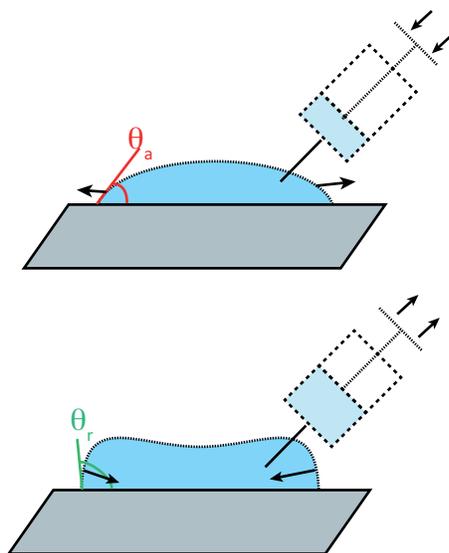


FIGURE 1.7 – Injection (haut) et pompage (bas) d'une goutte : apparition d'un angle avançant et reculant de contact.

Dans le cas général, l'angle de contact θ peut prendre différentes valeurs intermédiaires telles que :

$$\theta_r \leq \theta \leq \theta_a$$

Ainsi, une goutte déposée sur une surface inclinée ne glisse pas forcément. En effet, les angles à ses deux bords d'attaque peuvent évoluer, l'un pouvant augmenter jusqu'à θ_a , l'autre décroître

jusqu'à θ_r . La goutte commence à dévaler lorsqu'un de ces angles dépasse ces valeurs.

La présence de cette différence a également un effet sur la loi de Jurin (1.13 - 1.14). En effet, si nous insérons un capillaire dans une réserveoir contenant un liquide, ce dernier monte à une hauteur connue :

$$h_a = \frac{2\sigma \cos \theta_a}{\rho g r} \quad (1.13)$$

Mais si nous débutons par l'emplissage du capillaire de liquide que nous lâchons, il se stabilise à la hauteur :

$$h_r = \frac{2\sigma \cos \theta_r}{\rho g r} > h_a \quad (1.14)$$

Force s'exerçant au niveau de la ligne de contact

La force par unité de longueur exercée par l'interface liquide-vapeur sur le solide au niveau de la ligne de contact (ou ligne triple) est (dans la direction coplanaire à la surface) :

$$\hat{f} = -\sigma \cos \theta$$

Nous atteignons donc l'équilibre si cette force se situe dans la gamme :

$$-\sigma \cos \theta_r \leq \hat{f} \leq -\sigma \cos \theta_a$$

Nous pouvons alors définir la notion d'angle de contact moyen θ_m telle que :

$$2 \cos \theta_m = \cos \theta_a + \cos \theta_r,$$

et la force moyenne $\hat{f}_m = -\sigma \cos \theta_m$, et nous obtenons :

$$\sigma \frac{\cos \theta_a - \cos \theta_r}{2} \leq \hat{f} - \hat{f}_m \leq \sigma \frac{\cos \theta_r - \cos \theta_a}{2} \quad (1.15)$$

Ou encore, en définissant l'hystérésis $H = \cos \theta_r - \cos \theta_a$:

$$-\frac{\sigma H}{2} \leq \hat{f} - \hat{f}_m \leq \frac{\sigma H}{2}$$

Aspect énergétique de l'hystérésis d'angle de contact

Considérons une ligne de contact de longueur L se déplaçant en faisant des allers-retours dans la direction x . A l'aller, l'interface forme un angle θ_a , angle d'avancée, avec le plan, et ainsi, le travail fourni peut être calculé comme suit :

$$W_a = \Delta x (-\sigma \cos \theta_a) L$$

Au retour, l'angle devient θ_r , angle de recul, et un travail est fourni :

$$W_r = \Delta x (-\sigma \cos \theta_r) L$$

Au total, nous produisons sur un aller-retour un travail :

$$W_{ar} = L \Delta x \sigma H = A \sigma H$$

où A est l'aire balayée lors de l'aller-retour. L'hystérésis H caractérise ainsi la dissipation d'énergie lors d'un cycle.

Un premier essai d'interprétation

L'origine de cette hystérésis se trouve dans les hétérogénéités et la rugosité de la surface de contact.

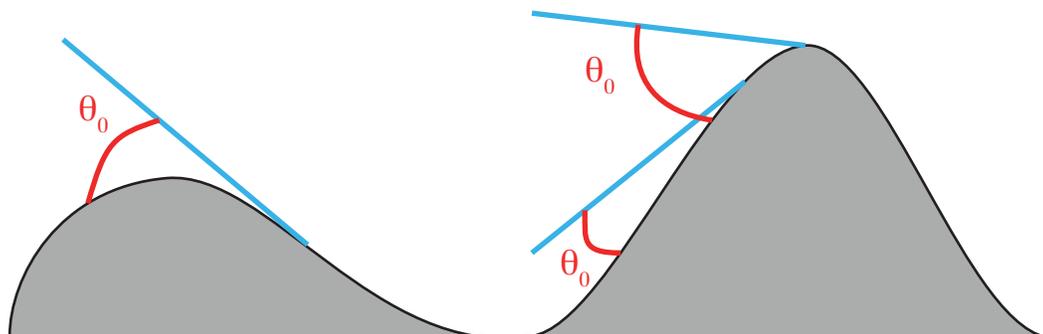


FIGURE 1.8 – Évolution de l'angle de contact sur une surface rugueuse (schéma)

Nous pouvons considérer que l'angle de contact ne varie pas, alors que la surface réelle est rugueuse. L'angle de contact apparent varie selon la position où nous nous trouvons sur la surface. Cependant, ce modèle n'est pas satisfaisant. En effet, ce phénomène est réversible, il n'induit donc pas de dissipation d'énergie durant le cycle. De plus, aucun hystérésis n'est produit, puisque :

$$\langle \theta_a \rangle = \langle \theta_r \rangle$$

En outre, la surface réelle est bidimensionnelle. Ces variations n'ont donc pas lieu simultanément selon toute la ligne de contact, et l'angle apparent reste constant.

Le modèle de Joanny - De Gennes

Ce modèle d'instabilité élastique [JdG84] a permis d'expliquer rigoureusement les propriétés de l'hystérésis de mouillage. Il permet de décrire la façon dont la ligne de contact est déformée par les défauts, qu'il s'agisse de défauts chimiques (induisant une variation locale de tension superficielle) ou de rugosités. En pratique, l'effet de ces deux types de défauts est le même. Comme l'étude de l'influence de la rugosité est très calculatoire, nous allons étudier l'effet d'un défaut chimique.

Modélisation d'un défaut

Sur la surface solide en l'absence de défaut, nous pouvons rappeler la loi d'Young :

$$\sigma_{SV} - \sigma_{SL} = \sigma \cos \theta_0$$

Le défaut provoque une variation des énergies surfaciques :

$$(\sigma_{SV} - \sigma_{SL})(x, y) = \sigma \cos \theta_0 + W(x, y)$$

où $W(x, y)$ est non nul sur une zone de dimension d .

Dans le cas présent, nous considérerons un défaut gaussien :

$$W(x, y) = W_0 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{d^2}\right).$$

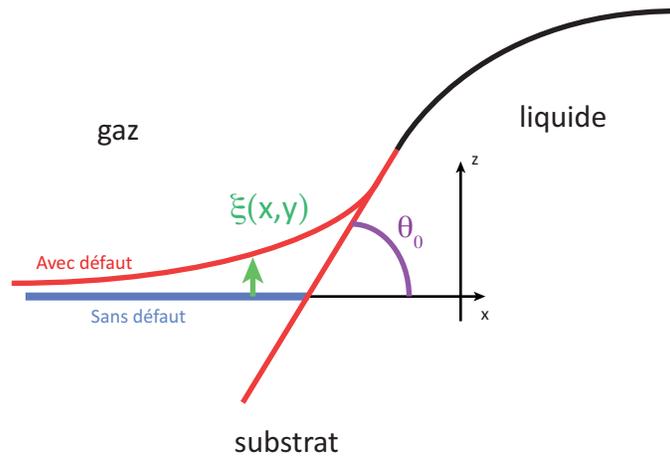


FIGURE 1.9 – Position de l'interface en fonction de la présence de défaut : création d'un angle de contact.

Forme et énergie de la surface libre

Plongeons une plaque solide dans un bain de liquide, en lui faisant faire un angle égal à l'angle de contact θ_0 . Ainsi, en l'absence de défaut, la surface ne sera pas perturbée. Lorsqu'il y a un défaut, la déformation correspondante de la surface est $\xi(x, y)$. La forme de la ligne de contact sur la plaque est donc $\eta(y)$:

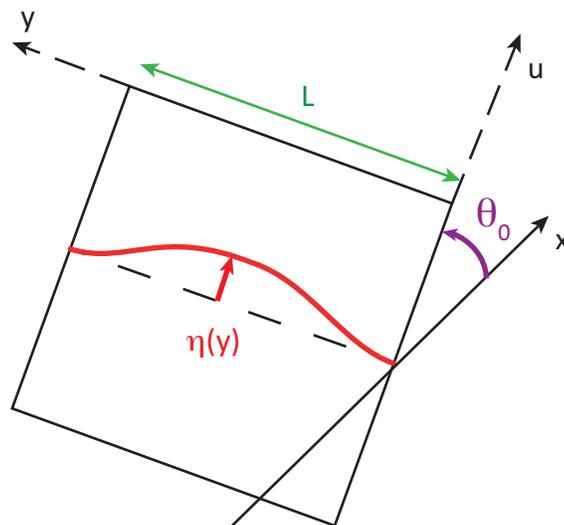


FIGURE 1.10 – Configuration pour la mise en évidence de la création d'un angle de contact lorsqu'un défaut apparaît.

$$\xi(\eta(y) \cos \theta_0, y) = \eta(y) \sin \theta_0$$

Le défaut crée donc une variation de l'énergie libre de l'interface liquide-gaz :

$$F_{cap} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left[\int_{-\infty}^{\eta(y) \cos \theta_0} \left(\sigma \left(\sqrt{1 + \nabla^2 \xi} - 1 \right) + \frac{1}{2} \rho g \xi^2 \right) dx + \sigma \eta(y) \cos \theta_0 \right] dy$$

Si le déplacement maximal $\eta(y)$ est petit devant la longueur capillaire L_c , le terme de gravité peut être négligé (rappel du terme de gravité : $\frac{1}{2} \rho g \xi^2$).

À présent, calculons, pour un profil $\eta(y)$ donné, l'énergie capillaire F_{cap} minimale. Cette énergie minimale est atteinte lorsque la forme de la surface libre $\xi(x, y)$ est la forme à l'équilibre, donc la forme respectant la loi de Laplace, soit si les effets de gravité sont négligés :

$$-\sigma \Delta \xi = 0$$

Nous calculons alors $\xi(x, y)$ sous forme de ses coefficients de Fourier dans la direction y :

$$\begin{aligned} \xi_q(x) &= \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-iqy} \xi(x, y) dy \\ \xi(x, y) &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{iqy} \xi_q(x), \quad \text{avec } q = \frac{2\pi n}{L} \end{aligned}$$

L'équation s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \xi_q(x)}{\partial x^2} - q^2 \xi_q(x) &= 0 \\ \xi_q(x) &= \xi_q(0) e^{+|q|x} \end{aligned}$$

Seul le terme en $+|q|x$ est conservé, car les expressions doivent tendre vers 0 en $x = -\infty$. D'autre part, nous pouvons faire un développement limité sur l'équation :

$$\eta(y) \sin \theta_0 = \xi(\eta(y) \cos \theta_0, y) \approx \xi(0, y) + \eta(y) \cos \theta_0 \left. \frac{\partial \xi}{\partial x} \right|_{x=0}$$

Or, $\frac{\partial \xi}{\partial x}$ est de l'ordre de η . Dans le cas où η est petit, nous écrivons :

$$\begin{aligned} \eta(y) \sin \theta_0 &= \xi(0, y), \\ \text{soit } \xi_q(0) &= \eta_q \sin \theta_0, \\ \text{où l'on a introduit } \eta_q &= \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-iqy} \eta(y) dy \end{aligned}$$

La forme de la surface libre est donc :

$$\xi_q(x) = \eta_q \sin \theta_0 e^{|q|x}$$

Connaissant cette forme, l'énergie correspondante est déduite par l'équation :

$$F_{cap} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left[\int_{-\infty}^0 \frac{\sigma}{2} \nabla^2 \xi dx + \int_0^{\eta(y) \cos \theta_0} \frac{\sigma}{2} \nabla^2 \xi dx \right] dy + \sigma \cos \theta_0 \eta_0$$

La première intégrale est de l'ordre de η^2 , et la seconde de l'ordre de η^3 , elle est donc négligeable. Par conséquent :

$$\begin{aligned} F_{cap} &= \sum_{q,q'} \int_{-\infty}^0 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{\sigma}{2} q q' \xi_q(x) \overline{\xi_{q'}(x)} e^{i(q-q')y} dy dx + \sigma \cos \theta_0 \eta_0 \\ &= \sum_q \int_{-\infty}^0 \frac{\sigma}{2} q^2 |\xi_q(x)|^2 dx + \sigma \cos \theta_0 \eta_0 \\ &= \sum_q \int_{-\infty}^0 \frac{\sigma}{2} \sin^2 \theta_0 q^2 |\eta_q|^2 e^{2|q|x} dx + \sigma \cos \theta_0 \eta_0 \\ &= \sum_q \frac{\sigma}{2} \sin^2 \theta_0 q^2 |\eta_q|^2 \times \frac{1}{2|q|} + \sigma \cos \theta_0 \eta_0 \\ F_{cap} &= \sum_q \frac{\sigma}{4} \sin^2 \theta_0 |\eta_q|^2 |q| + \sigma \cos \theta_0 \eta_0 \end{aligned}$$

Énergie de mouillage

Parallèlement à la variation d'énergie capillaire, nous avons une variation de l'énergie libre de mouillage, au niveau de la lame de matériau que nous trempions :

$$\begin{aligned} F_m &= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left[\int_{-\infty}^{\eta(y) \cos \theta_0} \sigma_{SL}(u, y) du + \int_{\eta(y) \cos \theta_0}^{\infty} \sigma_{SV}(u, y) du \right. \\ &\quad \left. - \int_{-\infty}^0 \sigma_{SL}^0 du - \int_0^{\infty} \sigma_{SV}^0 du \right] dy \\ &= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\infty}^{\eta(y) \cos \theta_0} [(\sigma_{SV}(u, y) - \sigma \cos \theta_0 - W(u, y)) - \sigma_{SV}(u, y)] dx dy \\ F_m &= -\sigma \cos \theta_0 \eta_0 - \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_0^{\eta(y) \cos \theta_0} W(u, y) dx dy. \end{aligned}$$

Forces s'exerçant sur la ligne de contact

Le profil $\eta(y)$ à l'équilibre est celui qui minimise l'énergie libre totale :

$$F_{tot} = F_{cap} + F_m$$

Ainsi, pour tous les q , nous avons :

$$\frac{\partial F_{cap}}{\partial \eta_q} + \frac{\partial F_m}{\partial \eta_q} = 0$$

Ces dérivées terme à terme correspondent aux coefficients de Fourier de deux forces : la force capillaire f_{cap} et la force de mouillage f_m . Cette équation d'équilibre traduit donc simplement l'égalité de ces forces. La force de mouillage vaut d'après l'équation suivante :

$$\frac{\partial F_m}{\partial \eta_q} = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-iqy} W(\eta(y), y) dy$$

Si cette force est localisée sur un défaut de taille d que nous négligeons devant les autres grandeurs du système, elle se présente sous la forme d'un pic de Dirac : ses coefficients de Fourier sont donc tous identiques :

$$\frac{\partial F_m}{\partial \eta_q} = f_m = -W_0 d$$

La force capillaire se dérive de l'équation :

$$f_{cap} = \frac{\partial F_{cap}}{\partial \eta_q} = \frac{\sigma}{2} \sin^2 \theta_0 \eta_q |q|$$

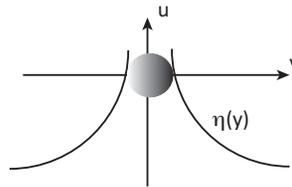


FIGURE 1.11 – Déformation de la ligne de contact lorsqu'une perturbation est mise en place (ajout d'une particule solide)

De l'égalité de ces forces, nous tirons :

$$\eta_q = \frac{-W_0 d}{\frac{\sigma}{2} \sin^2 \theta_0 |q|}$$

$$\eta(y) = \frac{-W_0 d}{\pi \sigma \sin^2 \theta_0} \ln \frac{|y|}{d}$$

La distorsion totale de la ligne de contact est donc :

$$\Delta \eta = \frac{W_0 d}{\pi \sigma \sin^2 \theta_0} \ln \frac{L}{d}$$

Notons que cette distorsion augmente indéfiniment avec la largeur de la plaque, mais que c'est le cas uniquement car nous avons négligé les effets de gravité : en pratique, cette longueur

n'excéderait pas l_c .

Mais dans le cas présent où les longueurs en jeu sont nettement plus petites, la distorsion est proportionnelle à la force ponctuelle de mouillage $f_m = W_O d$:

$$\Delta\eta = \frac{f_m}{k},$$

avec $k = \frac{\pi\sigma \sin^2 \theta_0}{\ln \frac{L}{d}}$

L'interface liquide-vapeur exerce donc une force que l'on peut considérer comme une force de rappel élastique vers la position d'équilibre, avec une constante de raideur k . k dépend de la tension superficielle et de l'angle de contact : notons que pour $\theta_0 = 0$ (cas du mouillage total), la force de rappel reste nulle même avec une très grande déformation : c'est une autre façon de traduire l'effet du mouillage total.

Application à l'hystérésis de mouillage

Pour simplifier, nous nous plaçons à présent dans le cas unidimensionnel : nous considérerons une ligne de contact rectiligne, se situant à une hauteur u sur la plaque. Nous faisons varier le niveau de liquide dans la cuve de façon à faire varier la hauteur de la ligne de contact u_{max} à l'équilibre en l'absence de défaut. En $u = 0$, sur une largeur d , nous avons notre défaut.

L'équilibre se traduit toujours par l'égalité des forces f_{cap} et f_m . f_{cap} est une force de rappel élastique :

$$f_{cap} = k(u_{max} - u)$$

et f_m est localisée sur une largeur d autour du défaut. Par exemple, c'est une gaussienne si nous définissons notre défaut comme gaussien.

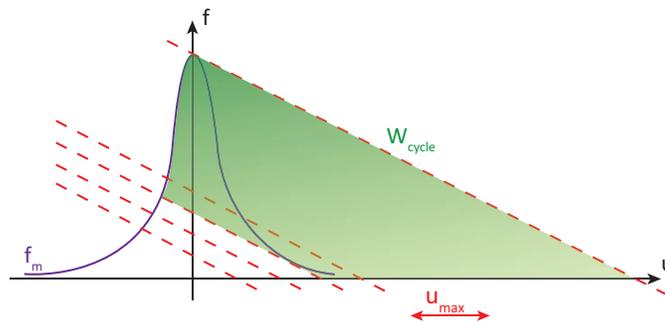


FIGURE 1.12 – Évolution de f_m pour un défaut gaussien.

Si le défaut est suffisamment petit et s'il crée une force assez grande, il existe une plage de u_{max} pour laquelle nous avons 3 positions d'équilibre. Comme dans le cas de la microscopie à force atomique, celle du milieu est instable.

Ainsi, en faisant varier u_{max} autour du défaut, selon que nous l'augmentons ou le diminuons, la position réelle u de l'interface ne prend pas les mêmes valeurs. Sur un cycle complet d'hystérésis, nous fournissons un travail total :

$$W_{cycle} = \int f du$$

égal donc à l'aire hachurée sur le graphique.

Ainsi, ce modèle élastique permet d'expliquer les propriétés de l'hystérésis de mouillage, et en particulier l'existence d'un travail dissipé lors d'un aller-retour. En effet, un matériau réel présente de tels défauts sur toute sa surface, et ce phénomène microscopique se reproduit en chaque point au fur et à mesure du déplacement de la ligne de contact sur la surface.

1.1.4 La superhydrophobie

Il apparaît dans la nature, des surfaces, comme la feuille de lotus ou encore les yeux de moustiques, où une goutte d'eau ne s'accroche jamais et où l'angle de contact formé est supérieur à 170° . Ces surfaces, appelées surfaces superhydrophobes, ont été abondamment étudiées (notamment par [Qué02], [BTQ02] ou encore [LBH07] pour les plus récentes propositions) pour comprendre leur propriété. Il est apparu de ces analyses que leur aspect microscopique n'était pas lisse comme il était communément accepté pour une surface. Au contraire, une macro-rugosité régulièrement distribuée (voire parfaitement répartie) existe. C'est cette rugosité, souvent vue comme des picots parsemant la surface d'un matériau, qui décuple les propriétés de mouillage d'un matériau. Si nous revenons à un exemple très connu qui est celui de la feuille de lotus, plante à la faculté auto-nettoyante, nous pouvons observer à sa surface des plots de matière (figure 1.13), sur lesquels les gouttes d'eau semblent glisser. Cet effet, appelé effet Lotus, a été expliqué par deux modèles longtemps opposés par la population scientifique, qui notamment grâce aux travaux de Laura Barbieri [Bar06], ont pu être associés pour expliquer la superhydrophobie.

Le modèle de Wenzel

Wenzel [Wen36] fut le premier à tenter d'expliquer l'influence de la rugosité sur le mouillage. Si nous supposons la relation d'Young (1.7) donnant l'angle de contact local, et que nous voulons obtenir l'angle apparent θ^* sur la surface rugueuse, et si nous supposons aussi une dimension de rugosité très petite devant la taille de la goutte, alors nous pouvons définir une surface superhydrophobe (superhydrophile) via un facteur de rugosité r , via le rapport de la surface réelle (surface en contact de la rugosité avec le liquide) versus la surface apparente (surface projetée normalement de la rugosité avec le liquide). Ce rapport est toujours plus grand que l'unité dans le cas de Wenzel : la goutte est toujours totalement empalée sur la rugosité de surface.

Prenons le cas d'une surface rugueuse, sur laquelle une goutte s'étale d'une longueur dx au niveau de la ligne de contact. L'énergie de surface est donc modifiée par ce déplacement :

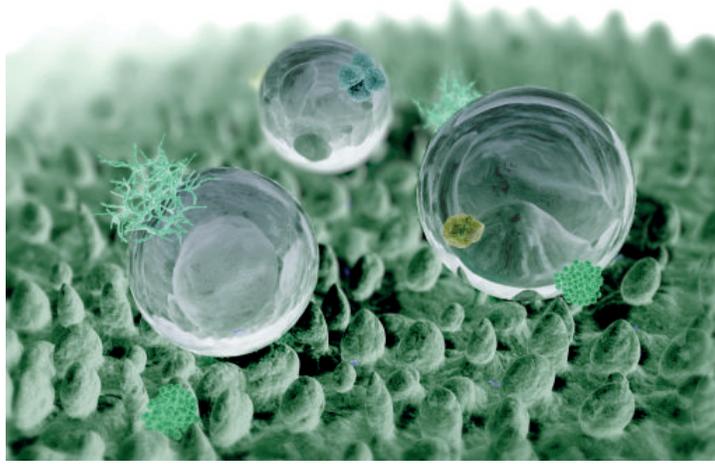


FIGURE 1.13 – Vue numérique de la surface d’une feuille de lotus en présence de gouttes d’eau et d’impuretés s’y accrochant, *Wikimedia sous licence Creative Commons*

une surface sèche devient mouillée (surface rdx) et la goutte s’étalant voit donc son énergie surfacique évoluer (interface liquide/vapeur augmente). La variation d’énergie surfacique dE s’écrit alors :

$$dE = r(\sigma_{SL} - \sigma_{SV})dx + \sigma_{LV}dx\cos\theta^* \quad (1.16)$$

La relation d’Young est bien obtenue pour un facteur de rugosité unitaire (surface lisse).

Si nous voulons étudier ce phénomène, nous devons schématiser notre surface rugueuse. Pour cela, nous travaillerons avec une surface parsemée de petits picots à base circulaire, disposés en carrés (les autres dispositions ajoutent un terme de facteur de forme A devant les expressions de la rugosité), de hauteur/diamètre/espacement (ce dernier sera appelé pitch) connus (figure 1.14). Le modèle de Wenzel décrit le cas où la goutte est complètement empalée sur les picots. Nous associons à ce cas l’angle de contact apparent de Wenzel θ_W , celui-ci est calculé grâce à la relation suivante :

$$\cos(\theta_{Wenzel}) = r * \cos(\theta_0) \quad (1.17)$$

où θ_0 est l’angle de contact que fait la goutte sur une surface plane.

Ici r est la macro-rugosité apparente ou coefficient de Wenzel, il représente le rapport entre la surface réelle et la surface projetée comme sur la figure (1.15). Cette équation nous permet de voir que les picots vont accentuer l’effet hydrophobe ou hydrophile du matériau. Par considérations géométriques, nous obtenons ce coefficient en fonction des paramètres géométriques des picots :

$$r = 1 + \frac{h * L}{p^2} \quad (1.18)$$

où h est la hauteur des picots, p le pitch et L le périmètre du dessus des picots.

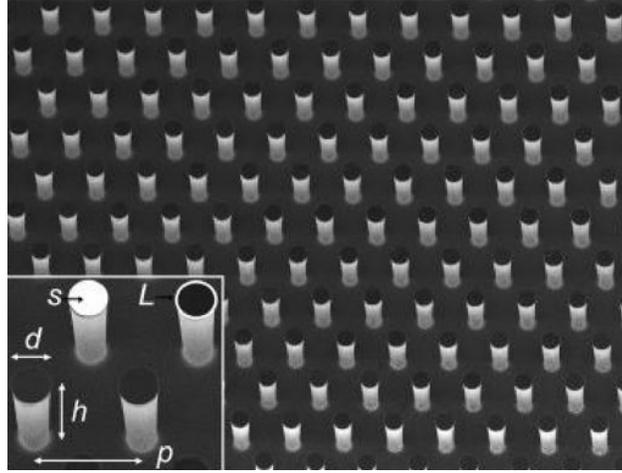


FIGURE 1.14 – Vue en microscopie électronique à balayage, d’une surface superhydrophobe : définition des grandeurs associées aux picots pour les cas Wenzel ou Cassie-Baxter (tiré de Barbieri [Bar06])

Le modèle de Cassie-Baxter

Le second modèle est celui de Cassie-Baxter [Cas58]. Il a été imaginé pour modéliser le comportement d’un matériau composite. Prenons un matériau en couche, composé de bandes successives alternées, de composition chimique différente, formant donc chacune un angle de contact différent avec le liquide étudié. Pour déterminer l’angle de contact statique que fait ce type de surface mixte, imposons un déplacement infinitésimal dx de la ligne de contact. Si nous appelons f_1 et f_2 les fractions surfaciques occupées par les deux types de matériau (indicés 1 et 2), alors la variation d’énergie due à ce déplacement est :

$$dE = f_1(\sigma_{S_1L} - \sigma_{S_1V})Ldx + f_2(\sigma_{S_2L} - \sigma_{S_2V})Ldx + \sigma_{LV}dx\cos\theta^* \quad (1.19)$$

En introduisant la relation d’Young dans cette expression, nous obtenons la loi dite de Cassie-Baxter, reliant l’angle statique réel et les fractions surfaciques et angles de contact des matériaux pris seuls (θ_1 et θ_2) :

$$\cos\theta^* = f_1\cos\theta_1 + f_2\cos\theta_2 \quad (1.20)$$

Cette relation peut être étendue si d’autres matériaux viennent s’y ajouter. Pour de fortes rugosités, le liquide va reposer sur une surface composée de solide et d’air. Si l’angle de contact d’un liquide dans l’air vaut 180° , la relation de Cassie-Baxter devient alors dans le cas d’un matériau mixte composé de deux phases uniquement :

$$\cos\theta^* = f_S\cos\theta - f_{air} \quad (1.21)$$

Enfin, si le matériau possède une micro-rugosité, alors nous pouvons introduire un paramètre la prenant en compte, r_f . Typiquement, nous choisirons ce paramètre unitaire, pour ne pas ajouter de niveaux de complexité.

$$\cos\theta^* = f_S * r_f * \cos(\theta) - (1 - f_S) \quad (1.22)$$

Si nous nous replaçons dans le cadre de notre surface schématique, r_f décrit le fait que la goutte reste en suspension au-dessus des picots, avec de l'air emprisonné en dessous de celle-ci. Comme pour le modèle Wenzel, nous pouvons exprimer l'angle de contact apparent pour le cas Cassie en fonction de l'angle de contact apparent pour une surface plane :

$$\cos(\theta_{Cassie}) = f * r_f * \cos(\theta_0) - (1 - f) \quad (1.23)$$

Le coefficient f peut se calculer en fonction des paramètres géométriques des picots, comme suit :

$$f = \frac{s}{L^2} \quad (1.24)$$

où s est l'aire de la surface du dessus des picots.

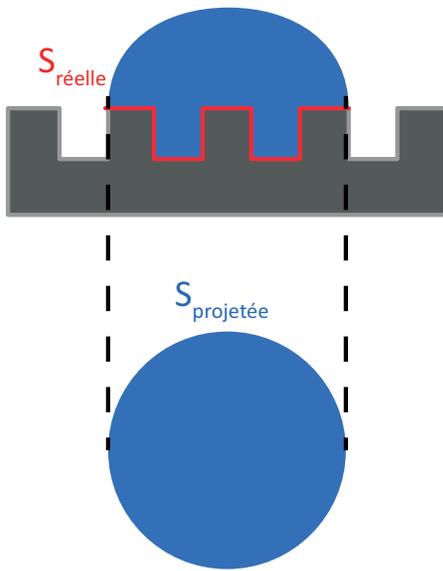


FIGURE 1.15 – Définition des surfaces pour le cas Wenzel

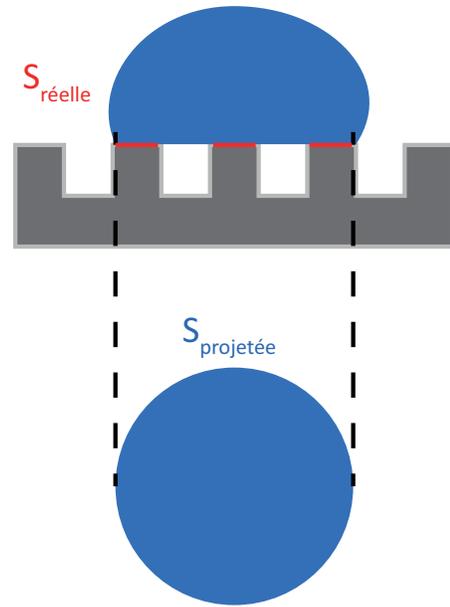


FIGURE 1.16 – Définition des surfaces pour le cas Cassie-Baxter

La transition Cassie-Wenzel : un minimum d'énergie

Nous l'avons vu, les configurations précédentes laissent supposer qu'un état transitoire doit exister entre ces états. Cette transition entre une configuration où la goutte est posée sur des rugosités et une configuration où elle s'y empale est synonyme de présence d'un équilibre énergétique instable. Pour la mettre en évidence, nous allons nous intéresser à l'énergie de surface d'une goutte déposée sur ces types de surfaces, dans chacun des cas, Wenzel et Cassie-Baxter. Nous pouvons définir les énergies de surface propres aux différentes interactions sur la figure (1.17). Ainsi, nous avons les deux configurations possibles (1.25).

En définissant x la profondeur de pénétration de la goutte dans les cavités, y le ratio entre l'interface (en ménisque) entre l'air et le liquide et la ligne horizontale et h la hauteur des

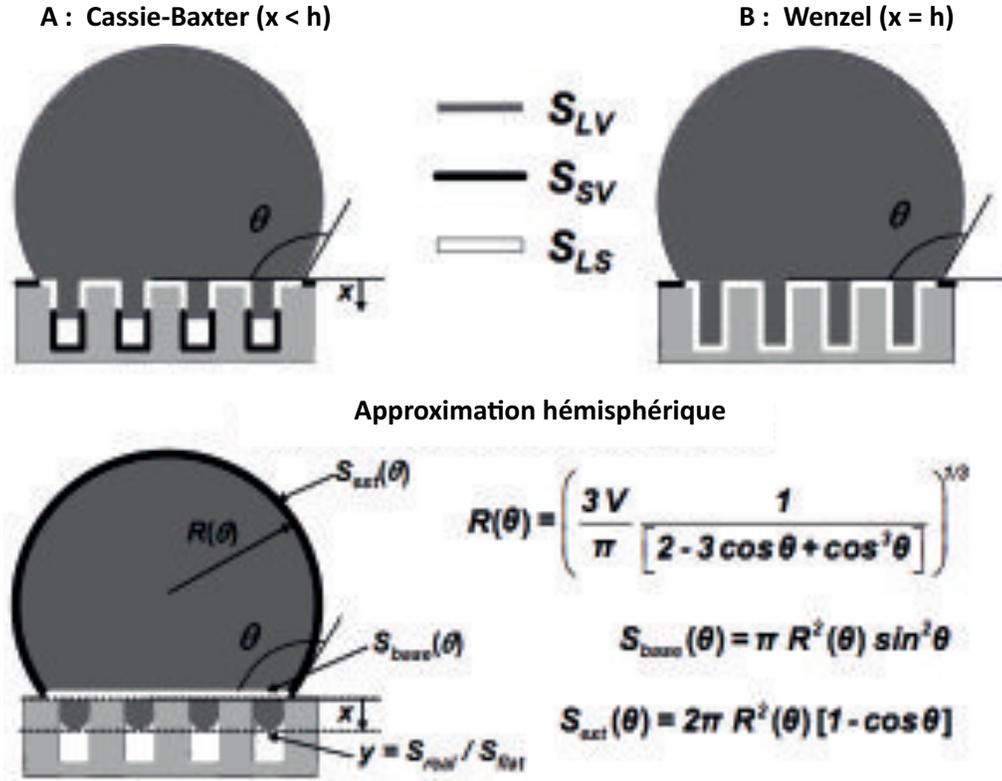


FIGURE 1.17 – Définition des énergies de surface associées aux cas Wenzel ou Cassie-Baxter (tiré de Barbieri [Bar06])

cavités, nous avons :

$$E_{surf} = \sigma_{LV}S_{LV} + \sigma_{SV}S_{SV} + \sigma_{LS}S_{LS} \text{ soit}$$

$$E_{cassie} = \sigma_{LV} (S_{ext} + (1-f)yS_{base}) + \sigma_{LS} \left(fS_{base} + x \frac{A}{p^2} LS_{base} \right) + \sigma_{SV} \left(r(S_{total} - S_{base}) + (1-f)S_{base} + \frac{A}{p^2} LS_{base}(x-h) \right)$$

$$E_{wenzel} = \sigma_{LV}S_{ext} + \sigma_{LS}fS_{base} + \sigma_{SV} \left(r(S_{total} - S_{base}) + (1-f)S_{base} + \frac{A}{p^2} LS_{base}(x-h) \right) \quad (1.25)$$

Nous pouvons simplifier ces deux expressions et les réduire sous une forme identique :

$$E_{surf} = \sigma_{LV}S_{ext} + C_{mode}S_{base} + r\sigma_{SV}S_{total} \quad (1.26)$$

avec C_{mode} correspondant au mode Cassie-Baxter ou Wenzel. Les expressions de cette fonction sont rappelées ci-dessous :

$$C_{Wenzel} = -\sigma_{LV}r\cos(\theta_0) \quad (1.27)$$

$$C_{Cassie} = -\sigma_{LV} \left(f \left(1 + \frac{Lx}{s} \right) \cos(\theta_0) + (f-1)y \right)$$

Ainsi, si nous pouvons exprimer l'énergie libre totale comme étant une fonction de l'angle de contact et des paramètres d'empalement :

$$E_{surf}(\theta, x, y) = \pi \left(\frac{3V}{\pi} \right)^{2/3} \frac{1}{(2 - 3\cos\theta + \cos^3\theta)^{2/3}} (2\sigma_{LV}(1 - \cos\theta) + C(x, y)\sin^2\theta) + r\sigma_{SV}S_{total} \quad (1.28)$$

En dérivant (1.28) vis-à-vis de $\cos\theta$, nous pouvons mettre en évidence des minima d'énergie libre totale, minima permettant d'une part de remonter aux expressions des angles de contact en mode Wenzel ou Cassie-Baxter tels que définis dans le paragraphe précédant, mais aussi de mettre en évidence la transition entre ces deux modes :

$$\cos\theta_0 = \frac{1 - f}{f - r} \quad (1.29)$$

Un critère thermodynamique permet ainsi de prédire une transition entre deux modes d'équilibre pour le cas d'une goutte déposée sur des surfaces rugueuses, ainsi, si $\cos\theta_{Cassie} > \cos\theta_{Wenzel}$ alors nous serons dans le cas Cassie-Baxter ce qui se traduira sur l'angle à plat par $\cos\theta_0 < (1 - f)/(f - r)$, et inversement.

1.1.5 Paramètres adimensionnels associés à ces phénomènes

Les nombreux phénomènes précédents et les paramètres qui y sont associés jouent un rôle dans le comportement que développe le volume de fluide. Pour permettre de mieux quantifier leur influence respective, nous pouvons utiliser des nombres adimensionnels, sous forme de rapports rendant compte des compétitions entre phénomènes. En appliquant le théorème de Vashy-Buckingham, expliquant que le nombre de paramètres indépendants est réductible par le nombre de dimensions fondamentales, nous pouvons faire une liste des nombres intéressants pour nos études :

Nombre de Reynolds

$$Re = \frac{\rho L u_0}{\mu}$$

avec L une longueur caractéristique, u_0 une vitesse caractéristique de l'écoulement, μ la viscosité et ρ la masse volumique.

Re compare donc le flux de quantité de mouvement par convection avec le flux de diffusion de cette quantité par viscosité. Il décrit le régime de l'écoulement autour de la goutte, laminaire, inertiel ou turbulent.

Nombre de Weber

$$We = \frac{\rho L u_0^2}{\sigma}$$

avec σ la tension de surface.

We compare les forces d'inertie avec les forces de tension de surface. Il permet de prévoir la tenue d'une goutte lors de son mouvement (formation de micro-gouttelettes).

Nombre de Bond

$$Bo = \frac{\rho g R^2}{\sigma}$$

avec R le rayon de la goutte.

Bo caractérise le rapport des intensités entre des forces de gravité et des forces de tension de surface.

Ce nombre est important, car il permet de définir la longueur capillaire associée à un fluide, symbolisant une égalité entre les forces de tensions de surface et les forces de gravité ($Bo = 1$).

$$L_c = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho g}}$$

Nombre d'Ohnesorge

$$Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\sigma L \rho}}$$

Oh rend compte de la dissipation visqueuse par rapport aux forces de tension de surface. Il traduit la morphologie de l'impact (déposition ou impact avec rebonds).

Nombre Capillaire

$$Ca = \frac{\mathbf{u}\mu}{\sigma}$$

Ca représente le rapport entre les forces visqueuses et la tension superficielle et est utilisé pour caractériser l'atomisation des liquides.

1.2 Modèles physiques et équations de conservation de la mécanique des fluides.

Les écoulements diphasiques sont étudiés depuis de nombreuses décennies. Les pères fondateurs de l'analyse physique de ce type d'écoulement comme par exemple Young, Laplace, Stokes, Navier-Stokes, Barré de Saint-Venant, Faraday, Lord Rayleigh, furent les premiers à symboliser les phénomènes directeurs de cette branche de la mécanique des fluides par des modèles variés et complexes. Ces modèles découlant de la mécanique des milieux continus, développée dans de nombreux ouvrages, peuvent être décrits via le formalisme de la représentation eulérienne des bilans de conservation. Ainsi, toute grandeur associée à une particule M sera fonction de quatre variables indépendantes (dites variables d'Euler) qui sont le temps t et les coordonnées de l'espace x_i de la position du point M à l'instant t . Les démonstrations suivantes sont extraites

du cours de J.-P. Caltagirone [Cal10]. Elles permettent d'illustrer les bilans de conservation de quantité de mouvement et de masse nécessaires pour mieux comprendre le chapitre suivant.

Si nous considérons que b est une grandeur tensorielle d'ordre quelconque et que $b(\mathbf{x}, t)$ et $\mathbf{V}(\mathbf{x}, t)$ sont continues et continûment dérivables sur le domaine D , la dérivée particulière d'une intégrale en volume s'écrit alors :

$$\frac{d}{dt} \iiint_D b dv = \iiint_D \frac{db}{dt} dv + \iint_{\partial D} (b \otimes \mathbf{V}) \cdot \mathbf{n} ds \quad (1.30)$$

La dérivée particulière dans le cas où b et \mathbf{V} sont continues et continûment différentiables par morceaux (figure 1.18) est obtenue en utilisant l'équation (1.30) dans chaque domaine (ici D_S et D_L) où ces grandeurs sont continues et continûment différentiables. Soit :

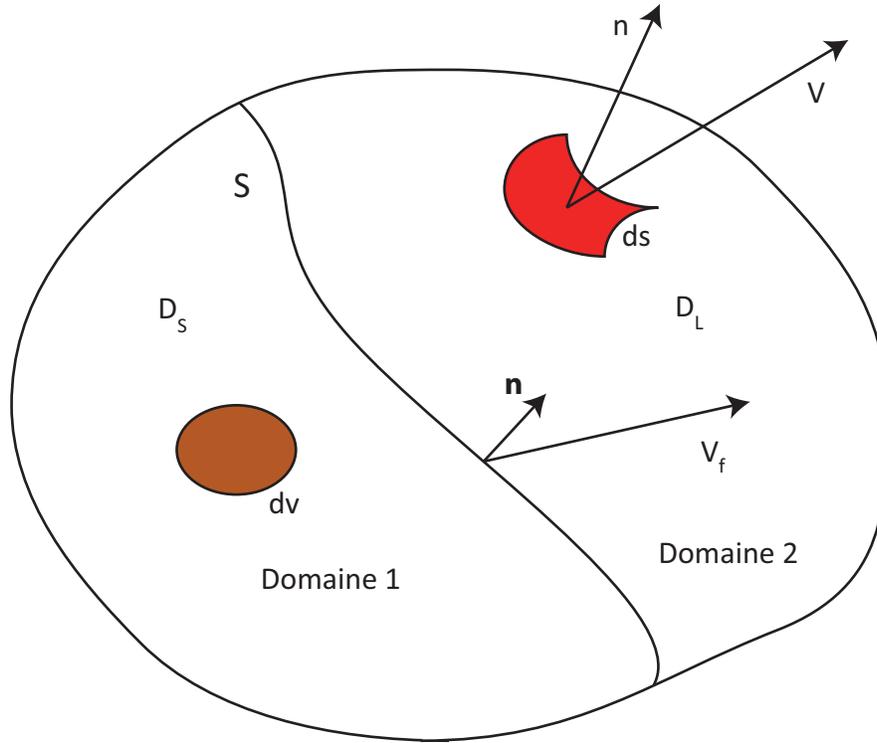


FIGURE 1.18 – Volume matériel contenant une interface Σ entre deux milieux de nature différente.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \iiint_D b dv &= \iiint_{D_S} \frac{db}{dt} dv + \iint_{\partial D_S} (b \otimes \mathbf{V}) \cdot \mathbf{n} ds + \iint_{\Sigma} (b \otimes \mathbf{V}_f) \cdot \mathbf{n} ds \\ &+ \iiint_{D_L} \frac{db}{dt} dv + \iint_{\partial D_L} (b \otimes \mathbf{V}) \cdot \mathbf{n} ds - \iint_{\Sigma} (b \otimes \mathbf{V}_f) \cdot \mathbf{n} ds \quad (1.31) \end{aligned}$$

Cette équation conduit donc à la dérivée particulière d'une intégrale de volume sur un domaine D contenant une interface de discontinuité Σ :

$$\frac{d}{dt} \iiint_D b dv = \iiint_D \frac{db}{dt} dv + \iint_{\partial D} (b \otimes \mathbf{V}) \cdot \mathbf{n} ds - \iint_{\Sigma} [(b \otimes \mathbf{V}_f)] \cdot \mathbf{n} ds \quad (1.32)$$

où le symbole $[[\]]$ désigne la discontinuité de la grandeur concernée lorsque nous traversons l'interface Σ dans le sens de \mathbf{n} . Ici, nous aurons : $[[b(\mathbf{x}, t)]] = b_L(\mathbf{x}, t) - b_S(\mathbf{x}, t)$, $\forall x \in \Sigma$.

Nous obtenons par le même principe de raisonnement, après intégration sur chaque domaine, la formule de la divergence généralisée :

$$\iint_{\partial D} b \cdot \mathbf{n} dv = \iiint_D \nabla \cdot b dv + \iint_{\Sigma} [[b]] \cdot \mathbf{n} ds \quad (1.33)$$

Nous utiliserons ces différentes formulations générales pour exprimer les différentes équations de conservation, en relation avec les écoulements et phases rencontrés. L'aspect thermique sera évoqué à partir du chapitre 4.

1.2.1 Conservation de la masse

La conservation de la masse exprime le fait que chaque constituant conserve sa masse dans le domaine lorsque le volume de contrôle est suivi dans son mouvement. Si les fluides sont immiscibles, alors nous pouvons écrire :

$$\frac{d}{dt} \iiint_D \rho_i dv = 0 \quad (1.34)$$

où ρ_i est la masse volumique locale partielle du constituant i au sein du mélange.

Si des réactions chimiques doivent se produire et conduisent à des transformations entre espèces, via une cinétique chimique connue, nous pouvons introduire le taux de production massique dans l'équation précédente, pour chaque espèce (notée ω_i) :

$$\frac{d}{dt} \iiint_D \rho_i dv = \omega_i \quad (1.35)$$

Via la dérivée particulaire, nous pouvons reformuler ces équations :

$$\frac{d}{dt} \iiint_D \rho_i dv = \iiint_D \left(\frac{d\rho_i}{dt} + \rho_i \nabla \cdot \mathbf{V}_i \right) dv \quad (1.36)$$

avec \mathbf{V}_i la vitesse du constituant i .

En formulation locale, l'équation de conservation de la masse peut s'exprimer en adoptant l'hypothèse d'équilibre local.

$$\frac{d\rho_i}{dt} + \rho_i \nabla \cdot \mathbf{V}_i = 0 \quad (1.37)$$

ou encore, via la dérivée particulaire :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{V}_i) = 0 \quad (1.38)$$

Ces équations sont notamment valables pour le cas où nous sommes en présence de fluides purs (ce qui sera notre cas tout au long de ce manuscrit). Ainsi, si les fluides sont purs ou

les mélanges sont homogènes isotropes (fluide fictif unique), alors nous pouvons sommer les équations (1.38) de chaque constituant :

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{V}_i) \right) = 0 \quad (1.39)$$

Comme la masse volumique du mélange peut s'écrire comme la somme des masses volumiques des constituants, soit :

$$\rho = \sum_{i=1}^n \rho_i \quad (1.40)$$

et que la vitesse barycentrique du domaine est donnée par une expression semblable,

$$\rho \mathbf{V} = \sum_{i=1}^n (\rho_i \mathbf{V}_i) \quad (1.41)$$

Alors, nous pouvons écrire la loi de conservation de la masse pour tout le domaine D via l'expression suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (1.42)$$

1.2.2 Conservation de la quantité de mouvement

NOTE : dans toute cette sous-section, le tenseur de déformation sera noté σ , la notion de tension de surface n'étant pas évoquée ici.

Nous pouvons exprimer à l'échelle du domaine la loi fondamentale de la dynamique :

$$\iiint_D \rho \gamma dv = \iiint_D \mathbf{f} dv + \iint_{\Sigma} \sigma \cdot \mathbf{n} ds \quad (1.43)$$

Le théorème de la divergence permet de reformuler cette expression :

$$\iiint_D \rho \gamma dv = \iiint_D \mathbf{f} dv + \iiint_D \nabla \cdot \sigma dv \quad (1.44)$$

La première loi de Cauchy peut être déduite de cette dernière expression grâce à la continuité des fonctions et au fait que le domaine est arbitraire :

$$\rho \gamma = \mathbf{f} + \nabla \cdot \sigma \quad (1.45)$$

Cette équation est la loi de conservation de la quantité de mouvement locale.

En variables d'Euler, nous pouvons en ressortir l'expression de la conservation de la quantité de mouvement pour tout le domaine D , soit :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + 1/2 \nabla \mathbf{V}^2 + \nabla \times \mathbf{V} \wedge \mathbf{V} \right) = \mathbf{f} + \nabla \cdot \sigma \quad (1.46)$$

Le tenseur de déformation σ est l'expression de l'état de déformation du fluide et caractérise de manière univoque les vitesses de déformation. La relation $\sigma = f(\mathbf{TD})$ est de la forme (avec TD le tenseur du taux de déformation, symétrique par construction) :

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \lambda\nabla \cdot \mathbf{V}\delta_{ij} + 2\mu\mathbf{TD} \quad (1.47)$$

Cette loi de comportement peut être étendue aux fluides du domaine D , et permet de décrire la loi de Cauchy de manière plus explicite :

$$\nabla \cdot \sigma = -\nabla p + \nabla (\lambda\nabla \cdot \mathbf{V}) + \nabla \cdot (2\mu\mathbf{TD}) \quad (1.48)$$

ou encore pour un fluide newtonien visqueux :

$$\rho\gamma = -\nabla p + \mathbf{f} + \nabla (\lambda\nabla \cdot \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\mu (\nabla\mathbf{V} + \nabla^T\mathbf{V})) \quad (1.49)$$

Ainsi, nous obtenons les équations de Navier-Stokes :

$$\rho \left(\frac{\partial\mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla\mathbf{V} \right) = -\nabla p + \mathbf{f} + \nabla (\lambda\nabla \cdot \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\mu (\nabla\mathbf{V} + \nabla^T\mathbf{V})) \quad (1.50)$$

Chapitre 2

Modélisation et simulation numérique pour les écoulements diphasiques

2.1 L'approche de modélisation

Le fait de s'intéresser aux écoulements diphasiques (et par extensions aux écoulements multiphasiques) implique l'utilisation de plusieurs approches possibles pour la modélisation des phénomènes physiques. Ces différentes approches peuvent être classées selon leur caractère déterministe, statistique ou selon les échelles étudiées, échelles devant être fonction des structures diphasiques représentées par ces modèles.

Il est indiqué que l'ensemble des modèles et méthodes suivants ainsi que l'ensemble des problèmes physiques étudiés par la suite sont réalisés dans un cadre numérique propre au département TREFLE de l'Institut d'Ingénierie et de Mécanique - Bordeaux (I2M) via le code de calcul Thétis (ex Aquilon). Ce code utilise des modèles et méthodes tels que décrits dans les sections suivantes. Pour tout complément nécessaire, se rapporter aux documentations disponibles¹.

2.1.1 Le modèle macroscopique : équations de mouvement et conditions de saut

La mécanique des milieux continus voit le principe fondamental de la dynamique permettre la formulation d'équations dites du mouvement d'un fluide réel newtonien dans chacun des sous-domaines d'étude. Le système d'équations de Navier-Stokes (2.1) est suppléé par des relations de conservation qui décrivent la présence de contact entre les phases en présence.

1. site internet du projet : <http://thetis.enscbp.fr>

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \right) = \nabla p + \rho \mathbf{g} \nabla \cdot (\mu [\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}]) \quad (2.1)$$

où ρ et μ sont respectivement la masse volumique et la viscosité dynamique de la phase considérée. Elles sont discontinues au voisinage de l'interface.

Cette interface est considérée comme une surface d'échange entre deux fluides, qui subit dans les conditions les plus générales (changement de phase compris) des transferts de masses et de chaleur d'un fluide vers l'autre. Si nous considérons un volume élémentaire représentatif coupé par l'interface entre deux milieux fluides indicés k , possédant chacun une vitesse locale \mathbf{u}_k de part et d'autre de la surface de contact, nous pouvons formuler une vitesse V de cette interface. Les quantités de mouvement $\rho_k \mathbf{u}_k$, associées aux fluides k , sont conservées au travers de l'interface, car il y a conservation de la masse totale. Si nous perdons la quantité de mouvement $\rho_1 \mathbf{u}_1$ dans le fluide 1, alors nous devons retrouver cette même quantité dans le fluide 2. Soit \mathbf{n}_i la normale à l'interface pour l'élément de surface considéré, nous obtenons dans le référentiel de l'interface :

$$\rho_1(\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_i - V) = \rho_2(\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_i - V) \quad (2.2)$$

Si nous considérons à présent une absence de changement de phase, alors les flux massiques relatifs à la position de l'interface sont nuls (nous verrons plus loin comment faire en présence de changement d'état). Les termes dans l'équation (2.2) sont donc identiquement nuls, soit :

$$V = \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_i = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_i \quad (2.3)$$

Nous pouvons y déceler la continuité des vitesses normales à travers l'interface. Les vitesses tangentielles peuvent être considérées comme continues à la surface de contact, ce qui est vérifié expérimentalement. Cette propriété de l'écoulement diphasique montre l'absence de glissement local entre deux phases en présence. Nous pouvons aussi reformuler via une notation de saut à l'interface cette expression :

$$(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) \cdot \mathbf{n}_i = \llbracket \mathbf{u} \rrbracket \cdot \mathbf{n}_i = 0 \quad (2.4)$$

La conservation de la quantité de mouvement à travers l'interface peut être obtenue via la projection du tenseur des contraintes sur la normale de la surface à un élément de surface local : ([SZ99], [BM07])

$$(\mu_1 [\nabla \mathbf{u}_1 + \nabla^T \mathbf{u}_1] - p_1 \mathbf{Id}) \cdot \mathbf{n}_i = (\mu_2 [\nabla \mathbf{u}_2 + \nabla^T \mathbf{u}_2] - p_2 \mathbf{Id} + \sigma \kappa) \cdot \mathbf{n}_i \quad (2.5)$$

où \mathbf{Id} est la matrice identité de \mathfrak{R}^3 et κ la courbure moyenne de l'interface, exprimée comme étant la somme des courbures principales.

Les équations de Navier-Stokes (2.1) associées aux relations de saut (2.4-2.5) fournissent un modèle adapté à la simulation numérique de problèmes de mécanique des fluides en présence

d'écoulement multiphasiques, à condition de ne vouloir résoudre l'écoulement que séparément dans chaque phase. Il faut construire un maillage adapté à chaque phase, résoudre le système d'équations (2.1) en prenant garde à garder constantes les propriétés physiques des fluides. La relation de saut entre chaque sous-domaine doit être vérifiée, sachant qu'elle correspondra à une des conditions aux limites pour chaque maillage. Une fois résolu, le système doit être mis à jour tant du point de vue maillage (pour s'accorder au mieux à la nouvelle topologie de l'écoulement) que mathématique (respect de la régularité géométrique imposée). Cette formulation d'un problème de mécanique des fluides est par contre irréaliste pour calculer l'écoulement global dans tout un macro-domaine. Pour cela, il faut reformuler le modèle via une approche différente où chaque phase ne sera pas séparée des autres lors de la résolution.

2.1.2 Le modèle mésoscopique : le modèle à un fluide

Les équations précédentes sont donc valables dans chaque phase fluide prise séparément. Pour déterminer le champ de vitesse dans tout le domaine de calcul, il sera nécessaire de résoudre une équation supplémentaire permettant de connaître quelle phase est en présence dans chaque zone. Cette approche de modélisation consistant à résoudre les mêmes équations avec cette prise en compte de la nature de la phase est appelée "modèle à un fluide" ou modèle mésoscopique.

Cette approche a été choisie de par son accord avec la discrétisation sur maillage fixe cartésien, cette dernière étant choisie et définie par la suite. Elle permet donc de ne pas se soucier de la position de l'interface par rapport au maillage. Afin de connaître géométriquement la position des phases dans le domaine, il convient de définir des fonctions ϕ_i (où l'indice correspond à la phase i), telles que :

$$\begin{aligned}
 \phi_1(x, y, z, t) &= 1 && \text{dans les zones contenant le fluide 1} \\
 \phi_1(x, y, z, t) &= 0 && \text{dans les zones ne contenant pas le fluide 1} \\
 \phi_2(x, y, z, t) &= 1 && \text{dans les zones contenant le fluide 2} \\
 \phi_2(x, y, z, t) &= 0 && \text{dans les zones ne contenant pas le fluide 2}
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

Les fluides traités tout au long de ce manuscrit sont supposés totalement immiscibles, il y a donc une relation de complémentarité entre les fonctions ϕ_i . La somme de ces fonctions vaut donc 1. De plus, les fonctions de phase ϕ_i se déplacent en fonction de la vitesse de l'interface V et cette relation peut être décrite via une équation cinématique de type advection :

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + V \cdot \nabla \phi_i = 0 \tag{2.7}$$

Il conviendra par la suite de ne repérer que la présence d'une des phases (nous travaillerons en diphasique et rarement en triphasique au moment de développer les modèles de changement de phase) via une des fonctions de phase, que nous nommerons C . Cette fonction sera donc définie sur tout le domaine [VC00], et appelée fonction couleur prenant la valeur 0 dans le fluide

principal (l'air, noté 1) et 1 dans le fluide secondaire (phase constituant les gouttes, ponts ou blocs de glace, notée 2). Les propriétés physiques et thermodynamiques sont recalculées dans le domaine en fonction de la distribution de C par des lois arithmétiques :

$$\begin{aligned}\rho &= \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)C \\ \mu &= \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1)C\end{aligned}\tag{2.8}$$

D'autres lois sont possibles, comme discuté dans Pianet et al. [PVL+10].

Nous verrons par la suite comment définir une tension superficielle nécessaire pour la prise en compte des relations de saut qui ne sont plus exprimées explicitement dans le système d'équations de Navier-Stokes.

La présence de grandes gammes d'échelles spatiales pour représenter l'interface rend la résolution numérique difficile au travers des relations précédentes et des équations de conservation exposées au chapitre 1. Chaque interface, et c'est encore plus vrai en trois dimensions, devient une difficulté majeure pour résoudre les équations de conservations de chaque phase, car la position de l'interface est une donnée essentielle pour écrire les relations de sauts. Plusieurs approches, comme le "Ghost Fluid" [GF05], se proposent de résoudre directement les équations de conservation phasiques par l'intégration des relations de sauts dans la discrétisation des opérateurs. Nous avons fait le choix de ne pas suivre cette approche et d'utiliser la vision volumique du modèle à un fluide diphasique pour représenter les principales caractéristiques de l'écoulement.

L'idée principale est de construire un unique système d'équations, valide pour l'intégralité du domaine de calcul diphasique, composé des deux phases non miscibles et d'une interface elle-même dotée de propriétés matérielles. Katakoa [Kat86] introduit une fonction scalaire C_k , la même que ϕ_i , telle que définie :

$$C_k(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in \text{phase } k \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}\tag{2.9}$$

Les propriétés que C_k doit vérifier sont :

$$\begin{aligned}\sum_k C_k &= 1 \\ C_k C_{k'} &= \delta_{kk'} C_k \\ \nabla C_k &= -\mathbf{n}_k \delta_I\end{aligned}\tag{2.10}$$

où \mathbf{n}_k est la normale à la phase k et δ_I est la distribution de Dirac attachée à l'interface I . Le gradient de distribution de la fonction couleur est non nul uniquement à l'interface et il est orienté dans le sens opposé au vecteur normal.

La vitesse de l'interface $\mathbf{u}_I \neq \mathbf{u}_k$ régit la cinématique de l'interface localisée par C_k . Cette vitesse \mathbf{u}_I à l'instant t d'un point de l'espace situé sur l'interface est donnée dans le repère de

celle-ci $\{\mathbf{n}, \mathbf{t}\}$ par :

$$\mathbf{u}_I = (\mathbf{u}_I \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + \mathbf{u}_I^t \mathbf{t} \quad (2.11)$$

La vitesse géométrique de déplacement, donnée par la composante normale de la vitesse de l'interface, est indépendante du système de coordonnées contrairement à la vitesse de l'interface elle-même. Une condition de non-glissement est souvent indiquée pour traiter la composante tangentielle de la vitesse de l'interface. De ces hypothèses, ajoutées à l'égalité des vitesses phasiques normales à l'interface, nous pouvons obtenir l'égalité des vitesses phasiques à l'interface $\mathbf{u}_0 = \mathbf{u}_1$. Nous avons donc la relation :

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \mathbf{u}_I \cdot \nabla C_k = 0 \quad (2.12)$$

Nous avons à ce moment précis une formulation presque complète du modèle à un fluide diphasique. Les équations de Navier-Stokes valident dans chaque phase et une fonction indicatrice de phase valide sur tout le domaine ainsi qu'à l'interface, associée à des relations de saut. Voici la démarche qui sera exposée ci-après :

1. Convoluer les équations locales et instantanées de chacune des phases par la fonction indicatrice C_k
2. Intégrer les relations de saut au résultat 1 et sommer les équations obtenues
3. Émettre les hypothèses simplificatrices

Etape 1 : Convolution par C_k

En multipliant les équations de Navier-Stokes de chaque phase et en utilisant 2.10, nous obtenons :

$$\begin{aligned} C_k \nabla \cdot \mathbf{u}_k &= \nabla \cdot (C_k \mathbf{u}_k) + \mathbf{u}_k \mathbf{n}_k \delta_I = 0 \\ \left(\frac{\partial C_k \rho_k \mathbf{u}_k}{\partial t} - \rho_k \mathbf{u}_k \frac{\partial C_k}{\partial t} \right) + \nabla \cdot (C_k \rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) &+ (\rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) \mathbf{n}_k \delta_I = \\ &- (\nabla C_k p_k + p_k \mathbf{n}_k \delta_I) + C_k \rho_k \mathbf{g} \\ &+ (\nabla \cdot (2C_k \mu_k \mathbf{S}_k) + 2\mu_k \mathbf{S}_k \mathbf{n}_k \delta_I) \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\text{avec } \mathbf{S}_k = 1/2 (\nabla \mathbf{u}_k + \nabla^T \mathbf{u}_k)$$

Etape 2 : Intégration et sommation avec les relations de saut

En utilisant l'équation d'avection (2.12) dans l'équation de quantité de mouvement pour développer $\partial C_k / \partial t$ et faire apparaître le saut de quantité de mouvement au travers de l'interface,

il vient :

$$\nabla \cdot (C_k \mathbf{u}_k) = -\mathbf{u}_k \mathbf{n}_k \delta_I \quad (\text{a})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_k \rho_k \mathbf{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (C_k \rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) &= -\nabla C_k p_k + C_k \rho_k \mathbf{g}_k + \nabla \cdot (2C_k \mu_k \mathbf{S}_k) \quad (\text{b}) \quad (2.14) \\ &+ (\rho_k \mathbf{u}_k (\mathbf{u}_I - \mathbf{u}_k)) \cdot \mathbf{n}_k \delta_I \\ &+ (-p_k \mathbf{I} + 2\mu_k \mathbf{S}_k) \cdot \mathbf{n}_k \delta_I \end{aligned}$$

Ce système d'équations est valable dans chaque phase ainsi qu'à l'interface. Si nous sommes ce système d'équations sur chacune des phases, et que nous utilisons la relation de saut (2.5), nous obtenons une formulation nécessitant l'hypothèse d'absence de transfert de masse permettant d'avoir la continuité du champs de vitesse à l'interface et donc la nullité du dernier terme de l'équation (2.14a). Ceci conduit à :

$$\nabla \cdot (\sum_k C_k \mathbf{u}_k) = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sum_k C_k \rho_k \mathbf{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\sum_k C_k \rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) &= -\nabla (\sum_k C_k p_k) + \sum_k C_k \rho_k \mathbf{g}_k + \nabla \cdot (\sum_k 2C_k \mu_k \mathbf{S}_k) \\ &+ \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_I \end{aligned} \quad (2.15)$$

Etape 3 : Hypothèses de simplification et modèle 1-Fluide diphasique complet

Si nous définissons une variable monofluide Φ sous la forme $\Phi = \sum_k C_k \Phi_k$, et que ce monofluide possède une masse volumique définie comme $\rho \Phi = \sum_k C_k \rho_k \Phi_k$, alors nous pouvons construire un système monofluide, valable pour l'intégralité du milieu diphasique tel que :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (\mu [\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}]) + \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_I \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = 0$$

Ce système (2.16) reste encore mal posé, car nous avons cinq équations portant sur six inconnues (\mathbf{u}, p, C, κ). Nous verrons dans la sous-section suivante comment formuler un modèle mieux posé, en reformulant le terme de tension de surface.

2.1.3 La tension superficielle : une force volumique

La tension de surface équivaut à une pression agissant normalement à l'interface entre deux fluides. La concavité de cette surface de contact est déterminante dans l'estimation de l'intensité de cette pression. La courbure κ représentative de la concavité locale de l'interface permet de

formuler la force de tension de surface en fonction de l'énergie surfacique (ou tension superficielle σ) en tout point M :

$$F_{TS}(M) = \sigma \kappa(M) \mathbf{n}_i(M) \delta_i \quad (2.17)$$

La courbure de l'interface κ est un paramètre géométrique difficile d'accès d'un point de vue numérique. Il est nécessaire d'exprimer F_{TS} en fonction d'autres paramètres propres à la résolution et donc connus plus facilement et précisément. Aucune équation ne décrivant la courbure, inconnue du problème diphasique (2.16), ni ses variations, Brackbill [BKZ92] a bâti un modèle permettant de contourner la difficulté. En sommant les forces tangentielles à l'interface sur un contour ds d'un élément de volume élémentaire, ils ont pu montrer que localement, si $\mathbf{t}(M)$ est une force tangentielle à l'interface, alors la résultante de la tension superficielle est égale à l'intégrale curviligne sur ce contour ds des tensions superficielles de tous les points M , quelque-soit M sur le contour ds . Via des transformations sur les opérateurs différentiels, nous pouvons donc obtenir une expression sur la courbure κ , fonction de la normale unitaire \mathbf{n}^u_i à l'interface :

$$\kappa = -(\nabla \cdot \mathbf{n}^u_i)(M) \quad (2.18)$$

Ainsi, la force volumique de tensions de surface peut s'écrire comme suit :

$$F_{TS}(M) = -\sigma (\nabla \cdot \mathbf{n}^u_i)(M) \mathbf{n}_i(M) \delta_i \quad (2.19)$$

Localement, le gradient du taux de présence permet de décrire la normale unitaire à l'interface comme suit :

$$\mathbf{n}^u_i = \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \quad (2.20)$$

alors que $\mathbf{n}_i(M) \delta_i = \nabla C$.

De ces équations (2.18-2.20), nous pouvons à présent écrire une formulation du modèle à un fluide diphasique bien posée, possédant cinq équations et cinq inconnues :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) &= -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (\mu [\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}]) - \sigma \left(\nabla \cdot \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \right) \nabla C \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C &= 0 \end{aligned} \quad (2.21)$$

La formulation précédente apporte un bon accord avec la philosophie de l'approximation d'un problème diphasique sur un maillage cartésien fixe, inadapté a priori à la modélisation de l'interface entre deux fluides en contact. En effet, le calcul de la courbure est implicite via les taux de présence volumiques ce qui permet de construire une modélisation différente du terme de tension de surface à l'intérieur de chaque volume élémentaire, si celle-ci est basée sur une description précise de l'interface via une approche lagrangienne (mais coûteuse et complexe en trois dimensions).

2.2 La simulation numérique pour le calcul des écoulements diphasiques incompressibles

2.2.1 La méthode des volumes finis et les domaines fictifs

Le code Thétis² est basé sur le concept de domaines fictifs. Cette approche consiste en la conceptualisation du domaine d'étude sous la forme de plusieurs sous-domaines correspondants à différents milieux (solides, poreux, fluides, phases, états thermodynamiques), vu comme un unique milieu possédant des propriétés physiques variables à la fois dans le temps et dans l'espace. Ainsi, le domaine d'étude "réel", noté Ω , est considéré comme continu, mais est subdivisé en sous-domaines dits "fictifs", qui expriment les différents états locaux de la matière. Cette subdivision est vue uniquement du point de vue de la modélisation, l'intérêt de cette démarche étant de considérer un système d'équations unique pour chaque variable physique vitesse, température, concentration, ...

Le schéma (2.1) montre le décalage entre la réalité du domaine et la vision de la modélisation qui résulte de cette approche.

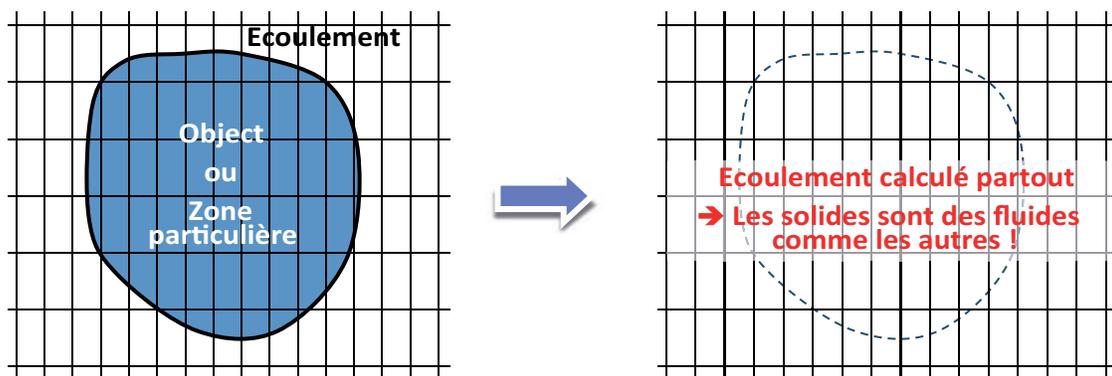


FIGURE 2.1 – Différences entre le domaine réel "physique" et le domaine modélisé via l'approche des domaines dits "fictifs".

Cette approche a été initiée par Saul'ev [Sau63] et fut développée initialement dans le laboratoire I2M-TREFLE par Jean-Paul Caltagirone [KAPC00]. Le modèle à un fluide entre dans ce cadre de modélisation, et cette approche a été étendue aux situations fluide-fluide et fluide-solide. L'introduction d'un terme de Darcy dans les équations de Navier-Stokes a permis de traiter les solides comme des fluides imperméables à très haute viscosité, et ainsi de ne traiter qu'un seul système d'équation de Navier-Stokes.

2. site internet du projet : <http://thetis.enscbp.fr>

2.2.2 Les méthodes de résolution des équations discrètes

Deux approches numériques permettent de résoudre les équations de conservation, dans le cas d'écoulements incompressibles. Les principales différences entre ces deux méthodes résident dans la manière de prendre en compte le couplage vitesse-pression du système d'équation de Navier-Stokes.

La principale difficulté vient de la présence d'hétérogénéités, dues au caractère diphasique de l'écoulement. En effet, la littérature montre que la contrainte d'incompressibilité et le couplage vitesse-pression sont des problèmes bien posés et maîtrisés lorsqu'il s'agit de milieux homogènes et monophasiques. En dehors de ces situations avantageuses, la résolution du couplage et de l'incompressibilité présente des difficultés numériques notamment concernant la résolution des systèmes linéaires.

Afin de simuler les écoulements diphasiques incompressibles, il est donc nécessaire de discrétiser le système d'équations de Navier-Stokes issu du modèle à un fluide incompressible diphasique vu précédemment (2.21). Nous verrons dans cette section ces discrétisations, le traitement du caractère incompressible de l'écoulement et quelles méthodes utiliser pour en assurer le bon calcul à moindres coûts.

La discrétisation temporelle

Par discrétisation temporelle, nous voulons signifier le découpage de l'axe du temps en un nombre fini de portions (appelées pas de temps). Cet intervalle fini peut être symbolisé par $[t_n, t_{n+1}]$ et le pas de temps sera noté et vaudra $\Delta t = t_{n+1} - t_n$. Chaque variable continue Φ sera notée Φ^n dans sa forme discrète à l'instant $t = t_n$. Ainsi, chaque dérivée continue et temporelle sera approximée au temps t_{n+1} par un développement en série de Taylor tronquées à l'ordre 1 (appelé schéma d'EULER) ou 2 (ou schéma de GEAR) selon la précision choisie.

Si nous discrétisons en temps le terme $\partial \mathbf{u} / \partial t$, nous obtenons la forme générale suivante :

$$\left. \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right|^{n+1} = \frac{\alpha \mathbf{u}^{n+1} + \beta \mathbf{u}^n + \gamma \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} \quad (2.22)$$

où les coefficients α , β et γ permettent de définir l'ordre de troncature de la série de Taylor (cf. tableau 2.1).

Le schéma d'ordre 2 nécessite de stocker plus d'informations, car l'accès au temps t_{n-1} est indispensable, ce qui impliquera une consommation mémoire plus importante. L'utilisation de ces schémas est préconisée pour les cas fortement instationnaires (schéma GEAR) ou stationnaires (EULER).

Le traitement implicite du système continu permet l'expression de tous les termes des équations de conservation au temps t_{n+1} , sauf pour le terme non linéaire advectif, linéarisé comme

	α	β	γ
Ordre 1 EULER	1	-1	0
Ordre 2 GEAR	3/2	-4/2	1/2

TABLE 2.1 – Coefficients des schémas de discrétisation temporelle et ordre correspondant.

suit :

$$(\mathbf{u}^{n+1} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n+1} \approx (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n+1} = \nabla \cdot (\mathbf{u}^{n+1} \otimes \mathbf{u}^n) - \mathbf{u}^{n+1} (\nabla \cdot \mathbf{u}^n)$$

La divergence numérique n'étant jamais totalement nulle pour les écoulements incompressibles, le terme $\nabla \cdot (\mathbf{u}^{n+1} \otimes \mathbf{u}^n) - \mathbf{u}^{n+1} (\nabla \cdot \mathbf{u}^n)$ sera discrétisé spatialement afin de traiter la non-linéarité du terme advectif. Si nous prenons comme valeurs de la masse volumique et de la viscosité, celles de l'instant t_n , alors le système discrétisé devient :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} &= 0 \\ \rho^n \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \Big|^{n+1} + \nabla \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{u}^{n+1} \otimes \mathbf{u}^n) - \mathbf{u}^{n+1} (\nabla \cdot \mathbf{u}^n)) \right) &= -\nabla p^{n+1} + \rho^n \mathbf{g} \\ &+ \nabla \cdot (\mu^n [\nabla \mathbf{u}^{n+1} + \nabla^T \mathbf{u}^{n+1}]) \\ &- \sigma^n \left(\nabla \cdot \frac{\nabla C^n}{\|\nabla C^n\|} \right) \nabla C^n \end{aligned} \quad (2.23)$$

Le couple solution de ce système $(\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1})$ est donc à déterminer. Plusieurs méthodes pour découpler ce couple existent, apportant leurs avantages et inconvénients tant d'un point de vue mise en place que d'un point de vue efficacité.

Le caractère incompressible : le couplage vitesse-pression

La contrainte d'incompressibilité est un des points majeurs de la résolution des équations de conservation du mouvement. Le champ de vitesse à l'itération t_{n+1} est solution des deux équations (2.23). Or, respecter cette contrainte est un problème de couplage. En effet, le calcul de la pression, implicite par l'ajustement de la pression au champ de vitesse afin que ce dernier soit à divergence nulle, est déterminant. L'absence de formulation explicite de la pression p^{n+1} (apparaissant uniquement dans l'équation de conservation de quantité de mouvement) rend ce calcul complexe. Plusieurs méthodes ont été développées au cours des dernières décennies afin de résoudre ce couplage, spécifique aux écoulements incompressibles.

La correction de pression

La première catégorie de méthodes de découplage temporel pour la résolution des équations de Navier-Stokes, appelées méthodes de correction de pression, nécessitent l'imposition de conditions aux limites sur la pression. Ces conditions ne sont pas toujours évidentes à énoncer et sont beaucoup plus sensibles au rapport de masses volumiques lors de la traversée d'une interface entre deux fluides. Leur utilisation n'a pas été choisie au cours de cette thèse de doctorat, car le principal défaut énoncé précédemment était trop important lors de la mise en place des cas de changement de phase. D'autre part, il est souvent nécessaire de faire un découpage en temps très fin (utilisation de petits pas de temps) afin de pouvoir résoudre une physique plus précise. Les conditions de CFL (définition dans la section portant sur les méthodes de suivi d'interface) utilisées au cours des études présentées dans les chapitres suivants auraient conduit à des temps de calcul prohibitifs.

La méthode du Lagrangien Augmenté

L'autre catégorie de résolution du couplage vitesse-pression et le traitement de l'incompressibilité de l'écoulement, appelée Lagrangien Augmenté, consiste à réécrire le système d'équation de Navier-Stokes du modèle 1-fluide dans l'hypothèse des domaines fictifs, sous une forme semi-discrète en temps (2.24). L'objectif de l'utilisation de cette méthode est de se passer d'une réelle connaissance et imposition de conditions aux limites sur la pression. De plus, il est important de pouvoir traiter de grands ratios de masse volumique aux interfaces, et de les traiter pour de grands pas de temps ($CFL \approx 1$). Nous allons voir comment la méthode du Lagrangien Augmenté peut aider à cette résolution sous contraintes.

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \Big|^{n+1} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1} \right) &= -\nabla p^{n+1} + \rho \mathbf{g} \\ &+ \nabla \cdot (\mu [\nabla \mathbf{u}^{n+1} + \nabla^T \mathbf{u}^{n+1}]) + \mathbf{F}_{TS}^n \\ \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} &= 0 \end{cases} \quad (2.24)$$

Si nous considérons que numériquement, l'écoulement est compressible entre n et $n + 1$, tant qu'une solution stationnaire n'est pas atteinte, nous pouvons dire que la conservation de la masse fournit une équation sur la pression telle que :

$$p^{n+1} = p^n - dp \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} \quad (2.25)$$

En introduisant (2.25) dans (2.24), nous pouvons obtenir un nouveau système (2.26), qui correspond à la formulation par le Lagrangien Augmenté du modèle 1-fluide.

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \Big|^{n+1} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1} \right) &= -\nabla p^n + dr \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1}) + \rho \mathbf{g} \\ &+ \nabla \cdot (\mu [\nabla \mathbf{u}^{n+1} + \nabla^T \mathbf{u}^{n+1}]) + \mathbf{F}_{TS}^n \\ p^{n+1} &= p^n - dp \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} \end{cases} \quad (2.26)$$

Ce nouveau système nécessite la résolution d'une minimisation et la recherche d'un point selle sur le couple vitesse-pression. Les paramètres dp et dr introduits par le Lagrangien Augmenté doivent être fixés par l'utilisateur, mais ne doivent pas rester constants afin d'assurer correctement la résolution du système (2.26). Nous posons $dp = dr$ et nous savons que localement il est nécessaire d'adapter la valeur de dr afin de correctement prendre en compte la pénalisation de la divergence de vitesse induite par le terme $dr\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1})$, nous utiliserons donc des méthodes d'adaptation automatique du paramètre de Lagrangien Augmenté.

Ces méthodes, développées plus sensiblement dans [VCLR04] et dans [VSC+10] permettent de composer avec une valeur adaptée au problème mutliphasique considéré automatiquement. Ainsi, à la place de fixer de manière soit empirique soit arbitraire le paramètre dr en début de simulation, il est proposé de recalculer un dr optimal à chaque itération temporelle. dr devient donc une fonction du temps et de l'espace et doit rester deux à trois ordres supérieurs à la valeur maximale du terme prépondérant dans les équations de conservations.

Posons L_0 , t_0 , u_0 et p_0 les valeurs de référence pour l'unité spatiale, l'unité de temps, l'unité de vitesse et l'unité de pression. Si nous considérons une itération en temps du Lagrangien Augmenté de l'équation de conservation de la quantité de mouvement (2.26) dans une forme adimensionnée, alors nous pouvons la réécrire :

$$\begin{aligned} \rho \frac{u_0}{t_0} \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \rho \frac{u_0^2}{L_0} (\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1}) - \frac{u_0}{L_0^2} (dr \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1})) = -\frac{p_0}{L_0} \nabla p^n + \rho \mathbf{g} \\ + \frac{u_0}{L_0^2} \nabla \cdot (\mu [\nabla \mathbf{u}^{n+1} + \nabla^T \mathbf{u}^{n+1}]) + \frac{\mathbf{F}_{TS}}{L_0^2} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Si nous multiplions l'équation (2.27) par $\frac{L_0^2}{u_0}$, alors nous pouvons mettre en évidence le terme dr du Lagrangien Augmenté en face des termes de pression, de viscosité, d'inertie et de gravité et nous obtenons :

$$\begin{aligned} \rho \frac{L_0^2}{t_0} \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \rho u_0 L_0 (\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1}) - (dr \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1})) = -\frac{p_0 L_0}{u_0} \nabla p^n + \frac{L_0^2}{u_0} \rho \mathbf{g} \\ + \nabla \cdot (\mu [\nabla \mathbf{u}^{n+1} + \nabla^T \mathbf{u}^{n+1}]) + \frac{\mathbf{F}_{TS}}{u_0} \end{aligned} \quad (2.28)$$

Nous pouvons dès lors constater que dr est comparable avec une viscosité et peut être redéfini comme :

$$dr(t, M) = \kappa \max \left(\rho(t, M) \frac{L_0^2}{t_0}, \rho(t, M) u_0 L_0, \rho(t, M) \frac{L_0^2}{u_0} g, \frac{p_0 L_0}{u_0}, \mu(t, M), \frac{\sigma}{u_0} \right) \quad (2.29)$$

Cette approche peut de plus être étendue aux autres forces, comme celle de Coriolis ou aux termes sources. Cette approche est consistante avec les équations de Navier-Stokes pour chacune des phases. La définition *a priori* des paramètres dimensionnels permettant de définir $dr(t, M)$ est un des points faibles de cette méthode, mais une autre variante a été étendue dans [VSC+10]. L'approche du Lagrangien Augmenté Adaptatif Algébrique (LAAA ou 3AL) montre

qu'en traitant le paramètre de Lagrangien Augmenté comme un terme algébrique rendant prépondérant certains coefficients du système linéaire, nous pouvons alors résoudre les équations de conservation, en les forçant à respecter certaines contraintes. Les détails de cette méthode sont dans l'article de Vincent et al. [VSC⁺10].

La discrétisation spatiale

Nous utiliserons la méthode de discrétisation spatiale de type Volume Finis pour les équations de conservation. Le maillage est structuré orthogonal, et une approche de type Markers And Cells (MAC) fera que les grilles de discrétisation sont décalées en vitesse et en pression. La figure (2.2) permet de définir les trois grilles, celle de pression en losanges bleus, la grille de vitesse en flèches oranges et la grille de viscosité en ronds verts. Ce décalage entre les champs de vitesse et de pression permet d'avoir accès naturellement à la divergence du champ de vitesse sur les noeuds de pression, au centre des volumes élémentaires de contrôle, et permet aussi d'éviter les oscillations de pression induites par les maillages de type collocatif.

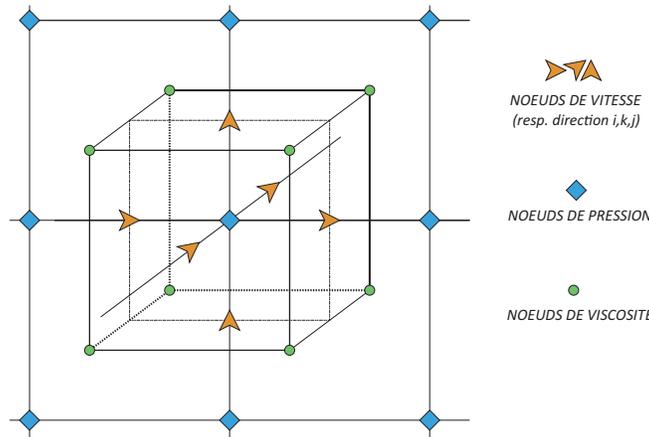


FIGURE 2.2 – Maillage de type MAC, décalé en grille pression-vitesse-viscosité, en 3D.

La méthode des Volumes Finis est basée sur l'intégration locale de l'équation (2.26), sur chaque volume de contrôle élémentaire, délimité par les noeuds de pression et centré sur les noeuds de vitesse. Un schéma centré d'ordre 2 permet d'approcher les termes diffusifs et du Lagrangien Augmenté spatialement, le terme convectif nécessitant une interpolation du champ de vitesse sur les limites des volumes élémentaires. Pour effectuer cette interpolation, plusieurs méthodes sont disponibles, notamment les schémas de type Centré (au second ordre, correspondant à une approximation de la variable sur la limite via une série de Taylor tronquée à l'ordre 1) et les schémas de type Upwind (au premier ordre, où l'on remplace la valeur de la variable aux limites du volume par celle située en amont/aval suivant son signe). Patankar [Pat80] réalise une revue des schémas numériques existants, et détaille leur utilisation en se basant sur leur stabilité vis-à-vis de la diffusion numérique et de leur précision.

2.3 Les méthodes de suivi d'interfaces

2.3.1 Suivi de front

Dans un premier temps, l'idée peut être d'utiliser des marqueurs pour repérer l'interface. Ces marqueurs peuvent être ensemencés au niveau de l'interface de façon à former un second maillage autour de celle-ci, maillage formé par des éléments fictifs. Ce type de méthodes, appelées méthodes de suivi de front ou "Front Tracking", permettent de connaître très précisément la position la courbure et la normale (et donc l'orientation) de l'interface et donc d'évaluer les forces visqueuses et capillaires dans les différentes équations de conservation. Cette méthode a été introduite par Tryggvason dans les années 1990 [UT92], avant d'être utilisée par Bunner et Tryggvason en 2001 [TBE⁺01] pour simuler les mouvements tridimensionnels créés par une suspension de bulles dont les propriétés sont typiquement un nombre de Bond compris entre 1 et 5 et un nombre de Reynolds situé entre 20 et 30.

Ces méthodes sont toutefois limitées à des écoulements possédant des interfaces peu déformées. En effet, la distribution des marqueurs est très complexe à gérer, par exemple lors de rupture ou de coalescence de gouttes. Plusieurs travaux ont permis de pallier à ce problème et de simuler par exemple la coalescence de deux bulles[SJ02]. Shin et Juric[SJ02] ont utilisé deux représentations de l'interface, l'une s'appuyant sur un maillage mobile (et donc évolutif), l'autre étant basée sur une fonction indicatrice de phase (et continue). Lors du calcul, l'interface évolue avec le maillage mobile, et périodiquement (toutes les centaines de pas de temps environ), la fonction indicatrice de phase est calculée et l'interface est "reconstruite" à partir du champ continu. Ces méthodes sont toutefois limitées par leur mise en place souvent coûteuse en temps de calcul. Par ailleurs, l'utilisation d'une reconstruction d'interface fait perdre les spécificités intrinsèques du Front Tracking.

2.3.2 Suivi d'interface en volume avec reconstruction

Une méthode permettant de représenter les interfaces peut consister à utiliser une fonction indicatrice de phase, continue dans l'espace et qui contient toute l'information sur la présence d'une phase en un point donné de l'écoulement. Par exemple, on peut décrire un écoulement diphasique eau-huile en donnant la valeur de la fonction de phase égale à 0 dans les cellules qui ne contiennent que de l'eau et inversement égale à 1 quand il n'y a que de l'huile. L'interface est alors définie comme le lieu des points où la fonction passe de 0 à 1.

De plus, cette fonction de phase est physiquement interprétable : c'est localement la fraction volumique de phase, appelée aussi taux de présence de phase (Volume Of Fluid, notée VOF par la suite). La fraction volumique de phase doit alors être transportée dans le domaine en résolvant son équation d'évolution (de nature hyperbolique, type équation d'advection) puis de reconstruire la distribution dans le domaine des différentes propriétés thermodynamiques à l'aide des valeurs de la fraction volumique et de ses gradients. Le caractère continu permet

aussi de bien simuler la rupture ou la coalescence, la transition d'un écoulement stratifié à un écoulement à phase dispersée, etc. Cependant, les très fortes variations de la fonction lors de la traversée de l'interface sont numériquement très difficiles à représenter. Si le schéma est trop diffusif (par exemple avec l'utilisation de la méthode VOF-TVD, ou Total Variation Diminishing, défini ci-après), il peut apparaître des zones d'étalement numériques (non-physiques) rendant le calcul moins précis sur la conservation du volume tel que $C \geq 0.5$. L'idée est alors d'exploiter un schéma bien conçu dans son approche "déplacement de front sans oscillations ni diffusion". On retiendra le schéma VOF-PLIC, pour "Piecewise Linear Interface Construction", qui consiste en une reconstruction géométrique linéaire par morceaux de l'interface dans chaque maille.

VOF-PLIC

Cette méthode, introduite par Youngs [YMB82] a été implémentée et validée dans le code Thétis du laboratoire I2M-TREFLE [VLL⁺07] et [BC01]. Elle peut être définie comme étant une reconstruction linéaire par morceau de l'interface entre deux fluides, à partir de la fraction volumique contenue dans chaque volume élémentaire de contrôle. La spécificité de cette méthode est que l'inconnue est bien la position de l'interface avant reconstruction, mais grâce à la reconstruction opérée sur le champ de fraction volumique, de type affine par morceau, nous pouvons déterminer précisément cette position à l'issue.

Une méthode lagrangienne permet ensuite de déplacer l'interface (étape d'advection du champ de fraction volumique) via l'utilisation du champ de vitesse du fluide. Enfin, on évalue les flux volumiques qui passent entre les différentes cellules pour construire le nouveau champ de fraction volumique. La figure (2.3) expose la construction linéaire par morceaux de l'interface et donc sa localisation précise.

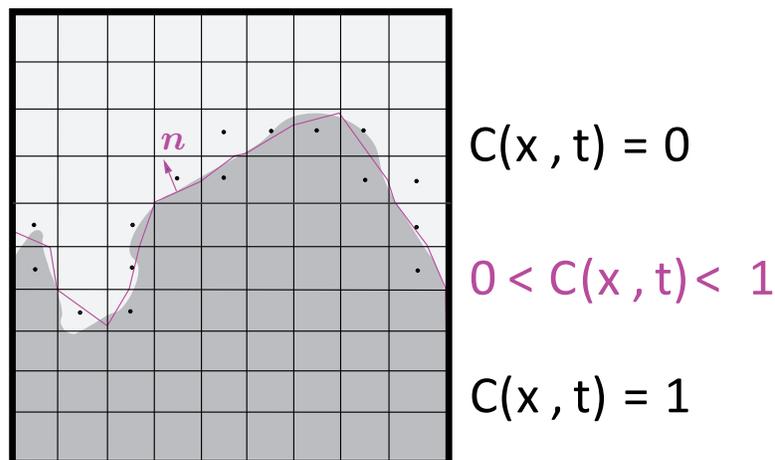


FIGURE 2.3 – Repérage de l'interface via la méthode VOF-PLIC.

VOF-TVD

La méthode VOF-TVD [VC99], basée sur l'utilisation d'un schéma de discrétisation de type Lax-Wendroff pour l'équation d'advection, supprime les oscillations numériques via des schémas d'ordre élevés dans les zones à fort gradient de fraction volumique et des schémas d'ordre 2 loin de ces zones. Celle-ci est restreinte sur 3 mailles dans le cas d'interfaces faiblement cisillées. Malgré une diffusion numérique non nulle, la méthode VOF-TVD s'est montrée performante en présence de forces de tension superficielle. Cette méthode n'a pas tendance comme la précédente à générer des ruptures non physiques de l'interface.

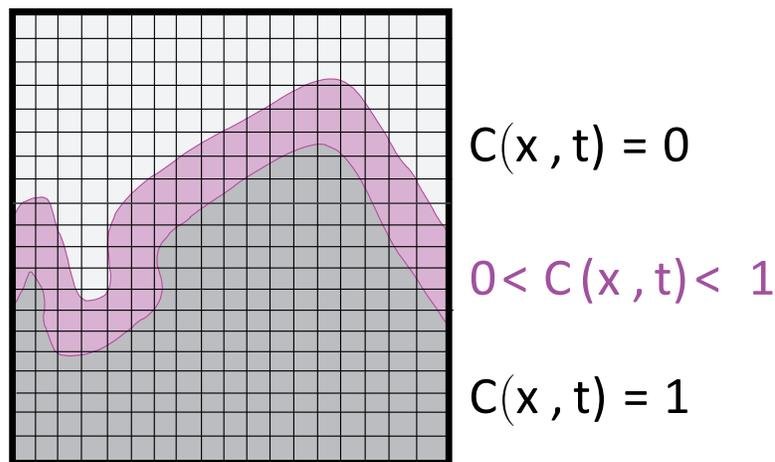


FIGURE 2.4 – Repérage de l'interface via la méthode VOF-TVD.

La figure (2.4) montre la diffusion numérique de l'interface, pouvant être assimilée à une vraie interphase, mais dégradant la localisation de la fraction volumique médiane symbolisant la réelle interface.

2.3.3 Suivi d'interface sans reconstruction

On peut utiliser un autre type de fonction pour caractériser l'interface, fonction qui doit être plus régulière et moins raide pour être traitée de meilleure manière par les schémas numériques. Cette fonction, appelée Level-Set (décrite dans [TVEC08, OS88]) pour fonction distance signée, est définie comme étant une fonction nulle sur l'interface et étant positive dans l'une des phases et négative dans l'autre avec une pente unitaire. La valeur de la fonction distance correspond au nombre d'unités qui sépare l'endroit localisé par cette valeur de l'interface.

Cette approche permet de simuler un large éventail de phénomènes physiques multiphasiques comme la croissance de cristaux métalliques, le changement de phase qui fait l'objet de cette étude, la ligne triple (exemple d'une lentille à l'interface entre deux milieux). Le principal inconvénient de cette méthode est la perte de masse numérique engendrée par une réinitialisa-

tion nécessaire à chaque pas de temps pour assurer un gradient unitaire de la fonction qui a tendance à dévier de cette valeur.

2.4 Le traitement des conditions aux limites

2.4.1 Les conditions aux limites pour les écoulements

Le traitement des conditions aux limites du domaines en vitesse³ est opéré de manière implicite via l'ajout d'un terme vectoriel de pénalisation d'ordre 1, dans la matrice de résolution. Le concept de la pénalisation est évoqué dans le paragraphe suivant (le traitement des obstacles).

$$-\left. \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} \right|_{S, \Omega} = \mathbf{Bi}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_\infty) \quad (2.30)$$

Le membre de droite de l'équation (2.30) est le terme de pénalisation évoqué. \mathbf{n} est la normale unitaire à la surface S , limitant le domaine Ω de calcul.

La matrice \mathbf{Bi} pilote le type de pénalisation sur la limite, quand \mathbf{u}_∞ est la valeur imposée sur la limite considérée à la vitesse. Cette technique est inspirée des conditions de type Fourier permettant une imposition de la température ou d'un flux en thermique, et consiste donc à construire une condition à la limite en vitesse généralisée, de type flux surfacique.

Si les coefficients diagonaux de la matrice \mathbf{Bi} tendent vers 0, nous aurons une condition de type Neumann (flux de vitesse normal nul) alors que si ils tendent vers ∞ , nous aurons une vitesse imposée égale à \mathbf{u}_∞ sur la limite (condition de type Dirichlet). Nous pourrions via cette méthode imposer différents types de conditions aux limites assez facilement sans changer la discrétisation de la matrice.

2.4.2 La modélisation des obstacles

De la même façon, un obstacle doit être traité comme un fluide particulier afin d'assurer une cohérence dans notre approche numérique. L'écoulement doit être résolu, même au travers d'un obstacle et l'ajout d'un terme supplémentaire à l'équation de Navier-Stokes du mouvement est nécessaire.

Ce terme source permet de prendre en compte le caractère fixe du substrat, en le considérant comme un milieu poreux. Le terme de Brinkman \mathbf{Br} , adapté d'une loi de type Darcy et agissant comme un terme de pénalisation, influe au travers de la perméabilité de la zone considérée sur l'écoulement :

$$\mathbf{Br} = -\frac{\mu}{K}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0) \quad (2.31)$$

3. Le Lagrangien Augmenté permet d'éviter l'imposition de conditions aux limites sur la pression, via son traitement implicite du champ de pression

avec toujours μ la viscosité et K la perméabilité. Si nous attribuons une valeur particulière à la perméabilité dans une zone donnée, nous pouvons donc pénaliser l'écoulement dans cette zone. Ainsi, si une maille possède une perméabilité infinie, le comportement est de type fluide car le terme devient nul et aucune modification des équations de Navier-Stokes n'est réalisée. Au contraire, lorsque la valeur de K tend vers 0, nous devons pour assurer une compatibilité numérique annuler ce terme et donc faire tendre \mathbf{u} vers la valeur désirée \mathbf{u}_0 et ainsi si cette valeur est nulle, nous aurons une zone solide imperméable.

Cette méthode de pénalisation à l'ordre 1 est donc une approche intéressante pour imposer une valeur donnée à une variable dans une zone précise. Nous verrons que cette approche sera aussi utilisée pour réaliser une méthode d'imposition d'angle de contact statique sur une paroi ou un obstacle.

2.4.3 L'angle de contact et la mouillabilité apparente

Comme évoqué précédemment, un enjeu majeur de la simulation numérique de domaines multiphasiques est le traitement de la courbure à l'interface entre les fluides en présence. Ce traitement est important pour le calcul du terme de tension surfacique, et les efforts actuels sont focalisés sur son amélioration. De plus, nous avons pu voir que les méthodes de suivi d'interface utilisées sont pour la plupart une reconstruction géométrique de cette interface, et sont grandement influencées par le type de maillage utilisé pour la discrétisation spatiale des équations résolues. Notre approche originale et basée sur la méthode de type VOF-PLIC, motivée par son côté conservatif et offrant de nombreux avantages quant à la possibilité de coalescence numérique de gouttes par exemple, possède donc aussi des désavantages. Nous proposons ici une estimation basée sur l'utilisation du VOF-PLIC afin de construire une fonction annexe permettant une meilleure approche de la courbure locale et donc un affinement du calcul du terme de tension superficielle. De plus, nous verrons comment mettre en place via une approche par pénalisation une méthode pour l'imposition de propriétés de mouillage sur une paroi.

Cette méthode constitue une première contribution à ces travaux de thèse, et offre un cadre d'étude assez vaste. Nous verrons par la suite certains exemples et certaines études originales s'appuyant sur cette méthode et permettant au passage de l'éprouver et de tenter de prouver qu'elle pose les bases stables d'études plus complexes avec une approche pourtant simplifiée des problématiques de mouillage. Les choix développés ci-après montrent une réflexion poussée sur l'approche utilisateur de la méthode et sur la limitation de l'utilisation d'hypothèses réductrices ou contraignantes.

Smooth-VOF : lissage contrôlé et amélioration du calcul de la courbure

Différentes méthodes de lissage de la fonction issue du Volume Of Fluid existent. Nous pourrions citer par exemple Lafaurie et al. [LNS⁺94] qui a développé un filtre de type Laplacien qu'il applique sur la fonction issue du VOF, répétant ce filtrage n fois (typiquement 2 fois) et

utilisant ainsi les cellules voisines à l'interface pour réaliser le lissage. La figure (2.5) montre l'utilisation des voisins en comparaison avec la méthode que Brackbill [BKZ92] a développée pour lisser tant bien que mal l'interface. L'approche de Popinet et al. [Pop09] est aussi intéressante. Il propose de passer par une fonction hauteur afin de recalculer la courbure moyenne via des différences finies appliquées sur la dérivée de cette même fonction hauteur. Ces méthodes présentent toutes des points positifs et négatifs, mais notre approche doit permettre de traiter à la fois une courbure améliorée et permettre aussi l'imposition d'un comportement de mouillage précis. Nous développerons donc une nouvelle approche.

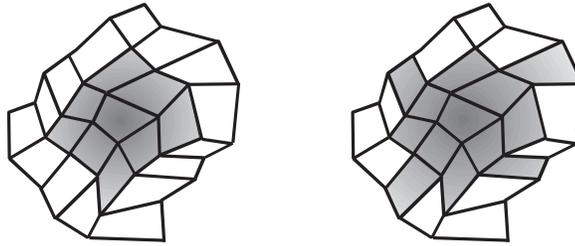


FIGURE 2.5 – Technique de lissage par Brackbill [BKZ92] (à gauche) et Lafaurie [LNS+94] (à droite) : stencil nécessaire en gris sombre.

Le gradient de la fonction issue du VOF-PLIC est conceptuellement restreint sur une maille. La nécessité d'effectuer une dérivation au second ordre pour approcher la courbure et améliorer le calcul de la tension de surface nous a mené à mettre en place une nouvelle approche. Un lissage de la fonction issue du VOF-PLIC, que nous nommerons Smooth VOF [PVL+10] (SVOF), est donc mis en place afin de permettre un calcul de la courbure locale plus précis. La notation de la fonction issue du SVOF sera C^S dans la suite de ce manuscrit.

Cette fonction a pour unique but d'améliorer le calcul discret de la courbure locale, mais ne doit en aucune manière remplacer la fonction VOF-PLIC, pour respecter la conservation de la masse intrinsèque à VOF-PLIC. Néanmoins, SVOF sera issue du VOF-PLIC. En effet, la fonction SVOF se doit de respecter le critère suivant : respecter la localisation du $C(M) = 0.5$ en tout point M et donc avoir $C^S(M) = C(M) = 0.5$, afin de pouvoir baser le calcul des moyennes des masses volumiques et des viscosités via cette approche, et ainsi caractériser le bon fluide.

Smooth-VOF a été bâti en partant du besoin suivant : nous voulons régulariser notre fonction VOF-PLIC, sans accentuer la diffusion comme peut le faire la méthode VOF-TVD. Nous devons donc diffuser sur une épaisseur fixée la fonction VOF-PLIC dans la direction normale à l'interface, donc selon ∇C . Ce constat nous a conduit à conceptualiser notre approche avec un modèle physique de diffusion d'un scalaire (comme la diffusion de la chaleur ou la diffusion d'une espèce chimique). Par exemple, la diffusion de l'espèce F s'exprime via l'équation suivante :

$$\frac{\partial F}{\partial t} - \nabla \cdot (\alpha \nabla F) = 0 \quad (2.32)$$

en considérant α strictement positif, et correspondant à la diffusivité de l'espèce. La longueur de diffusion δ peut être exprimée en fonction d'un temps caractéristique τ_D et de ce coefficient α . Ainsi, la longueur de diffusion obéit à l'équation suivante :

$$\delta = \sqrt{\tau_D \alpha} \quad (2.33)$$

Si nous fixons le paramètre de diffusion α à une valeur unitaire, alors nous pouvons voir que le temps caractéristique de diffusion est proportionnel au carré de la longueur de diffusion. Ainsi, en discrétisant l'équation précédente, pour $\alpha = 1$, nous avons :

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\delta^2}{\tau_D} \nabla F^{n+1} \right) + F^{n+1} = F^n \quad (2.34)$$

Si à présent, nous résolvons l'équation (2.34) N fois, nous aurons $1 \leq n \leq N - 1$ et ainsi $\tau_D = N \Delta t^F$, et si nous avons en condition initiale $F^0 = Cte$, alors nous aurons une diffusion contrôlée sur une épaisseur δ , avec un maintien de $F = F^0$ loin de la zone de diffusion.

L'analogie est donc faite avec la fonction issue du VOF-PLIC, notée donc C et permettant de former la nouvelle fonction SVOF C^S . Une équation de type Helmholtz est à résoudre avec comme condition initiale $C^{S,0} = C$:

$$-\nabla \cdot D \nabla C^{S,n+1} + C^{S,n+1} = C^{S,n} \quad (2.35)$$

avec D un coefficient de diffusion à exprimer en fonction du maillage et d'une discrétisation en temps particulière. Si la diffusion est décrite en N étapes, alors notre temps caractéristique de diffusion est $\tau_D = L^2/D = N \Delta t^F$. En fixant D à la valeur $Li \Delta h^2 / N \Delta t^F$, avec Li la distance de diffusion de part et d'autre de l'interface repérée par $C^S = 0.5$ (en nombre de mailles, donc sans dimension), et Δh une dimension locale de la grille de discrétisation utilisée, l'équation (2.35) est discrétisée implicitement en espace via les conventions des volumes finis, en schéma centré, afin d'être consistante avec les approximations opérées sur les équations de Navier-Stokes. Le pas de temps interne Δt^F est choisi unitaire ici. L'algorithme de résolution de la fonction SVOF est présenté en (Algorithme 1). Après résolution, nous obtenons la fonction C^S telle que décrite dans les besoins. La figure 2.6 montre les différences entre VOF-PLIC et SVOF, et notamment l'isoligne 0.5 commune.

Une validation a été réalisée dans la publication de Pianet et al. [PVL⁺10] dans laquelle il a été démontré l'intérêt de cette méthode pour la simulation de remontée de bulles de gaz dans un fluide très visqueux (acier liquide). La figure (2.7) montre l'intérêt de cette méthode sur un benchmarking réalisé dans cette publication.

De plus, le modèle de tension de surface de Brackbill [BKZ92], appliqué via la méthode VOF était de mauvaise qualité du fait de la mauvaise prédiction de la courbure locale. L'utilisation de la méthode SVOF pour la prédiction de ce terme de tension superficielle est donc intéressant, la

Algorithm 1 Procédure de lissage de la fonction VOF pour obtenir la fonction SVOF

$$F^1 = C$$

for $k = 1 \rightarrow N - 1$ **do**

$$-\nabla \cdot \frac{Li\Delta h^2}{N} \nabla C^{S,k+1} + C^{S,k+1} = F^n$$

$$F^{k+1} = C^{S,k+1}$$

end for

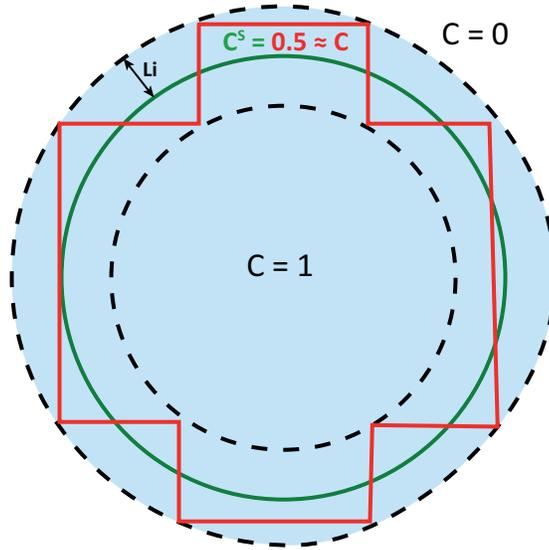


FIGURE 2.6 – Repérage de l’interface via une méthode Smooth-VOF (vert, courbe centrale) et comparaison avec VOF-PLIC (rouge, créneaux).

formulation de l’équation de conservation de la quantité de mouvement issue du système (2.21) devenant :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (\mu [\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}]) - \sigma \left(\nabla \cdot \frac{\nabla C^S}{\|\nabla C^S\|} \right) \nabla C^S \quad (2.36)$$

avec le C^S issu de la fonction C du VOF-PLIC.

L’angle de contact : pénalisation de la fonction SVOF

La littérature des vingt dernières années, avec notamment les travaux [Dus79] ou de [MS09], [ROT⁺08], [SH09]) est assez abondante sur le sujet du traitement numérique de l’angle de contact. Le plus souvent, une condition de glissement est imposée sur la paroi dont nous voulons modifier les propriétés de mouillage. Cette condition a été démontrée comme nécessaire par Dussan [Dus79]. Une relation de fermeture à la paroi avec l’angle de contact est aussi nécessaire. De la même manière, il est devenu commun d’appliquer à la fois un loi de comportement

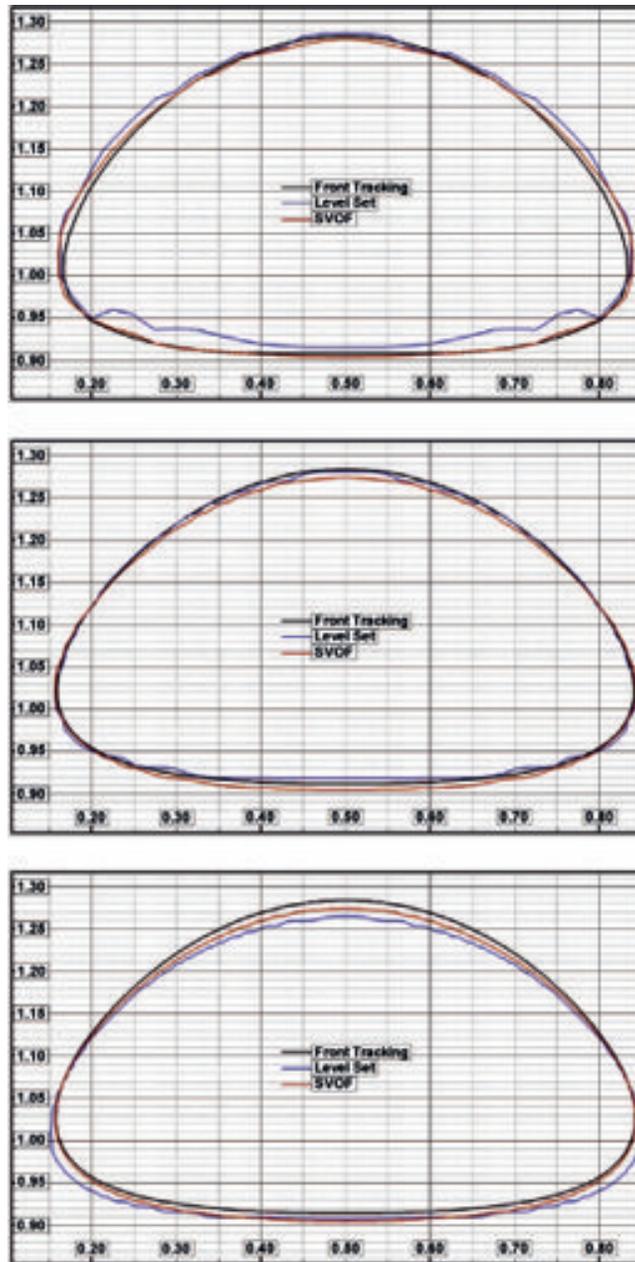


FIGURE 2.7 – Comparaison entre VOF-PLIC, Front-Tracking et SVOF sur l’ascension d’une bulle d’air dans de l’eau, [PVL⁺10].

pour l’angle en dynamique, et d’imposer un angle statique sur les parois. Ces méthodes sont éprouvées et performantes (par exemple dans [LJBM07]) mais biaisent la liberté de mouvement des fluides proches de la paroi et surtout demandent de connaître a priori l’angle de contact dynamique et l’interface, ce qui n’est pas le cas dans les problèmes réels. C’est pour cela que nous avons voulu mettre en place une approche basée sur l’imposition d’un angle statique, sans contrainte sur l’angle de contact dynamique.

De la même manière que nous avons fait appel à des méthodes de pénalisation à l'ordre 1 pour imposer une contrainte sur la présence d'obstacle dans les équations de Navier-Stokes, nous pouvons nous appuyer sur la méthode SVOF pour mieux appréhender les propriétés de mouillabilité d'une paroi solide. En effet, il peut être judicieux d'utiliser cette méthode dans le cadre de la mouillabilité et de l'imposition d'un angle de contact statique ou dynamique du fait que cette voie permet à la fois de retraiter avec efficacité le terme de tension de surface (et donc les phénomènes au point triple de coexistence entre les fluides et le solide) et permet de ne pas corrompre la distribution spatiale de la réelle fonction de suivi d'interface et de fluides.

Pour effectuer cette pénalisation, nous avons ajouté un terme d'imposition de la variable C^S dans l'équation (2.35) afin de réaliser le même type de contrainte que pour la pénalisation de type Brinkman dans les solides :

$$-\nabla \cdot D\nabla C^{S,n+1} + C^{S,n+1} + B_S (C^{S,n+1} - C_\infty^S) = C^{S,n} \quad (2.37)$$

où le terme B_S est le terme de pénalisation contrôlant le comportement du milieu en fonction de la localisation du point d'intérêt et où C_∞^S est une valeur adaptée de la fonction lissée SVOF pour obtenir l'angle de contact désiré. Cette grandeur variera elle aussi entre 0 (paroi parfaitement non mouillante) et 1 (paroi mouillante totalement).

Afin de calibrer le rapport entre l'angle de contact et la valeur de pénalisation C_∞^S , R. Guillaument [Gui10] a réalisé une confrontation numérique-expérimentale entre les expériences de Wang et al. [WR09] d'impact de gouttes sur paroi horizontales et de Fujimoto et al. [HF07] sur parois inclinées et des conditions identiques, en faisant varier la valeur de pénalisation. Dans un premier temps, une étude pour un nombre de Weber compris entre 0 et 1 a été menée, la conclusion étant qu'une bijection existe entre la valeur pénalisée à la paroi et l'angle de contact statique apparent. Cette première étude a permis de développer une relation rappelée en (2.38), permettant l'utilisation de ce modèle de manière simplifiée pour l'utilisateur et rappelant cette bijection.

$$C_\infty = \begin{cases} 1 & \text{si } 0 \leq \theta_s < 15 \\ 7,79 \cdot 10^{-7} \theta_s^3 - 1,89 \cdot 10^{-4} \theta_s^2 + 4,51 \cdot 10^{-3} \theta_s + 9,49 \cdot 10^{-1} & \text{si } 15 \leq \theta_s \leq 150 \\ 0 & \text{si } 150 \leq \theta_s \leq 180 \end{cases} \quad (2.38)$$

Cette relation a été utilisée tout au long de ce manuscrit, mais une étude plus approfondie, réalisée en fin de thèse et développée en annexe (A), a permis d'affiner cette régression via une loi de type fonction gaussienne. Cette étude a été portée en annexe, afin de mieux comprendre la manière dont elle est réalisée et de comprendre les choix réalisés. Nous attirerons l'attention du lecteur sur le fait que cette relation doit être la plus à même de capter de manière précise les faibles fluctuations de l'angle de contact pour des C_∞ donnés. L'utilisation d'une relation plus précise n'a pas été mise en place avant, mais il convient de mettre en regard les résultats

qui suivent vis-à-vis de cette remarque.

La conclusion de ces validations a été un point important et il sera évoqué dans la sous-section suivante. L'imposition d'un angle statique uniquement permet dans tous les cas de capturer une dynamique au niveau de la ligne triple, sans pour autant y trouver une déviation importante avec la réalité des expériences. Il semble donc que l'imposition d'un angle apparent statique puisse suffire, via cette approche, à réaliser des simulations précises, même pour les angles de contact dynamiques.

Vérification numérique - Dépôt d'une goutte sur une surface plane

De nombreuses références ([LJBM07] par exemple, faisant office de référence dans les résultats suivants) sur l'étude de gouttes sur des surfaces planes, expériences ou simulations numériques, sont importantes pour valider la méthode concernant l'imposition d'une propriété de mouillabilité, et pour étudier son originalité. Le premier exemple de vérification de cette méthode sera donc basé sur la confrontation de cas numériques avec des expériences réelles et virtuelles de gouttes posées ou déposées, tendant vers une position d'équilibre imposée par l'angle de contact statique apparent. Cet angle est pénalisé sur la paroi en contact avec le liquide via la méthode précédemment évoquée.

Une goutte déposée sur une surface a selon la mouillabilité de celle-ci, tendance à prendre une forme respectant l'angle de contact (macroscopique) à l'équilibre. Plus la surface sera mouillante au liquide, plus la goutte aura tendance à s'étaler, montrant une affinité avec le matériau permettant de minimiser l'énergie surfacique, et respectant l'équation de Young (1.7). Cette affinité est observable expérimentalement et numériquement en regardant l'angle de contact à l'équilibre et les propriétés géométriques de l'étalement de la goutte. Enfin, à l'équilibre, la pression interne est supérieure à la pression ambiante, et cette surpression est quantifiable.

Nous nous intéresserons à une goutte sphérique d'eau 2D (donc un disque), déposée sur une paroi sans rugosité et solide, dans une enceinte fermée sans confinement. Cette goutte possède un diamètre de 1mm . Afin de vérifier une condition de CFL correcte, les discrétisations temporelle et spatiale sont calibrées en fonction d'une vitesse de référence purement gravitaire ($v_0 = \sqrt{2gR}$) qui est supposée être la vitesse limite que la goutte pourra atteindre. L'étude sera faite en deux dimensions, afin d'optimiser les temps de calculs, l'objectif étant de vérifier les angles de contact à l'équilibre et le bon accord en terme de pression vis-à-vis de la pression de Laplace (et donc indirectement, de vérifier la courbure via la méthode SVOF) La paroi inférieure aura une propriété de mouillage imposée par le modèle de mouillabilité et les autres conditions limites seront, quant à elles, de types parois imperméables à vitesse nulle. Toutes les informations concernant la géométrie et les conditions aux limites sont rappelées sur la figure (2.8).

Les paramètres numériques ont été fixés entre chaque cas, notamment le maillage sur grille

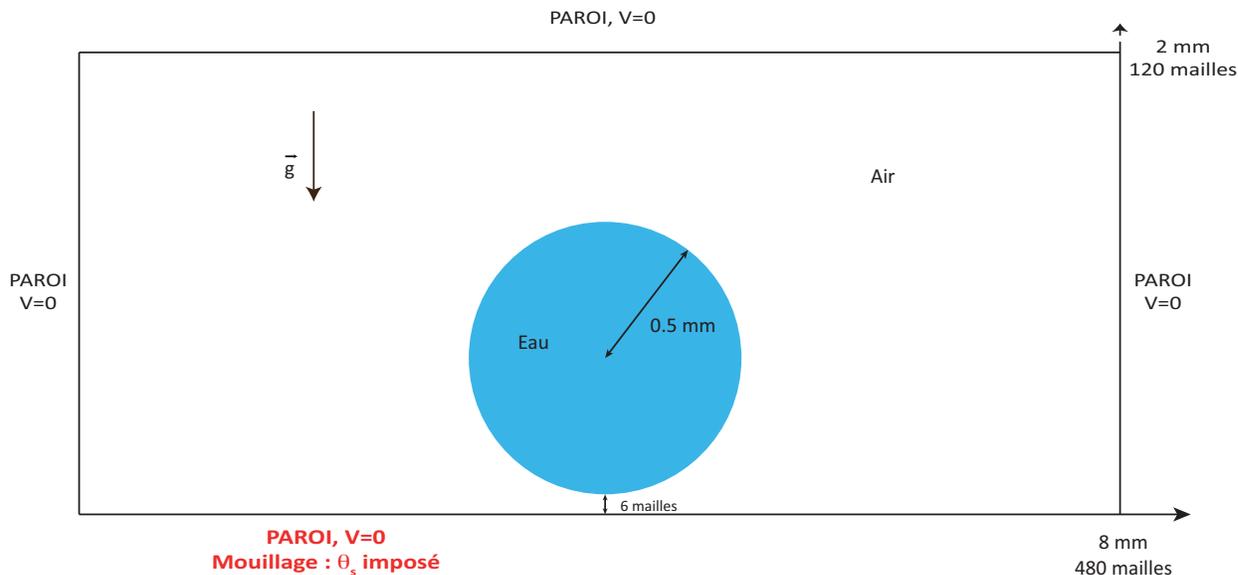


FIGURE 2.8 – Condition initiale de gouttes sur des plans horizontaux.

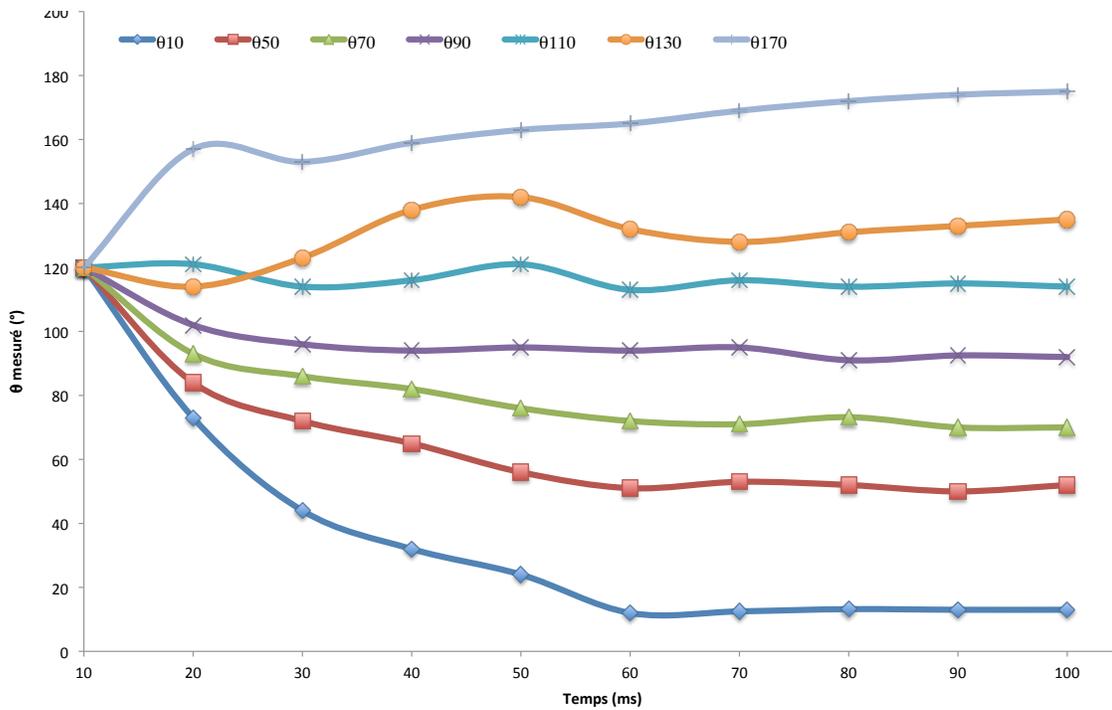
constante, avec un pas d'espace de 0.016mm , la résolution des équations de Navier-Stokes via la méthode de Lagrangien Augmenté Adaptatif Algébrique (pour des résidus fixés à 10^{-15}) via un solveur direct de type MUMPS [Ame00], pour des pas de temps fixes de 10^{-5}s . La pénalisation du SVOF afin d'imposer un angle de contact fixe statique sur la paroi est réalisée sur la première maille du domaine selon la hauteur de la goutte.

Les mesures de l'angle de contact et de la pression ont été réalisées au cours du temps. Ces mesures à l'équilibre sont présentées dans le tableau (2.2). Nous avons de même calculé la pression de Laplace théorique dans la goutte à l'équilibre, via la mesure du rayon de courbure à l'équilibre ($\Delta P = \sigma/R$ à l'équilibre) ainsi que réalisé l'inverse via la différence de pression mesurée et calculé le rayon de courbure via Laplace. Les mesures et calculs montrent un bon accord quand à la courbure via la méthode SVOF, de même que l'angle à l'équilibre respecte bien la valeur imposée. Concernant l'angle de contact, la courbe de la figure (2.9) montre son évolution temporelle.

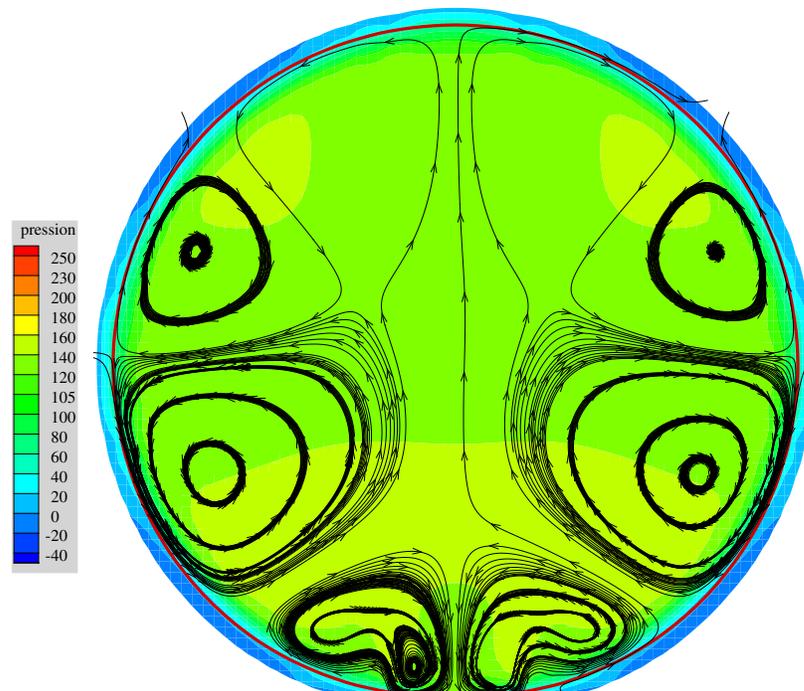
Les courbes de la figure (2.9a) permettent d'observer que malgré l'absence d'une condition dite d'angle de contact dynamique, notre modèle permet de prendre en compte correctement les effets de la mouillabilité de la paroi. Il en résulte une évolution de l'angle de contact au cours du temps, jusqu'à atteindre l'angle de contact imposé, à $2 - 5^\circ$ près. De plus, nous pouvons voir que la goutte présentée sur cette figure, posée sur une surface non mouillante (angle de contact numérique de 170°), possède des écoulements internes proches de la ligne de contact et permettant d'assurer son maintien. Ces écoulements sont les résultantes de la compétition entre effets gravitationnels et de tension de surface, mais comprennent aussi une contribution numérique liée à l'approximation de la courbure dans la zone de ligne triple.

$\theta_{s,imp}$ (°)	$R_{eq,mes}$ (m)	$\Delta P_{eq,mes}$ (Pa)	R_{eq} via ΔP_{mes} (m)	ΔP_{eq} via $R_{eq,mes}$ (Pa)	θ_{eq} (°)
10	9.50E-03	7	1.03E-02	7.58	13
50	1.10E-03	60	1.20E-03	65.45	52
70	7.00E-04	100	7.20E-04	102.86	70
90	6.00E-04	125	5.76E-04	120.00	92
110	5.00E-04	150	4.80E-04	144.00	114
130	4.50E-04	170	4.24E-04	160.00	135
170	5.00E-04	148	4.86E-04	144.00	175

TABLE 2.2 – Résumé des cas étudiés pour les gouttes à l'équilibre et principaux résultats.



(a) Evolution de l'angle de contact



(b) Goutte en équilibre apparent, interface en trait rouge, pression en Pa

FIGURE 2.9 – Evolution en fonction du temps de l'angle de contact et équilibre apparent d'une goutte sur une plaque mouillante ($\theta_s = 170^\circ$).

Validation physique - Impact d'une goutte sur une surface inclinée

La précédente partie de la validation des modèles et méthodes employés consistait à vérifier la justesse de notre méthode concernant l'imposition d'un angle de contact statique. Cette précédente étude montre une bonne adéquation entre les mesures numériques et les prédictions physiques à l'équilibre, accord encourageant pour l'utilisation de cette méthode. Il s'agit dorénavant de valider l'ensemble des modèles et méthodes en les confrontant à un réel cas physique instationnaire. Nous nous baserons sur les expériences réalisées par Fujimoto et al. [HF07], lors desquelles les auteurs ont réalisé un éventail d'expérimentations au sujet de l'impact d'une goutte liquide sur des surfaces horizontales ou inclinées, à assez hautes vitesses compte tenu des tailles des gouttes. Les surfaces possèdent plus ou moins une propriété de mouillabilité importante (mouillage quasi total) et l'idée principale fut d'étudier l'hystérésis d'angle de contact.

Pour cela, Fujimoto et al. ont réalisé un dispositif (détaillé dans la publication [HF07]) et nous nous proposons de réaliser une expérience numérique équivalente. L'étude choisie est celle concernant l'impact d'une goutte de diamètre $d_p = 0.53mm$, à une vitesse verticale initiale $v_0 = 4m.s^{-1}$ et pour une inclinaison de la plaque $\alpha = 30^\circ$ vis-à-vis de l'axe vertical. Ces données sont rapportées sur la figure (2.10a). Les définitions des différents relevés sont établies sur la figure (2.10b). Nous relèverons l'étalement au cours du temps. Ces grandeurs seront confrontées aux relevés des expériences. De plus, afin d'aller plus loin, nous étudierons les phénomènes se déroulant aux petites échelles, proches de la ligne de contact, afin de mieux connaître les écoulements la régissant.

Les paramètres numériques de cette étude ont été fixés, avec concernant le maillage utilisé une grille de type exponentielle, décrite sur la figure (2.11), permettant de capter le plus précisément les déformations proches de la paroi. Il restera néanmoins une correction à apporter pour capter précisément la mesure de l'étalement, du fait de la pénalisation de la première maille du domaine (selon Z) par la fonction SVOF à C_∞ , donc nous prolongerons la courbure locale linéairement afin d'avoir l'étalement total sur la paroi. Nous utiliserons le Lagrangien Augmenté Adaptatif Algébrique afin de résoudre les équations de Navier-Stokes, via un solveur itératif Bi-gradient conjugué stabilisé deux fois (BiCG-Stab2 [Gus78]) afin d'atteindre des résidus de l'ordre de 10^{-7} , pour un pas de temps de $5.10^{-6}s$. La pénalisation du SVOF pour assurer une imposition propre de l'angle de contact est réalisée sur les deux premières mailles selon la hauteur X2 du domaine non incliné, afin de ne pas trop contraindre la dynamique mais aussi d'avoir assez de mailles de diffusion de la valeur du SVOF imposée. Les conditions aux limites sont rappelées sur la figure (2.10c).

Nous avons donc mesuré l'évolution de l'élongation (qui est adimensionnée vis-à-vis du diamètre initial) en fonction du temps (lui-même adimensionné en fonction du rapport vitesse initiale sur diamètre initial). La mesure est rapportée sur la figure (2.12). Nous pouvons y voir un bon accord entre l'expérience et la simulation réalisée, les écarts étant dus à une mesure parfois décalées entre les points de contrôle de la simulation et ceux de l'expérience. La précision

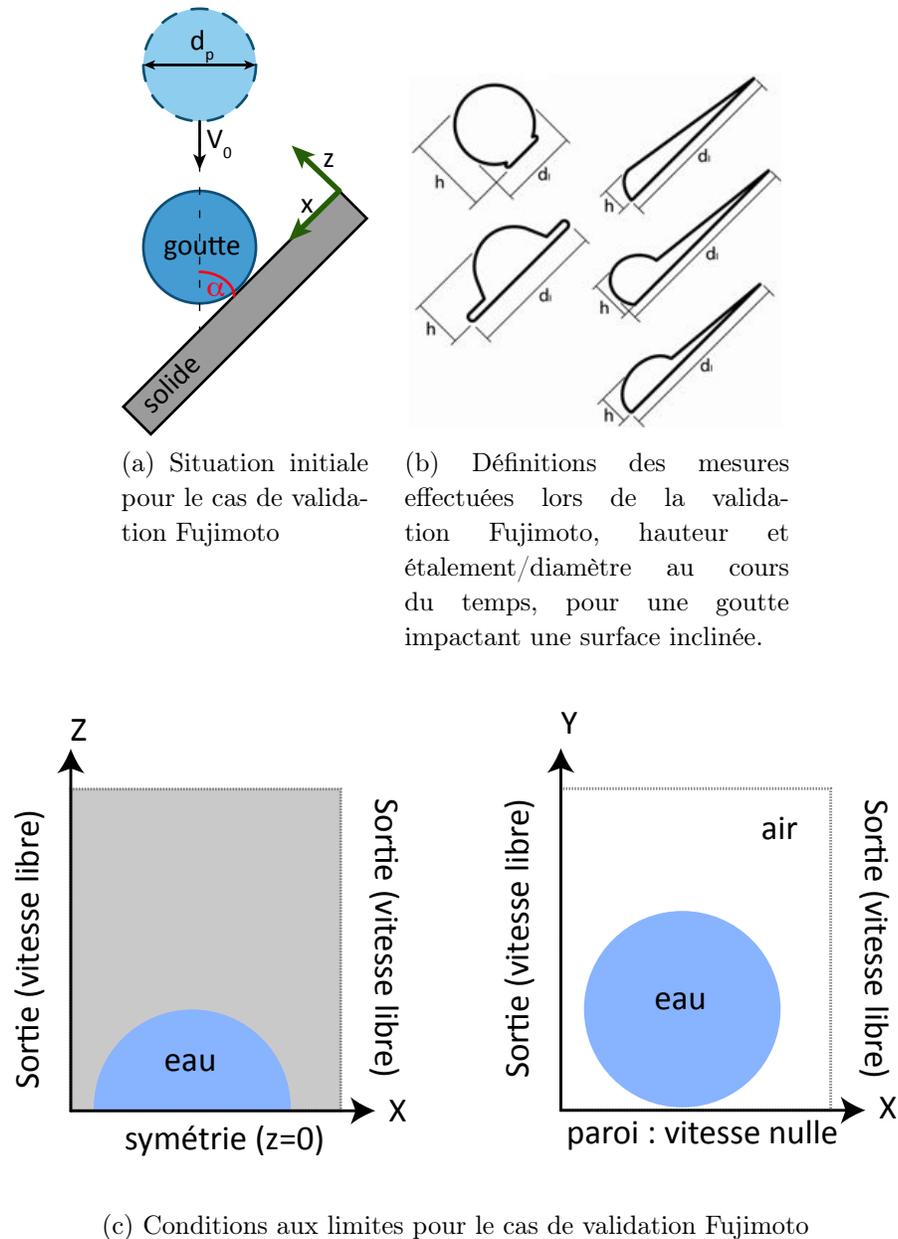
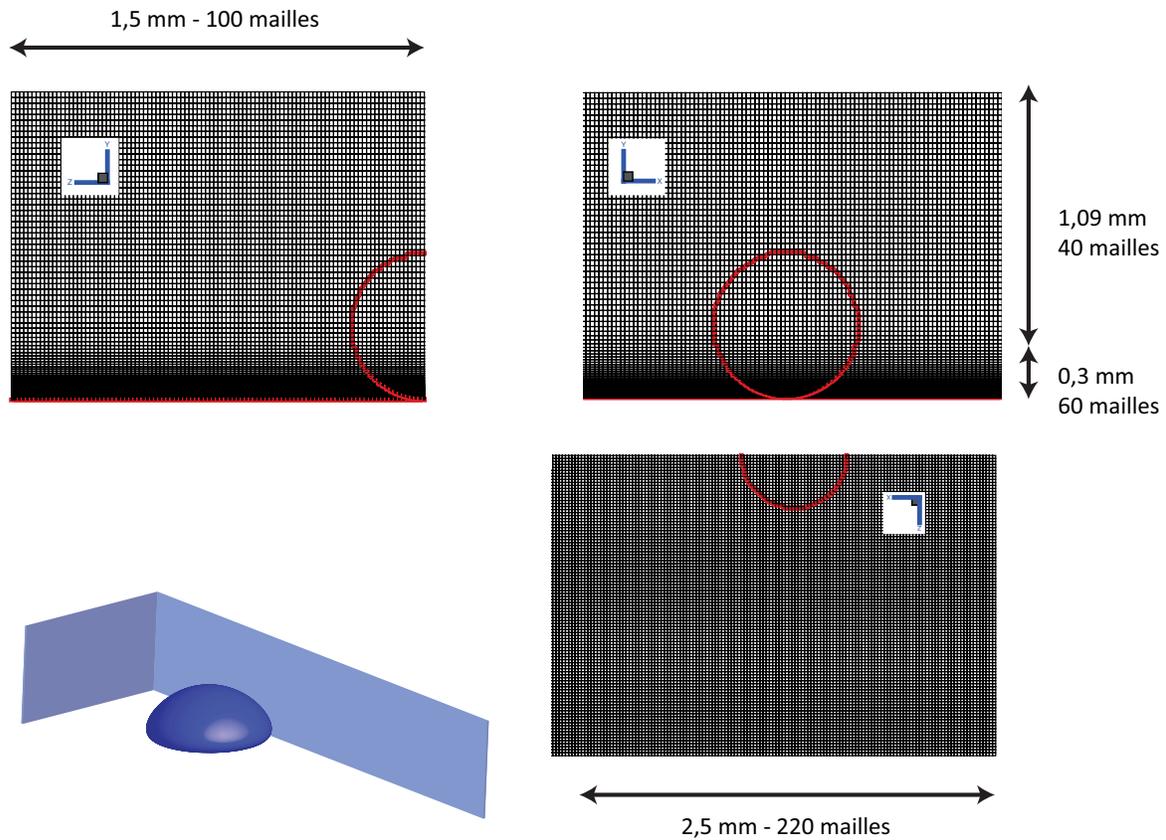


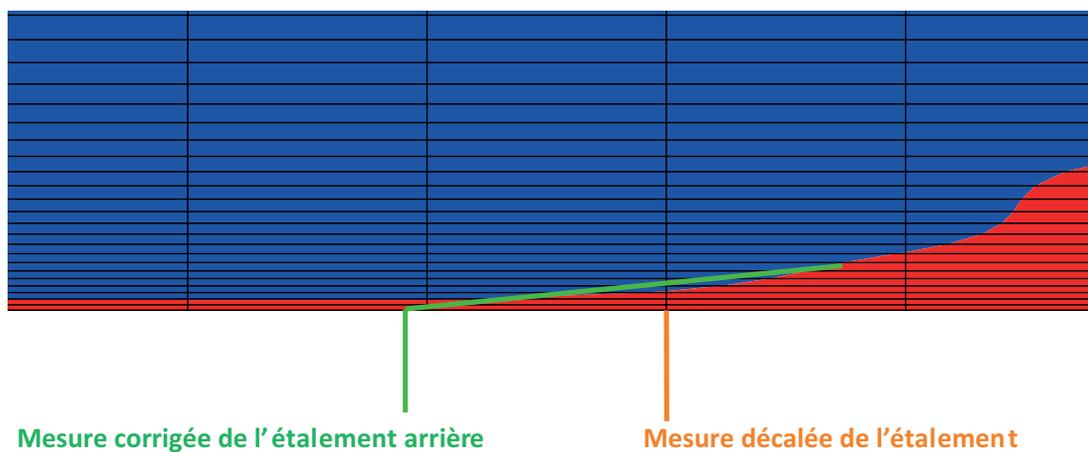
FIGURE 2.10 – Description de la situation initiale pour le cas de validation de Fujimoto $(d_p, v_0, \alpha) = (0.53\text{mm}, 4\text{m}\cdot\text{s}^{-1}, 30^\circ)$.

de la mesure est un paramètre important pour ce type de comparaison.

Nous avons, par ailleurs, étudié les écoulements à l'échelle locale à la goutte, internes, au cours du temps. Pour cela, nous nous sommes placés dans le référentiel de la goutte, c'est-à-dire en retranchant la vitesse de translation moyenne (proche de la vitesse imposée initialement) à chaque itération afin d'observer plus précisément les écoulements mis en jeu et sollicitant la goutte. Les figures (2.13) sont des coupes réalisées sur le plan médian de la goutte, et exposant la forme de la goutte (trait rouge, gras), le champ de pression sur lequel nous pouvons observer



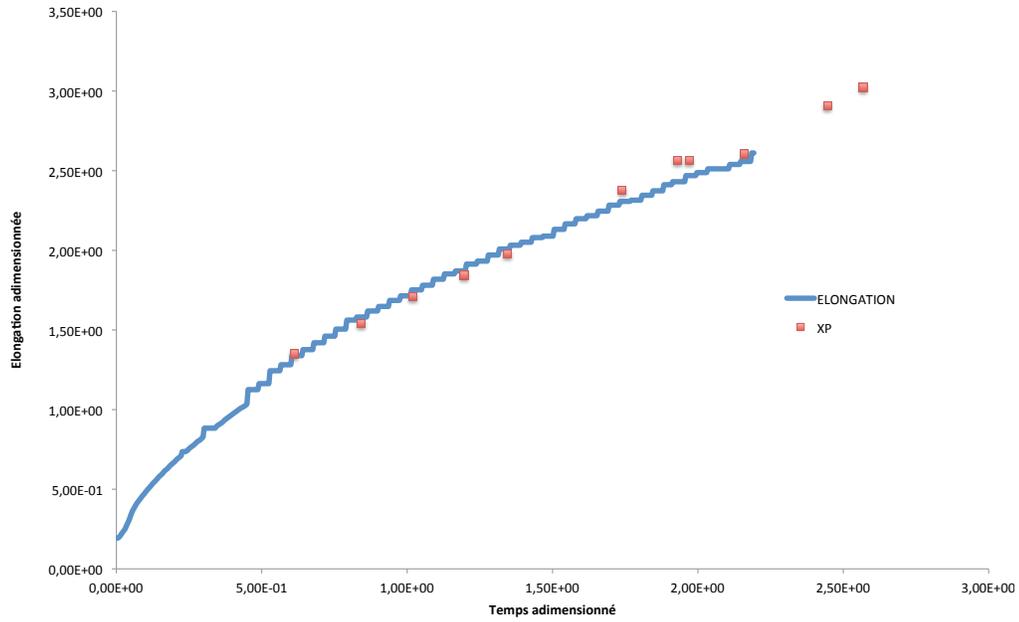
(a) Maillage utilisé (exponentiel sur la paroi)



(b) Mesure réalisée

FIGURE 2.11 – Maillage utilisé pour le cas de validation Fujimoto et mesure réelle réalisée.

une nette surpression lors de l'impact, surpression se dissipant tout au long de la déformation, et les lignes de courant faisant apparaître des recirculations centrées sur la surface de la goutte d'eau. De plus, les figures (2.14) montrent une vue 3D de l'étalement de la goutte, et sont en bon accord avec les expériences de Fujimoto comparativement et qualitativement.



(a) Mesure de l'étalement adimensionné de la goutte

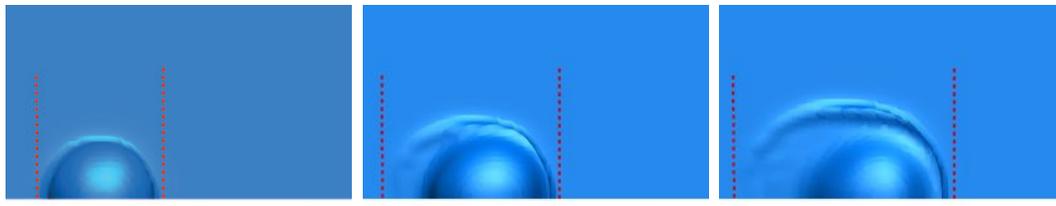
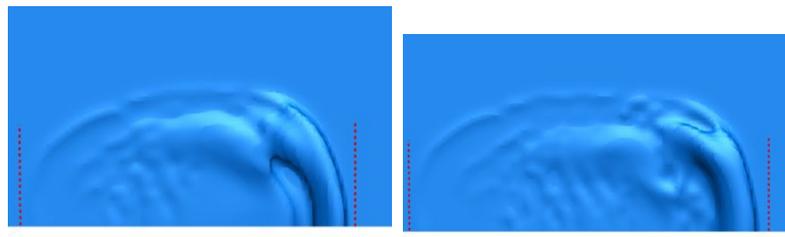
(b) $t=0.025$ ms(c) $t=0.05$ ms(d) $t=0.075$ ms(e) $t=0.1$ ms(f) $t=0.125$ ms(g) $t=0.175$ ms(h) $t=0.2$ ms(i) $t=0.25$ ms

FIGURE 2.12 – Mesure de l'étalement adimensionné de la goutte dans le cas de Fujimoto [HF07] (d_p, v_0, α) = (0.53 mm, 4.0 m/s, 30°) et vues du dessus de la mise en mouvement.

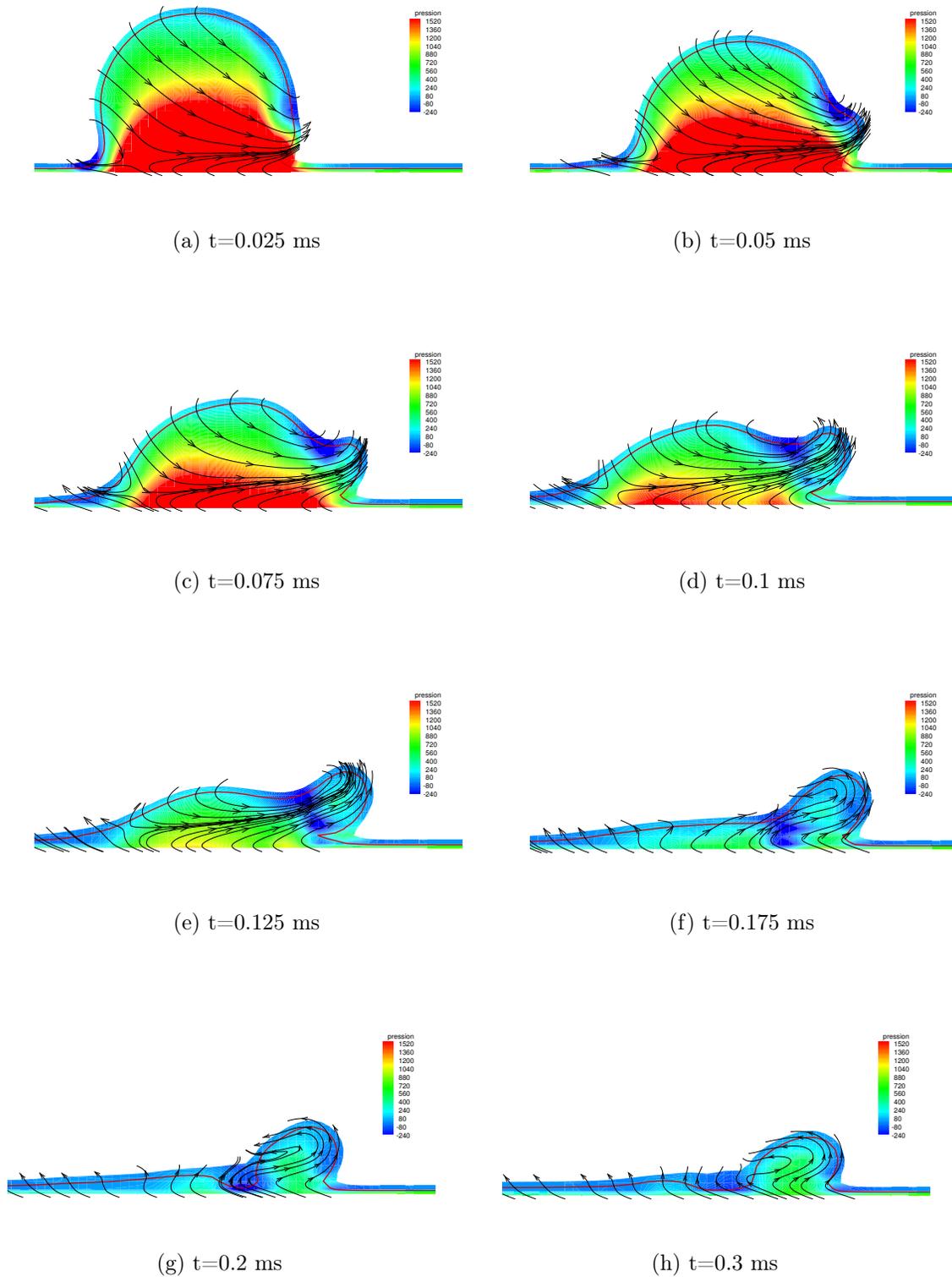


FIGURE 2.13 – Vue 2D d’une goutte dans le cas de Fujimoto [HF07] (d_p, v_0, α) = (0.53 mm, 4.0 m/s, 30°).

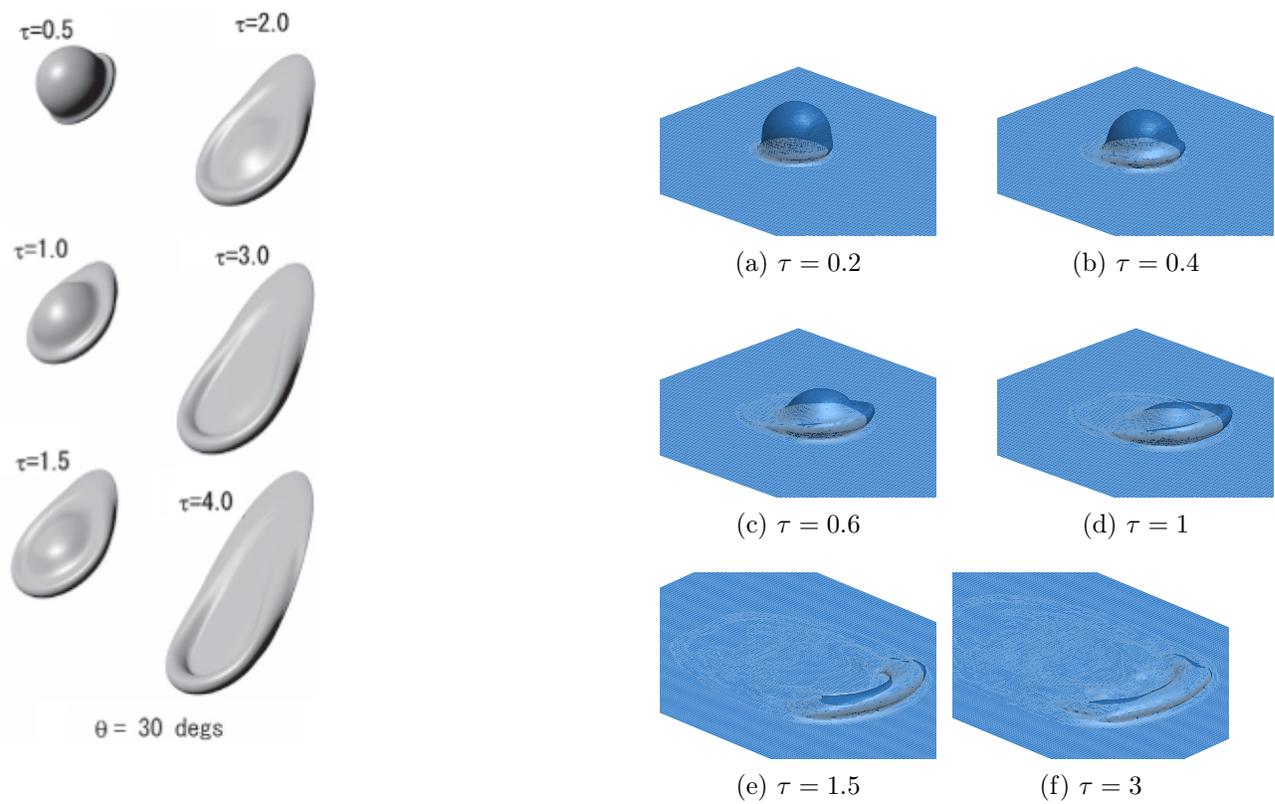


FIGURE 2.14 – Vue 3D d’une goutte dans le cas de Fujimoto [HF07] ($(d_p, v_0, \alpha) = (0.53 \text{ mm}, 4.0 \text{ m/s}, 30^\circ)$).

2.5 Conclusion

Ce chapitre nous a permis de définir le contexte numérique de notre étude. Nous avons pu y démontrer la capacité de notre approche de lissage contrôlé de l'interface SVOF à améliorer sensiblement les simulations réalisées, en diminuant fortement les courants parasites existants pour d'autres approches. De plus, la méthode mise en place pour modéliser une propriété de mouillage sur une surface donnée montre de bons résultats, permettant d'accéder à des comportements complexes via des données d'entrée simples, à savoir l'angle de contact statique uniquement. Les validations montrent un bon accord entre simulation et résultats expérimentaux. Le concept d'angle de contact dynamique est donc vu ici comme une déformation de l'interface entre le liquide et l'air via des forces volumiques (gravité, tensions de surface) permettant de déplacer l'angle de contact statique.

Aucune donnée de nature chimique n'est ici utilisée mais l'angle mesuré montre un très bon accord avec les expériences réalisées. Il faut noter que certains phénomènes, à très petites échelles, ne seront dans tous les cas pas mesurables par ces approches. Les résultats qui suivront dans le chapitre suivant sont donc à mettre en lumière de cette remarque.

Chapitre 3

Déplacements de gouttes et ponts liquides sur des parois

L'enjeu majeur de ce travail consiste à minimiser le phénomène de déposition de l'eau contenue dans l'air sous forme de vapeur (qui se condense sur la surface des ailettes des échangeurs) ou au contraire de maximiser l'écoulement de l'eau liquide issue du processus de dégivrage, ce dernier ne s'activant que si une condition particulière intervient dans l'échangeur. Il est donc important d'étudier le déplacement de volumes de liquide sur des parois fixes (symbolisant les ailettes), de géométries variées ou variables, en fonction de leurs conditions surfaciques. Les principaux volumes liquides, identifiés pour leurs propriétés géométriques simples, sont les gouttes d'eau (donc des sphères ou hémisphères) et les ponts liquides. L'objectif sera d'extraire des paramètres caractéristiques de comportement de gouttes ou de ponts liquides entre des ailettes d'échangeur de chaleur en fonction de conditions d'écoulements ou de propriétés de surface, imposées par nos modèles. Nous étudierons aussi les écoulements aux petites échelles, au niveau de la ligne de contact du fluide sur la surface, notamment en terme de vitesse de déplacement et de variation de pression entre l'extérieur et l'intérieur de la goutte.

Des formes plus complexes, faisant intervenir d'une manière non négligeable la tension de surface et permettant de juger de l'efficacité de notre modèle de mouillabilité, sont étudiés par la suite. Ces formes, les ponts liquides ou ponts capillaires, sont intéressantes dans cette étude, car ils permettent de vérifier l'influence de la tension superficielle, notamment au moment de la rupture, sur la mesure de l'angle de contact à l'équilibre. De plus, un intérêt important sera consacré à l'étude des ponts soumis à un écoulement latéral d'air, les advectant, en fonction des propriétés de la surface considérée. Nous mettrons en évidence ici des propriétés de stabilité ainsi que les facteurs permettant de déstabiliser ces volumes liquides.

Enfin, plusieurs études récentes exposent l'intérêt grandissant pour les meta-matériaux possédant des propriétés de mouillabilité particulières : les matériaux superhydrophobes (ou superhydrophiles). Tels que définis dans le chapitre 1, ces matériaux sont constitués à leur surface de macro-rugosités modifiant les propriétés de mouillage du constituant intrinsèque du matériau.

Nous nous intéresserons pour cela à la transition de l'état Cassie-Baxter (goutte posée sur les macro-rugosités) à l'état Wenzel (goutte étant empalée sur ces macro-rugosités), en fonction de l'éloignement des macro-rugosités, pour deux fluides offrant des propriétés de mouillage différentes vis-à-vis du même matériau. Nous verrons que la transition n'est pas forcément observée de manière triviale, et que les comparaisons réalisées avec les expériences de Barbieri [Bar06] montrent pour certains points des différences. La simulation numérique permettra aussi d'accéder à un niveau de détail assez fin pour observer les déplacements de la ligne triple sur ces surfaces particulières.

3.1 Déplacements gravitaires

3.1.1 Etat de l'art et choix à faire

En dépit de son apparente simplicité, l'étalement d'une goutte sur une surface plane ou inclinée est un problème assez complexe. En effet, le comportement mouillant d'un solide dépend de phénomènes physico-chimiques de plusieurs échelles différentes et reste encore à mieux comprendre [Bla06, Dus79, dG85]. La résolution des équations de Navier-Stokes induit une dissipation visqueuse au niveau de la ligne de contact du fait des conditions standards de non-glissement [HS71]. Du fait de ces difficultés, les simulations numériques du mouvement de la ligne de contact sont très compliquées à mener. A l'heure actuelle, la description numérique de la déformation et de la mise en mouvement d'une goutte sur une surface inclinée ou stressée via un écoulement cisailant de gaz requiert des modèles et méthodes numériques adaptés à la simulation de la déformation quasi-statique d'une goutte, à la transition entre le statique et la dynamique de mouvement et la prise en compte d'un hystérèse d'angle de contact. Seules certaines études récentes peuvent prétendre prendre en compte ces problèmes de manière propre (voir la revue [Spe05]).

Les études actuelles diffèrent la plupart du temps par l'approche utilisée pour décrire la déformation de l'interface et son déplacement (via des méthodes VOF, Front-Tracking ou encore Level-Set), diffèrent aussi par la stratégie employée pour imposer un angle de contact en mouvement (condition de non glissement avec un angle de contact statique, angle statique avec une condition de glissement sur une épaisseur fixe ou encore un angle de contact dynamique apparent). La plupart de ces approches ne prennent pas en compte les effets électrostatiques de Van der Waals, ce qui rend impossible la résolution des plus petites échelles moléculaires, via l'approche Direct Numerical Simulation (DNS), réellement responsables de la principale contribution à la présence d'un angle de contact. Néanmoins, si nous regardons la manière dont ont été menées les études jusqu'à maintenant, nous pouvons observer que la principale façon d'aborder le problème est de réaliser des modèles sous-mailles pour capturer les effets aux petites échelles.

Une des principales études récentes a été réalisée par Dupont et Legendre [DL10]. Ils y étu-

dient le comportement d'une goutte déposée sur une paroi inclinée, ou soumise à un écoulement latéral cisailant. Ils y résolvent les équations de Navier-Stokes, via une approche MUF avec une méthode de transport correctif de flux (FCT) pour le transport de l'interface et un modèle CSF pour le terme de tension de surface. La modélisation de l'angle de contact est réalisée en deux temps. Le premier permet de décrire comment imposer un angle de contact donné à une paroi, via l'imposition d'une valeur de la fraction volumique de liquide à l'interface, laquelle est reliée à l'angle de contact et à la normale à cette interface. Une méthode assez complexe permet d'imposer une valeur virtuelle de C en pénalisant le gradient de C près de l'interface au voisinage de la paroi. Afin de prendre en compte la dynamique de l'angle de contact, une deuxième imposition est réalisée via une vitesse de glissement locale de l'interface à la paroi, afin de tendre vers une loi de type Cox pour des surfaces épaisses. Il y a donc une réelle pénalisation de la dynamique de l'angle de contact via une loi prédéterminée à choisir. Ces choix ont été validés vis-à-vis d'expériences de gouttes en équilibre sur plans horizontaux.

3.1.2 Contexte numérique et choix de méthodes de résolution

Nous avons travaillé dans des configurations souvent riches en points de maillage, afin de pouvoir capter une dynamique précise à l'échelle locale de l'interface. Cette problématique a donc nettement influencé nos choix, devant respecter des contraintes techniques et pratiques (puissance disponible, visualisation et post-traitement des données). Le maillage sera donc choisi assez raffiné, la taille de maille généralement comprise entre le micromètre et la dizaine de micromètres pour les cas à faibles nombres de Bond ou de Weber, et de taille plus lâche (centaine de micromètres au plus grossier) pour les cas à forts nombres de Bond ou de Weber.

Nous nous sommes placés dans le même type d'approche qu'énoncées dans le chapitre 2 traitant des modèles et méthodes disponibles. Pour cela, nous avons résolu l'équation de Navier-Stokes via la méthode du Lagrangien Augmenté Auto-Adaptatif [VCLR04] et un solveur itératif de type Bi Gradient Conjugué doublement stabilisé [Gus78] (BICG-Stab(2)) pour lequel nous fixerons un résidu de résolution le plus bas possible après plusieurs essais tout en gardant des performances raisonnables. Typiquement, nous atteignons un résidu de l'ordre de 10^{-7} pour un nombre d'itérations internes aux environs de 100. La divergence globale de la vitesse associée (via le Lagrangien Augmenté) est elle aussi la plus faible possible via un nombre d'itérations (typiquement 2) de l'algorithme contrôlé.

Une condition de paroi est toujours représentée par une vitesse normale nulle sur la limite, une condition de symétrie est appliquée par annulation de la composante normale de la vitesse (mais pas de la composante tangentielle) sur la limite. Les limites où la sortie du fluide est nécessaire seront toujours du type Neumann, permettant de ne pas imposer de condition sur la valeur de la vitesse mais en annulant seulement la composante tangentielle et en laissant libre la composante normale.

3.1.3 Gouttes tri-dimensionnelles sur plan incliné

L'évolution d'une goutte sur une surface inclinée est intéressante pour d'une part convertir les résultats en données fondamentales afin de comprendre la dynamique des déplacements d'une goutte sur une surface de type "ailettes d'échangeurs de chaleur sur l'air", ainsi que pour mieux comprendre les phénomènes hydrodynamiques lors des mécanismes de déplacement et l'impact de la rugosité de la surface sur l'angle apparent de contact et l'hystérésis qui résulte de cette inclinaison et de cette rugosité. Il sera donc utile de s'intéresser à la dynamique de décrochement d'une goutte déposée initialement sur une paroi, selon l'inclinaison de cette paroi. L'hystérésis d'angle de contact, notée rappelons-le $\Delta\theta$, est un phénomène qui est défini dans le chapitre 1.

L'idée de cette première étude est d'observer le comportement d'une goutte de liquide (eau, possédant des propriétés communes exceptée la viscosité 10 fois plus grande, $10^{-2}Pa.s$, afin de minimiser les déformations conduisant à la mise en mouvement stationnaire) initialement déposée (hémisphère) sur une surface inclinée. L'angle d'inclinaison variant de 30° à 90° . L'objectif est de voir si cette goutte peut se déplacer, même sur un matériau possédant des propriétés hydrophiles, pour se décrocher totalement, sans imposer d'écoulement forcé. Deux volumes initiaux sont étudiés, $1\mu L$ et $25\mu L$. Dans cette étude nous observerons donc la vitesse limite de descente de la goutte et l'étalement résiduel (éventuel) qu'elle laisse derrière elle. Trois angles de contacts sont imposés à la même goutte initiale, afin de voir quelle propriété de surface est la plus à même d'évacuer le mieux possible cette goutte, initialement accrochée. Nous avons réalisé cette étude afin de comprendre les mécanismes mis en jeu lors de la fonte brutale d'un volume de glace, lui permettant de garder sa forme et devenant liquide sur une surface quelconque.

Les conditions initiales sont rappelées en figure (3.1). Le pas d'espace est constant dans toutes les directions, valant $0.017mm$ pour les cas à volume de $1\mu L$ et $0.034mm$ pour les cas de volume de $25\mu L$. Les pas de temps sont eux-mêmes aussi constants en fonction du volume, basés sur un respect de CFL égale à 0.1, $\Delta t = 5.10^{-5}s$ pour tous les volumes.

Les résultats des cas pour des angles d'inclinaison importants montrent qu'il existe globalement deux régimes de déplacement, les résultats numériques étant exposés dans les tableaux (3.1) et (3.2). La figure (3.2) montre l'apparition de l'hystérésis d'angle de contact pour les différents cas étudiés, à inclinaison de 45° . Lorsque la paroi est très mouillante, quelque soit l'angle d'inclinaison, la goutte a tendance à ne se déplacer que très peu, voire pas du tout dans le cas complètement mouillant. Les vitesses limites V_∞ montrent de plus une saturation en fonction de l'angle de contact, quelque soit l'inclinaison, saturation pouvant s'expliquer par le fait que l'aspect non mouillant devient finalement identique au-delà d'une valeur critique, proche de 120° dans nos cas. Seuls les trois angles de contact principaux seront présentés, 120° et 140° étant finalement identiques du point de vue comportemental et donc nous choisirons uniquement d'exposer 140° . Le cas extrême d'une goutte sur une surface hydrophobe incli-

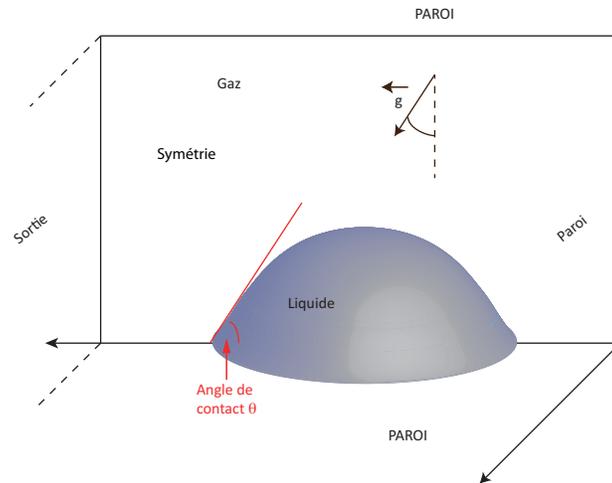


FIGURE 3.1 – Description de l'état initial des cas de gouttes inclinées sur paroi, $\theta_0 = 90^\circ$.

née verticalement montre un problème du au décollement de la paroi. Les mesures d'angle de contact dans ce cas n'ont pas de sens. L'impact de l'inclinaison est assez faible sur la dynamique de mouillage dans les cas hydrophiles ou partiellement mouillants. Seule l'inclinaison verticale montre une sensibilité accrue, due aux effets gravitaires plus marqués et accentuant les effets du déplacement (la gravité est colinéaire à la surface).

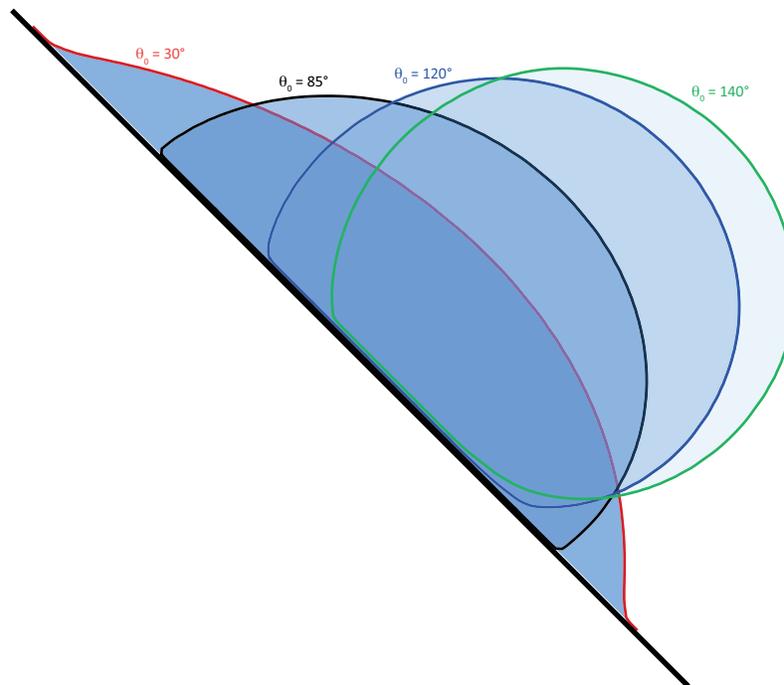


FIGURE 3.2 – Apparition d'un hystérésis marqué sur l'angle de contact en fonction de l'angle statique imposé à la paroi, à stationnarité, simulation pour un angle d'inclinaison de 45° .

De plus, nous pouvons observer que l'influence du volume initial (et donc des effets de la

Inclinaison α (°)	θ_0 (°)	ΔP (Pa)	V_∞ (m/s)	θ_r (°)	θ_a (°)	$\Delta\theta$ (°)
30	30	40	1,00E-03	15	24	9
	85	200	3,70E-03	85	92	7
	140	250	3,90E-02	138	154	16
45	30	40	1,00E-03	15	23	8
	85	195	7,00E-03	87	92	5
	140	250	5,70E-02	135	170	35
90	30	40	1,00E-03	16	39	23
	85	194	7,00E-03	88	92	4
	140	245	6,00E-02	120	164	44

TABLE 3.1 – Résultats numériques des cas étudiés pour les gouttes sur des plans en inclinaison fixe pour un volume de $1\mu L$.

gravité sur la goutte) est assez importante sur la vitesse (la goutte se déplace plus rapidement sur la surface inclinée, ceci étant du à sa masse plus importante, d'un ordre de grandeur la plupart du temps). Enfin, la différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur de la goutte est plus forte dans le cas des petites gouttes, effet s'expliquant par la courbure plus importante de l'interface eau/air dans ces configurations.

Les figures suivantes (3.3) montrent différents instants importants lors de la mise en régime pour un angle d'inclinaison de 30° , un angle de contact de 85° et le volume de $1\mu L$. Nous pouvons y voir que la mise en régime est très rapide vers la forme stationnaire. De plus, des écoulements macroscopiques sont mis en évidence. Ces écoulements sont les écoulements moteurs à la fois de la compétition entre les effets de gravité et de mouillage (recirculations proches de la ligne triple) et des effets inertiels propres au déplacement. Le liquide a tendance à rouler sur lui-même à mesure que la goutte avance, les écoulements étant contra-rotatifs. Ces écoulements, comme le montrent les lignes de courant, sont complexes. Plusieurs recirculations existent, toutes connectées et montrant les déplacements de liquide interne. La vitesse relative dans la goutte est élevée tout le long de la ligne de contact, montrant ce mouvement de roulement qui s'y présente. Nous y avons mis en évidence les dynamiques de déplacement sur surfaces inclinées via les coupes réalisées longitudinalement selon l'axe central de la goutte

Inclinaison α (°)	θ_0 (°)	ΔP (Pa)	V_∞ (m/s)	θ_r (°)	θ_a (°)	$\Delta\theta$ (°)
30	30	16	6,00E-03	12	27	15
	85	70	2,50E-02	82	92	10
	140	90	3,20E-01	112	172	53
45	30	15	8,00E-03	16	35	19
	85	65	3,50E-02	78	90	12
	140	80	2,80E-01	105	150	45
90	30	20	4,00E-03	20	37	17
	85	70	8,00E-02	80	102	15
	140	76	3,10E-01	170	120	-50

TABLE 3.2 – Résultats numériques des cas étudiés pour les gouttes sur des plans en inclinaison fixe pour un volume de $25\mu L$.

(??). Ces deux coupes montrent dans le plan les localisations de surpression proches de la ligne de contact, s'expliquant par les efforts exercés sur la ligne lors du déplacement.

Les courbes présentées sur les figures (3.4-3.5-3.6), décrivent les évolutions des hauteurs et étalements adimensionnés par le rayon initial de chaque cas au cours du temps adimensionné par un temps caractéristique des effets visqueux et capillaires, définis par (3.1). Ces courbes montrent que les évolutions pour les angles de contact de 30° et 140° sont globalement identiques, avec une diminution de la hauteur et un étalement augmentant, au contraire de la goutte posée sur une surface non mouillante. Le cas $\theta = 85^\circ$ présente pour l'étalement un comportement différent pour les deux volumes étudiés, résultant d'une réceptivité aux effets gravitaires plus grande dans le cas d'un gros volume. Ce cas est particulier, du fait de la position initiale proche de la forme à l'équilibre. Peu de dynamique apparaît, pour un faible volume. Le volume important montre néanmoins que les effets gravitaires sont importants.

$$\tau = \frac{\mu R_0}{\sigma} \quad (3.1)$$

La dynamique d'étalement pour un angle de contact de 30° et un volume de goutte de $1\mu L$ est tellement forte qu'elle prend le dessus sur le déplacement à proprement parler de la goutte. Quelle que soit l'inclinaison, pour cet angle de contact, la goutte ne commencera son mouvement de translation qu'une fois l'étalement quasi-fini, dans les premiers instants. L'étude se résume donc à observer le déplacement d'un film fin et homogène, sur lequel la gravité n'a que très peu d'influence et où la dissipation visqueuse est importante, entraînant un maintien du film dans sa position initiale (ou avec un léger mouvement de translation une fois l'étalement complet fini). Concernant les mêmes cas avec un volume plus important ($25\mu L$), nous pouvons remarquer que le barycentre de la goutte n'a que très peu tendance à bouger. La vitesse de déplacement de ce barycentre (déplacement du volume moyen) est très faible pour toutes les inclinaisons.

Les écoulements internes montrent une dynamique particulière, mais deux tendances nettes apparaissent : pour les petites gouttes, les dynamiques créées par les forces superficielles montrent des recirculations fortes proches de l'interface (figure ??) accentuant les effets de mouillage et permettant une évacuation assez rapide dans le cas non-mouillant. Au contraire, pour le cas des grosses gouttes, ces recirculations sont inexistantes, notamment pour les grands angles de contact, les effets de gravité sont nettement marqués et les gouttes tombent littéralement. Les figures (3.3) mettent en évidence le phénomène de Hill Vortex au sein de la goutte, en mouvement. Les recirculations sont connectées sous forme de couronne tout le long de la ligne de contact, et selon une seconde couronne dans la partie supérieure de la calotte. Nous pouvons de plus observer que les vitesses (ici dans le référentiel de la goutte) sont plus importantes en norme le long de la ligne de contact qu'au centre de la goutte, le mouvement de roulement s'établissant depuis la ligne de contact vers le centre. Enfin, les vortex sont reliés entre-eux, les mouvements de fluide viennent ainsi les alimenter et se dispersent dans la couronne supérieure.

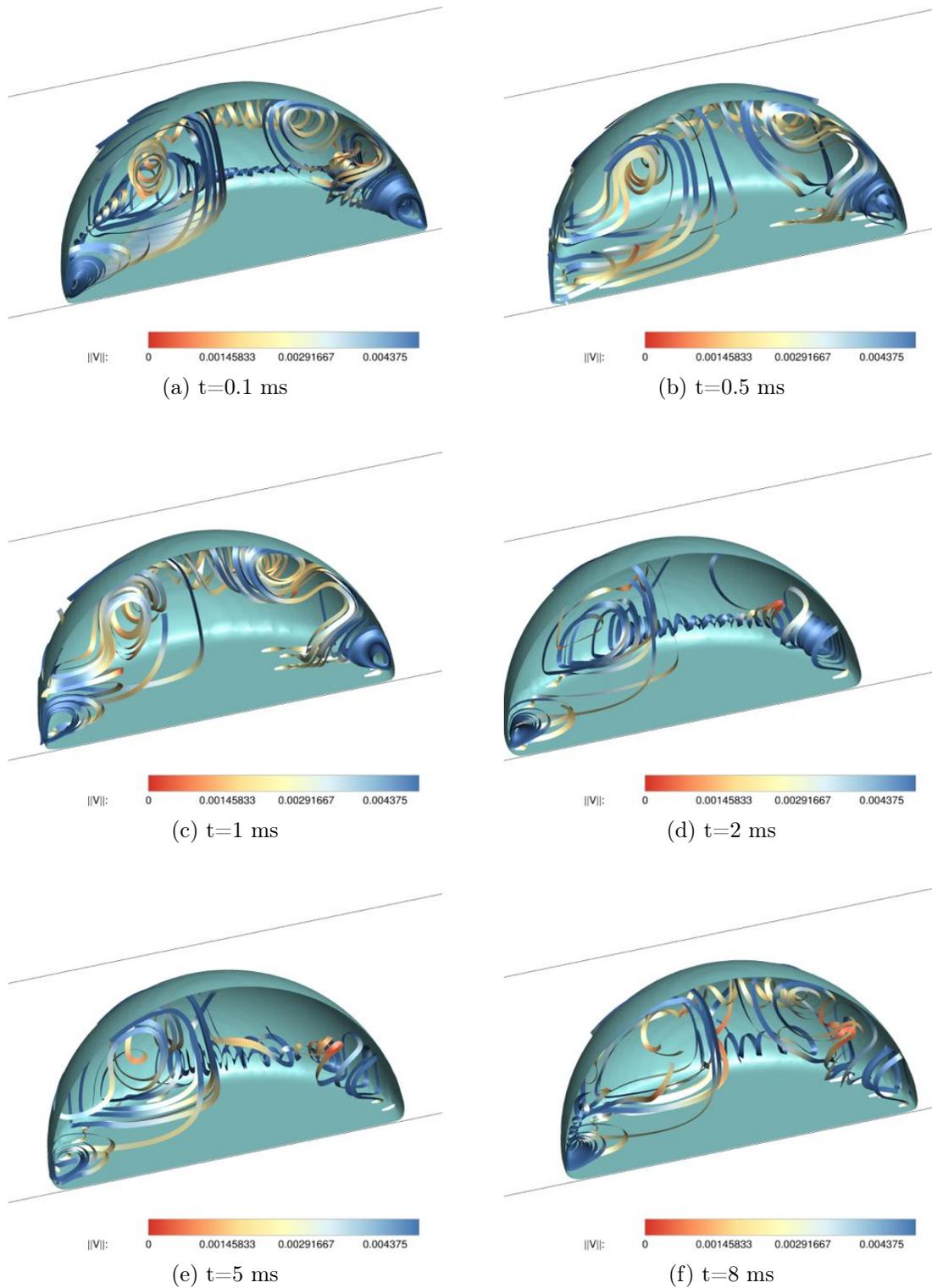


FIGURE 3.3 – Vue 3D d'une goutte d'eau de volume de $1\mu L$, sur un matériau à angle de contact de 85° et pour un angle d'inclinaison de 30° , lignes de courant dans le repère relatif de la goutte, norme de la vitesse sur les lignes de courant (champ couleur).

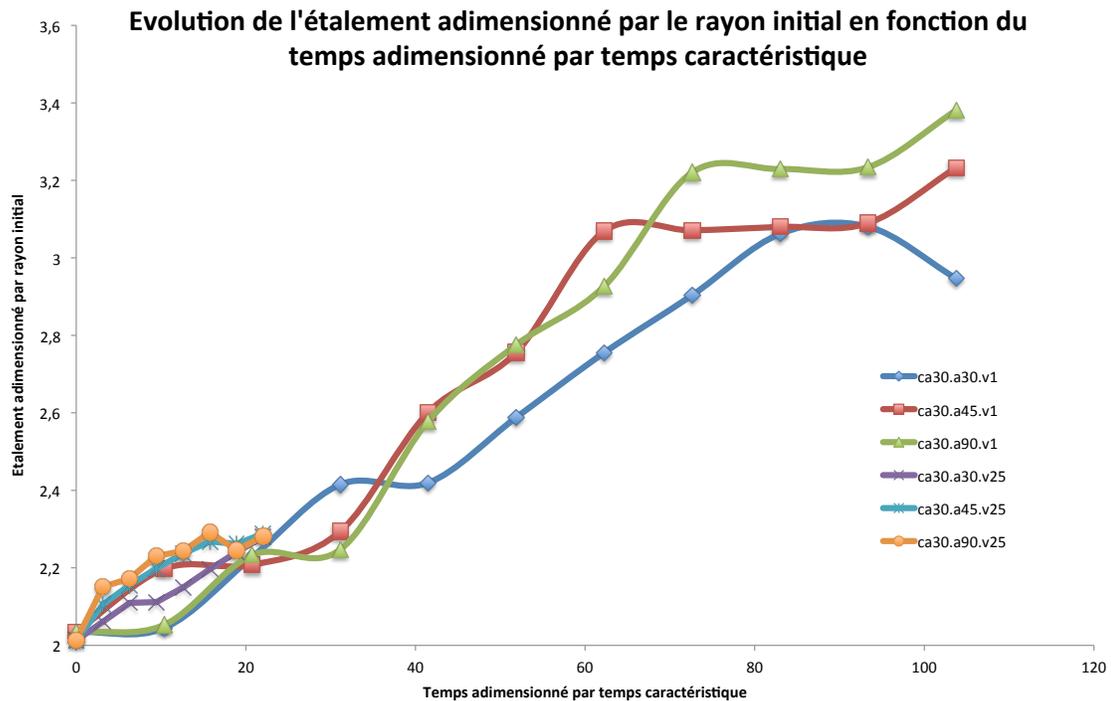
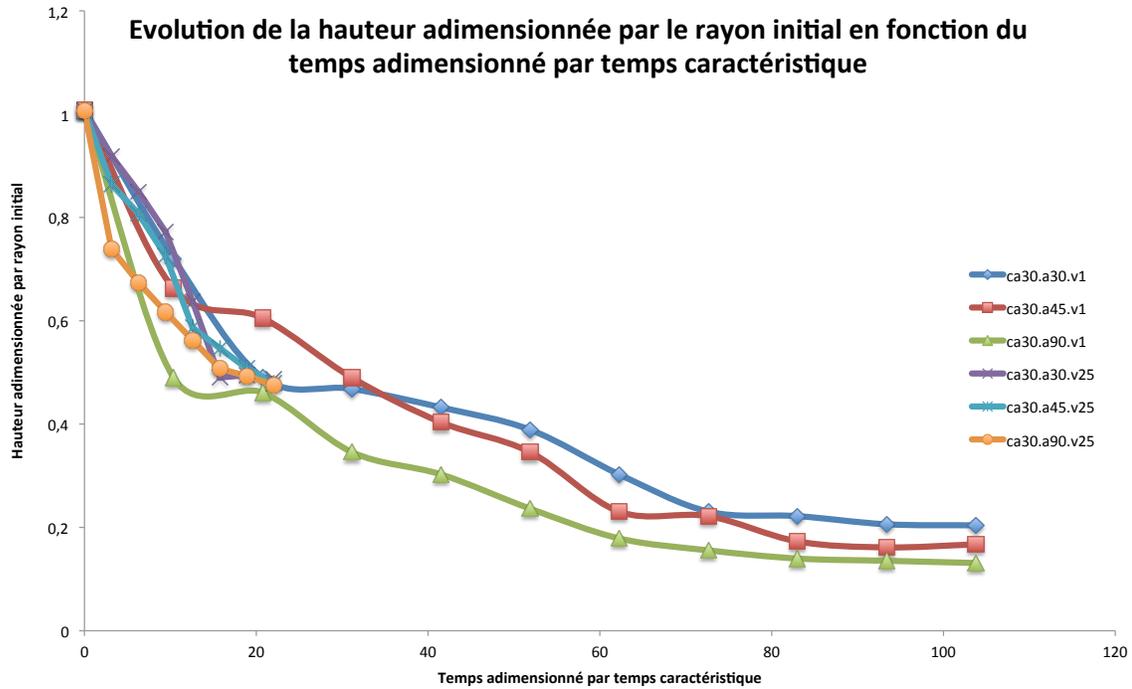


FIGURE 3.4 – Evolution de la hauteur et de l'étalement adimensionnés par le rayon initial, d'une goutte d'eau sur un matériau à angle de contact de 30° en fonction du temps adimensionné par (3.1) pour des angles d'inclinaison et des volumes différents. (légende : Angle de contact θ . angle d'inclinaison α . volume Vol)

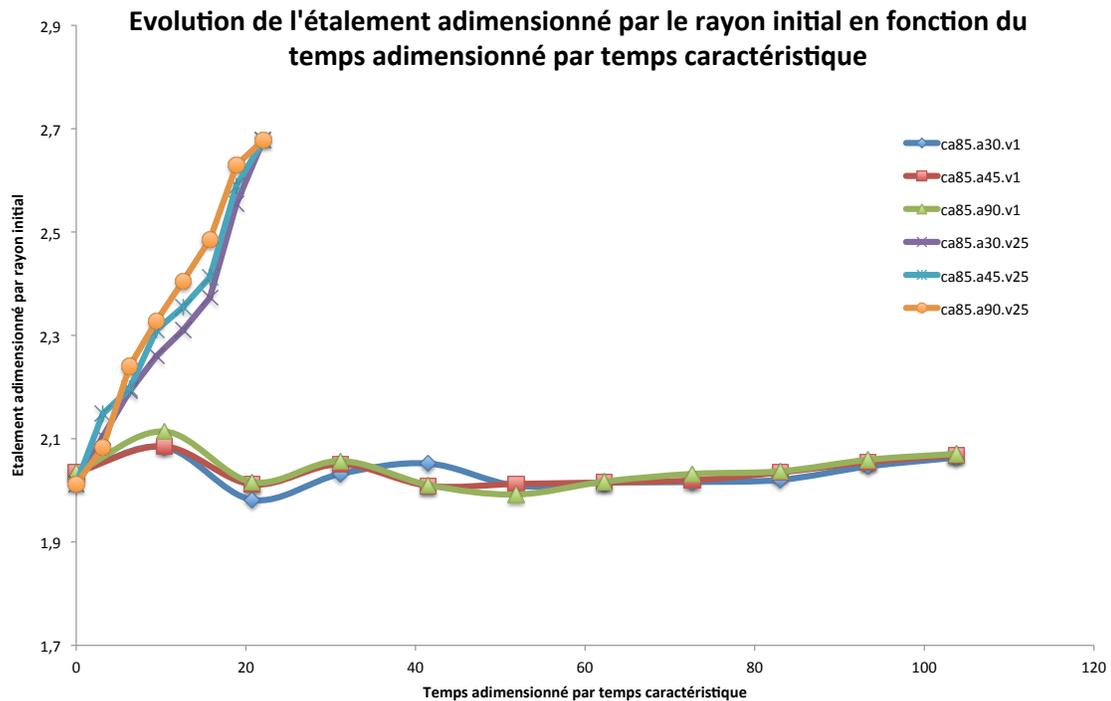
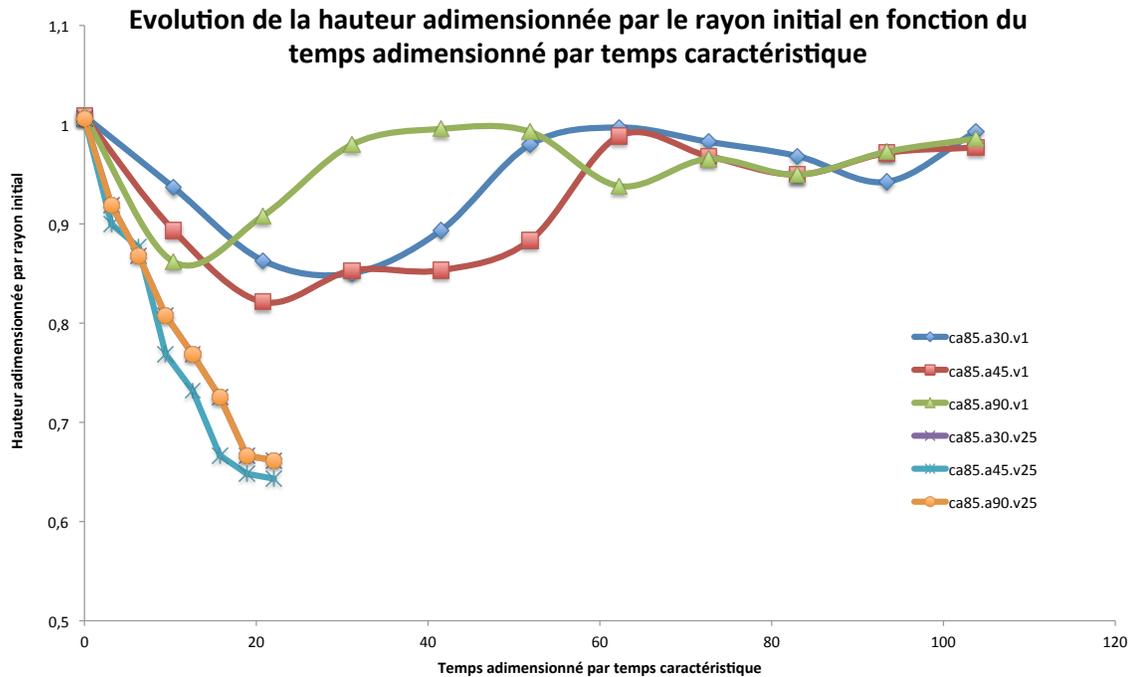
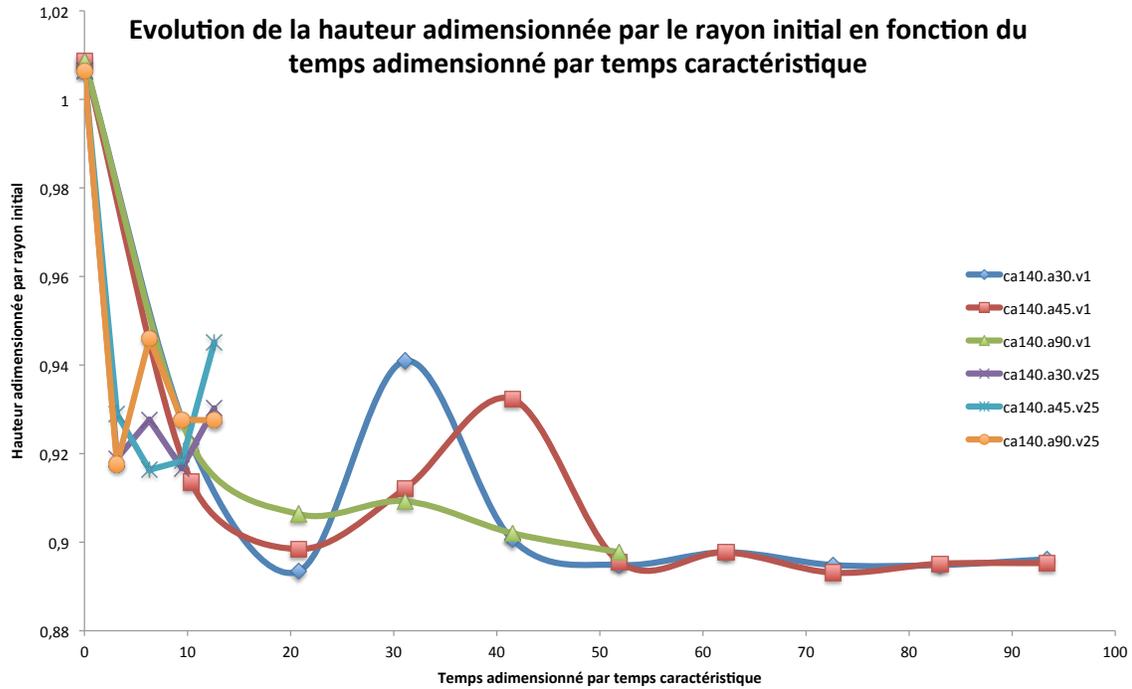
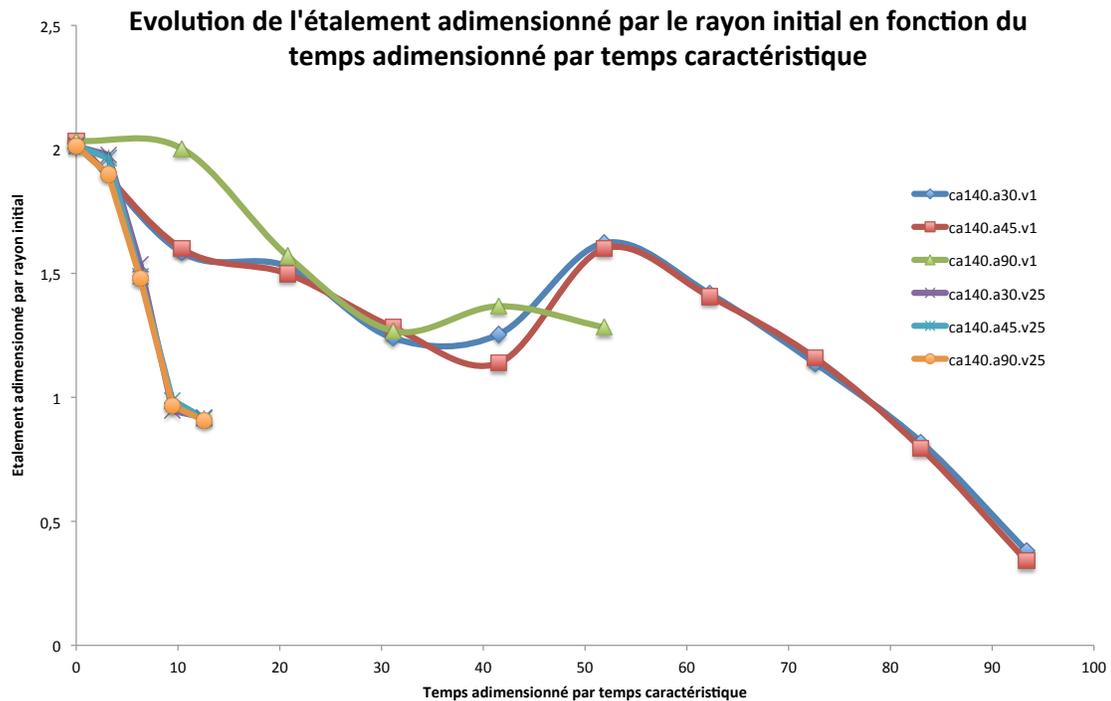


FIGURE 3.5 – Evolution de la hauteur et de l'étalement adimensionnés par le rayon initial, d'une goutte d'eau sur un matériau à angle de contact de 85° en fonction du temps adimensionné par (3.1) pour des angles d'inclinaison et des volumes différents. (légende : Angle de contact θ . angle d'inclinaison α . volume Vol)



(a) hauteur



(b) étalement

FIGURE 3.6 – Evolution de la hauteur et de l'étalement adimensionnés par le rayon initial, d'une goutte d'eau sur un matériau à angle de contact de 140° en fonction du temps adimensionné par (3.1) pour des angles d'inclinaison et des volumes différents. (légende : Angle de contact θ . angle d'inclinaison α . volume Vol)

Nous pouvons estimer les énergies propres à la dynamique de cet étalement E_c et à la dissipation de l'énergie par effets visqueux proches de la ligne de contact E_d . Concernant l'excès d'énergie capillaire résultant de la force de mouillage, nous pouvons l'exprimer par l'équation (3.2). L'énergie de dissipation des effets de mouillage peut être déduite en considérant un écoulement interne de type Poiseuille via cette dissipation par effet visqueux, et des conditions aux limites respectant les hypothèses de lubrification, et est exprimée par (3.3). Ces énergies sont développées au niveau de la ligne de contact, les vitesses V considérées sont celles d'étalement. La vitesse de déplacement a donc été déduite pour obtenir les vitesses locales propres aux mouvements de la goutte dans son référentiel.

$$E_c = \sigma (\cos \theta_0 - \cos \theta_a) V \quad (3.2)$$

$$E_d = \frac{3\eta V^2}{\theta_a} \ln \frac{R}{x_m} \quad (3.3)$$

où x_m est une longueur moléculaire, typiquement $10^{-9}m$ ici.

Nous tracerons ces énergies sur la figure (3.7), pour chaque inclinaison et volume testé. Nous pouvons voir que les énergies ne sont pas parfaitement équivalentes, selon notamment les effets de mouillage. Un écart assez important peut être mis en évidence pour des plans non mouillants, cette différence pouvant être interprétée par une dynamique où les effets de mouillages ne permettent pas une dissipation dans le film résiduel derrière la goutte, inexistant. Pour les plus grosses gouttes, les effets de gravité créent une source supplémentaire d'énergie à dissiper.

Pour conclure sur ce premier cas d'étude, nous pouvons voir que les forces motrices du déplacement d'une goutte déjà déposée sur une surface (typiquement, en fin de dégivrage d'un volume de glace sur une plaque) sont essentiellement dues à la propriété de mouillage de cette surface. Le volume de la goutte sera déterminant sur les temps d'évacuation, mais ce type d'étude ne permet pas de prendre en compte un éventuel fractionnement des grosses gouttes qui pourrait être du à un écoulement forcé d'air. Dans tous les cas, il est à privilégier une surface non mouillante si nous voulons évacuer efficacement les gouttes. Il convient une nouvelle fois de souligner le caractère non représentatif du numérique envers les surfaces réelles, du fait de la rugosité nulle des surfaces numériques étudiées. Les points d'accrochage dus aux aspérités de surface sont autant de freins au déplacement d'une goutte sur une surface.

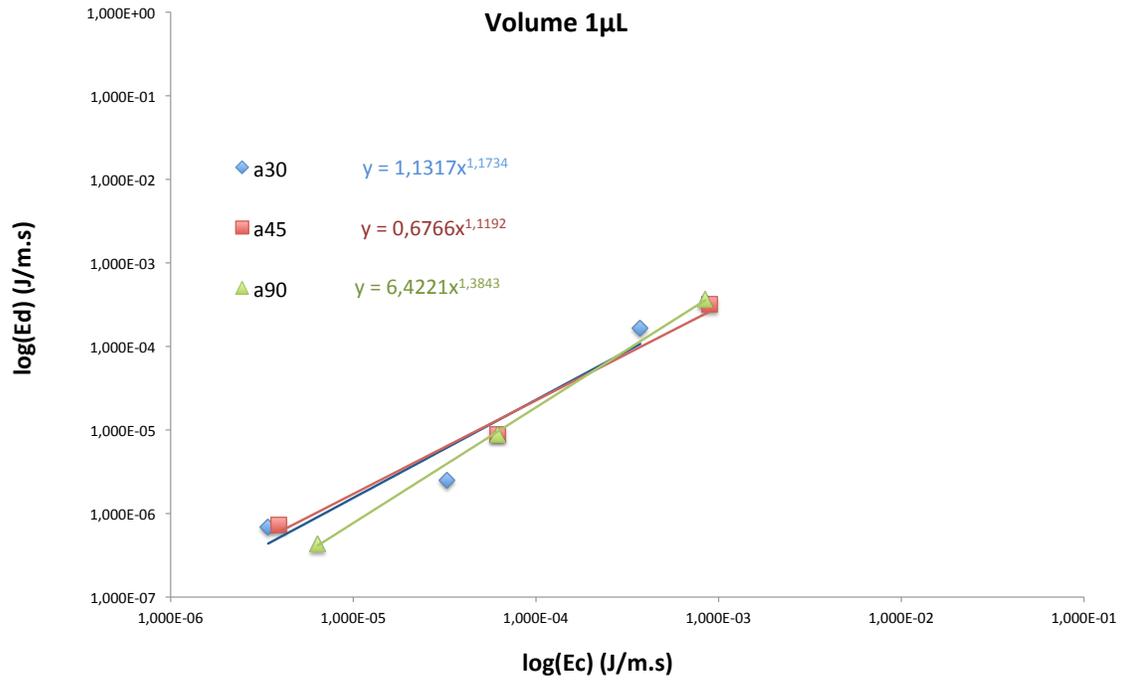
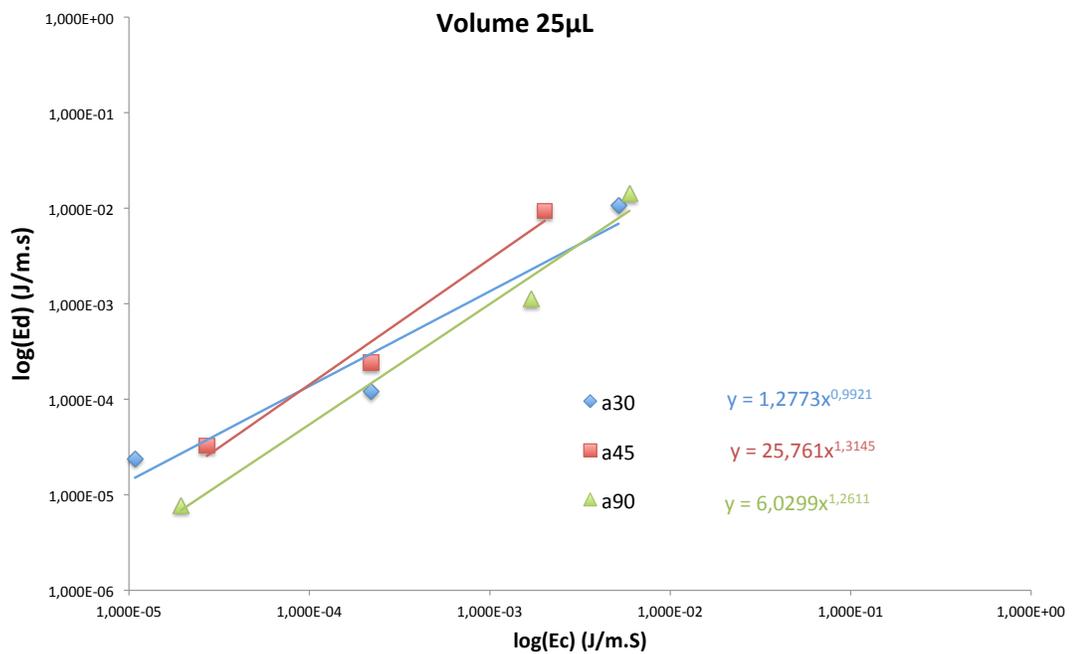
(a) 1 μ L(b) 25 μ L

FIGURE 3.7 – Relation entre énergie en excès, E_c , et énergie dissipée par effets de mouillage et visqueux, E_d . (légende : $a\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)

3.1.4 Ponts liquides

Ponts liquide au repos entre des plaques horizontales

La faible distance entre les ailettes d'échangeurs de chaleur (dans les pompes à chaleur sur l'air notamment) rend la présence de volumes d'eau très instable. Quand la distance inter-ailettes est inférieure à la distance capillaire de l'eau ($L_c = 2.7 \text{ mm}$), la création de ponts capillaires liquides devient plus que probable, notamment lors du dégivrage. Rappelons que la formation de ces ponts est réellement handicapante dans le cas d'utilisation d'une pompe à chaleur (formation de ponts de glace lors du fonctionnement en mode pompage de chaleur, bloquant le flux d'air dans l'échangeur). Le principal objectif de cette section est de trouver une configuration optimale, permettant avec l'effort le plus faible possible (effort aérolitique) de déplacer le plus efficacement possible des ponts capillaires bloqués entre deux ailettes.

Avant d'entraîner des ponts capillaires sous la contrainte, il est nécessaire d'étudier les modes selon lesquels un pont liquide se stabilise sous gravité et d'observer le comportement de ponts sur surfaces inclinées (sous-section suivante). Pour cela, différents ponts sont placés entre des ailettes dont la distance les séparant sera, avec sa propriété de mouillage, l'unique variable. En effet, le volume du pont liquide sera fixé à $2\mu L$. Ainsi, les effets gravitationnels seront négligeables d'un cas à l'autre par rapport aux effets des forces superficielles (nombre de Bond $Bo = 0.03$). Les paramètres de simulation restent les mêmes que précédemment, le pas d'espace étant choisi constant dans toutes les directions et égal à 0.01 mm , quant au pas de temps, ce dernier est choisi égal à $\Delta t = 5.10^{-6} \text{ s}$. Les effets de mouillage sont imposés en haut et en bas du domaine, limites considérées comme paroi, et nous étudierons un quart de pont afin d'optimiser les temps de calculs comme décrit sur la figure (3.8). Le tableau (3.3) rassemble les données concernant la mise en place des cas étudiés.

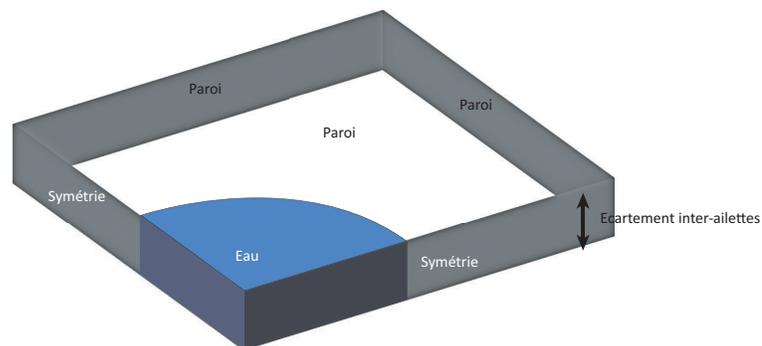


FIGURE 3.8 – Domaine initial d'étude, vue de haut, des ponts sur des surfaces horizontales.

La différence de pression entre le fluide (air) et la phase (eau) à l'interface sera relevée à l'équilibre, différence devant tendre vers zéro à mesure que les surfaces deviennent hydrophiles, cf.

Cas n°	demi-écart (en mm)	Rayon initial équivalent (en mm)
E100	1,00	1,589
E75	0,75	1,403
E50	0,50	1,308
E25	0,25	1,442

TABLE 3.3 – Données numériques des cas étudiés pour les ponts entre des plaques horizontales.

la courbure d'un caténoïde (forme vers laquelle tend un pont capillaire à mesure que la surface devient mouillante voire hydrophile) et la relation de Laplace (1.4), qui mises en correspondance montrent bien que cette différence de pression tend vers zéro. De plus, il est intéressant de vérifier le bon accord entre les angles de contact imposés sur les surfaces (2 surfaces, par symétrie) et l'angle à l'équilibre. Ces mesures sont rapportées dans les figures (3.9) et courbe (3.10). Nous voyons le bon accord entre l'imposition et la mesure, avec de plus un effet plus sensible pour les grands écartements, où une dissymétrie apparaît entre l'angle de contact en haut et celui en bas, (plus grand dans les cas hydrophobes).

Pour un angle de contact assez faible (paroi mouillante), nous pouvons constater que la différence de pression tend bien, comme prévue, vers zéro, la forme du pont tendant elle vers le caténoïde, surface minimale de révolution, où les courbures principales sont opposées (il possède donc une courbure moyenne nulle). Nous pouvons estimer l'évolution de la force s'exerçant sur la ligne de contact, en utilisant l'équation (1.15). Nous avons remplacé l'angle d'avancée par l'angle du bas et l'angle de recul par celui du haut, pour prendre en compte les déformations induites par le changement d'écartement.

$$\sigma \frac{\cos \theta_{bas} - \cos \theta_{haut}}{2} \leq \hat{f} - \hat{f}_m \leq \sigma \frac{\cos \theta_{haut} - \cos \theta_{bas}}{2}$$

Après avoir relevé les angles de contact haut et bas à l'équilibre, nous pouvons donc tracer la différence entre la force \hat{f} et la force moyenne \hat{f}_m en fonction des propriétés de mouillage statiques imposées et du demi-écart, reportée sur la figure (3.11). La force \hat{f} est définie via l'angle statique imposé.

Nous pouvons voir que ce écart, symbolisant les effets locaux des forces de contact, montre l'apparition d'une dissymétrie lors de l'augmentation de l'écartement. La force absolue \hat{f} de mouillage tend à devenir moins importante le long de la ligne de contact que la résultante moyenne (entre haut et bas).

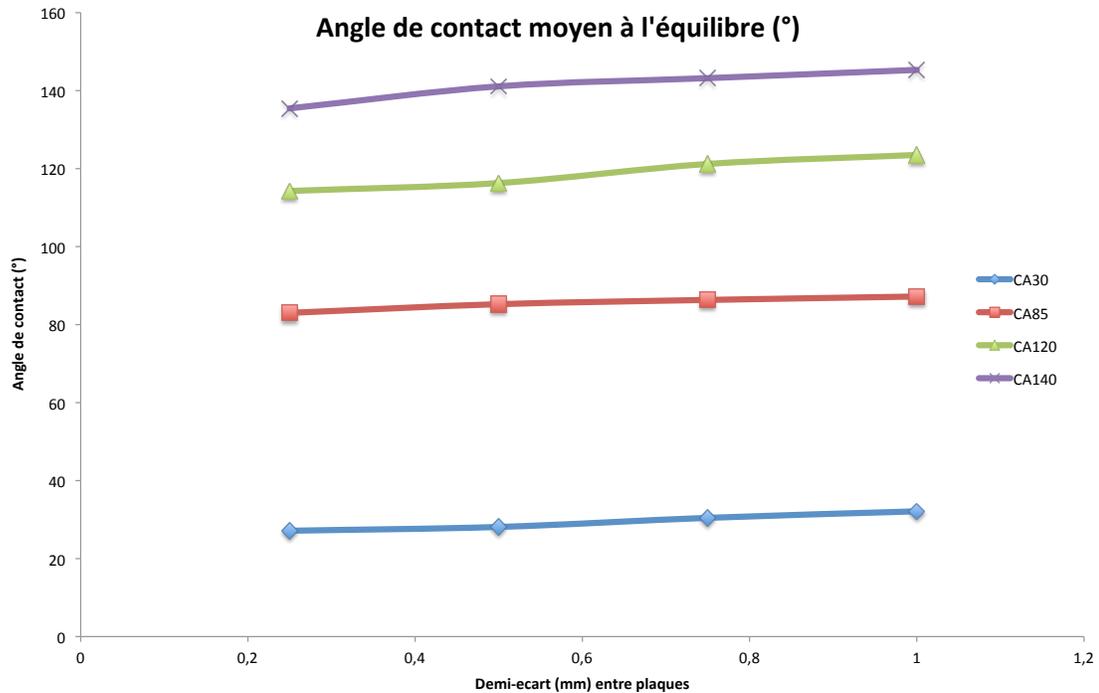


FIGURE 3.9 – Angle de contact moyen $((\text{haut} + \text{bas})/2)$ mesuré à l'équilibre, lors de l'étude des ponts sur des surfaces horizontales. (légende : $CA\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)

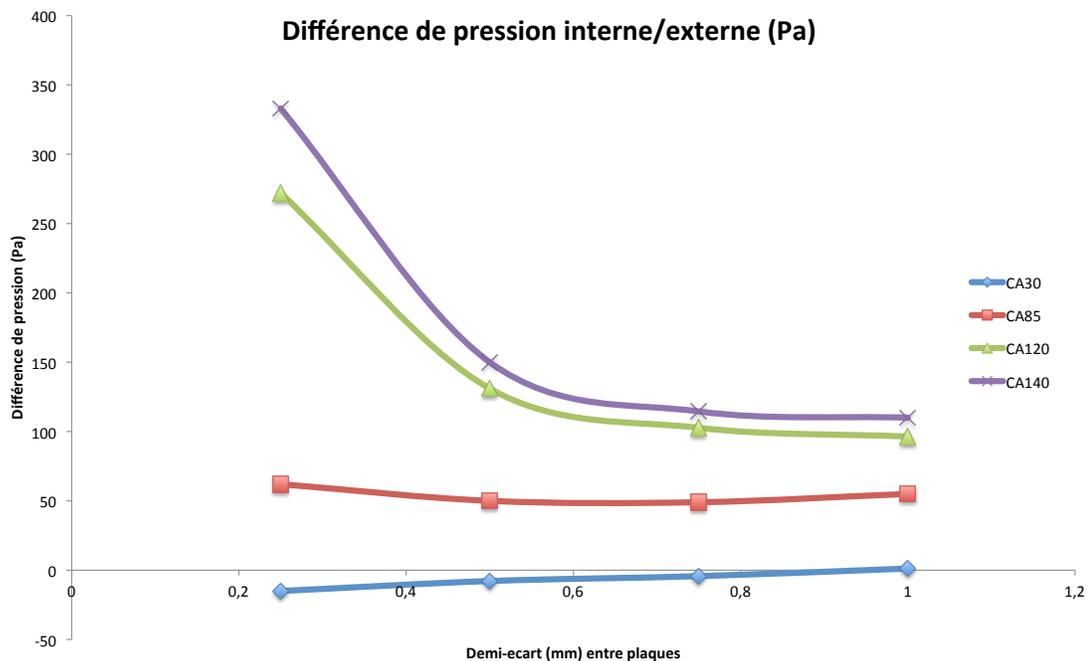


FIGURE 3.10 – Différence de pression en fonction du demi-écart et de l'angle de contact imposé pour des ponts capillaires laissés au repos. (légende : $CA\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)

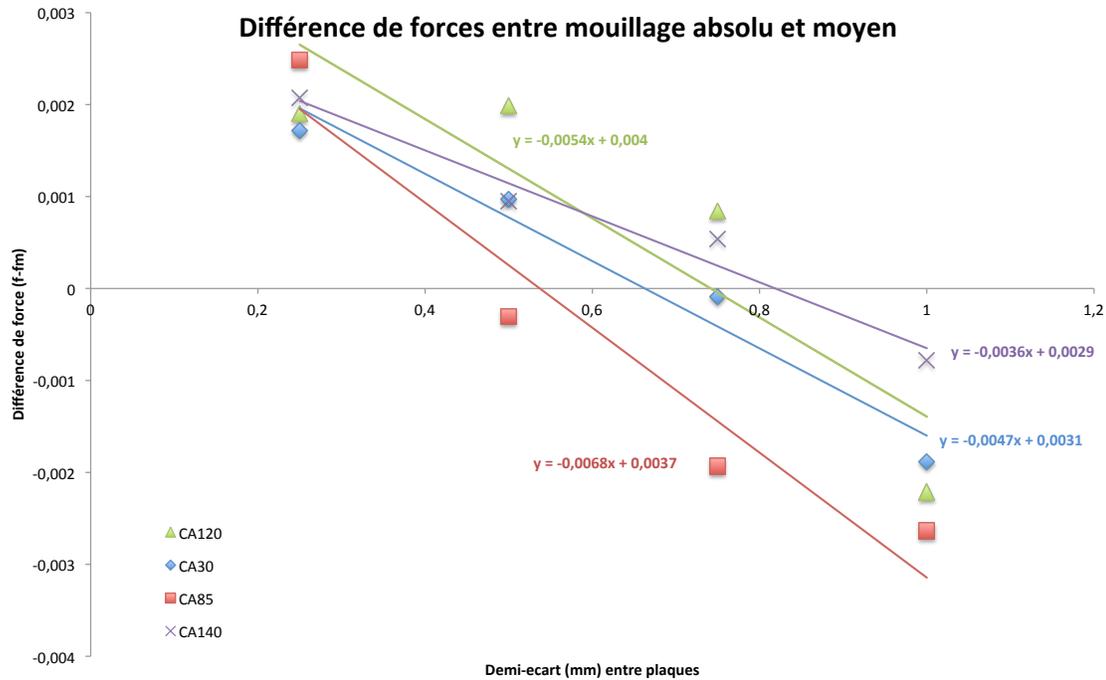


FIGURE 3.11 – Evolution de la différence entre la force \hat{f} et la force moyenne \hat{f}_m en fonction des propriétés de mouillage statiques imposées et du demi-écart. (légende : CA θ avec θ l'angle de contact imposé)

De plus, il est intéressant d'observer les forces dues aux écoulements internes, permettant au pont liquide de se maintenir en équilibre apparent entre les plaques, dans sa forme finale. La mise en équilibre, vers une forme caténoïdale ou tonnoïdale, est assez rapide, la cinétique étant par exemple décrite sur l'ensemble d'images (3.12). Les recirculations sont dissymétriques dans le cas où le volume est important (3.14), cela étant dû aux effets de gravité prépondérants qui déforment le pont. Ces recirculations sont macroscopiques, les mouvements de liquide internes étant importants. Le liquide vient du centre du pont pour venir alimenter la compétition entre effets de mouillage et gravitaires, au niveau de la ligne de contact. Ces courants sont à la fois visibles en haut et en bas, et montrent aussi l'aspect axisymétrique des ponts étudiés. L'équilibre dynamique qui résulte des écoulements internes aux ponts sont à l'origine de ces courants.

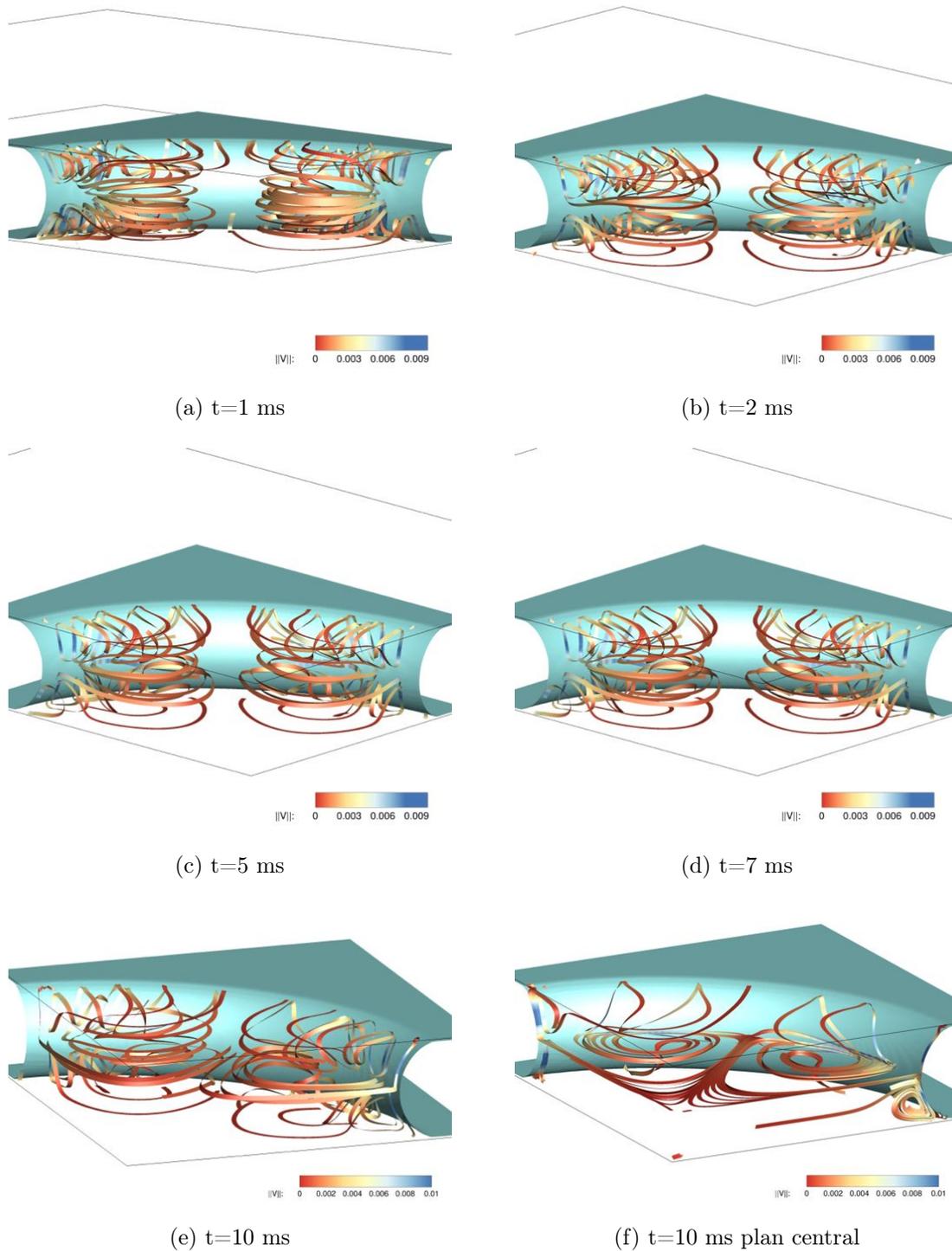


FIGURE 3.12 – Cinétique de mise en équilibre d'un pont pour $\theta = 30^\circ$ avec un demi-écart de 0.25mm , isosurface (interface eau-air, $C^S = 0.5$) et lignes de courant 3D (norme de la vitesse en couleur sur les lignes de courant, dans le repère du pont) **dans le pont**.

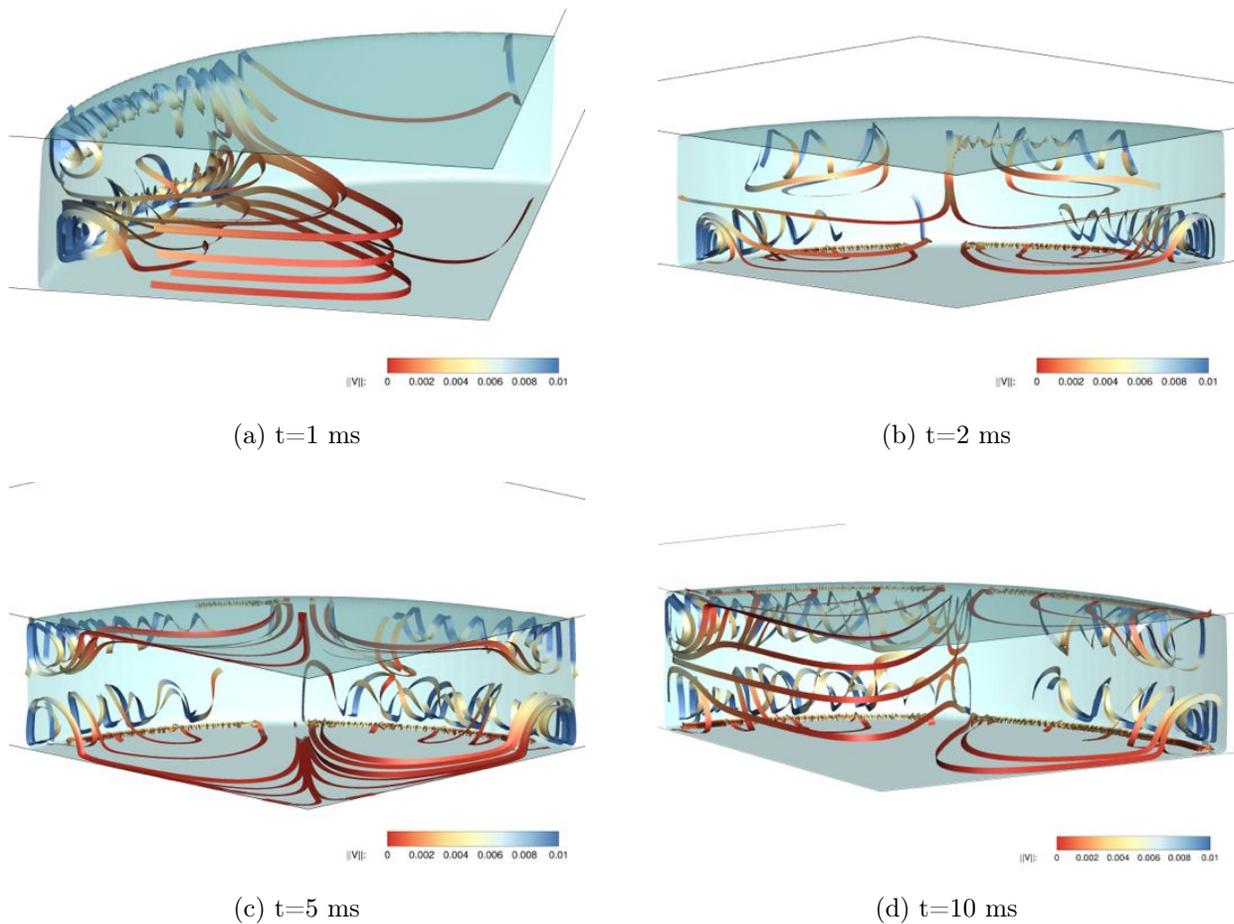


FIGURE 3.13 – Cinétique de mise en équilibre d’un pont pour $\theta = 85^\circ$ avec un demi-écart de 0.25mm , isosurface (interface eau-air, $C^S = 0.5$) et lignes de courant 3D (norme de la vitesse en couleur sur les lignes de courant, dans le repère du pont).

Ponts liquides entre des plaques verticales

Cette seconde étude sur les ponts liquides est identique à la précédente, à l’exception que les plans parallèles sont verticaux. Les conclusions de l’étude sur les gouttes sur surfaces inclinées montrent que l’inclinaison verticale est la configuration optimale de l’écoulement des volumes fixés initialement à une paroi mouillante ou non mouillante. Nous avons fait le choix d’étudier uniquement cette inclinaison afin de respecter cette conclusion et dans un souci de temps de calculs. De plus, cette approche permet de respecter la géométrie des échangeurs à ailettes étudiés, verticaux pour la plupart.

La condition de symétrie sera réduite à un demi-domaine, coupé comme le montre la figure (3.15). Les paramètres de résolution resteront les mêmes que précédemment. Il est utile de regarder d’une part les angles de contact d’avancée et de recul et d’autre part de s’intéresser à la vitesse limite de chute du volume. La figure (3.16) retranscrit les vitesses de chute limites,

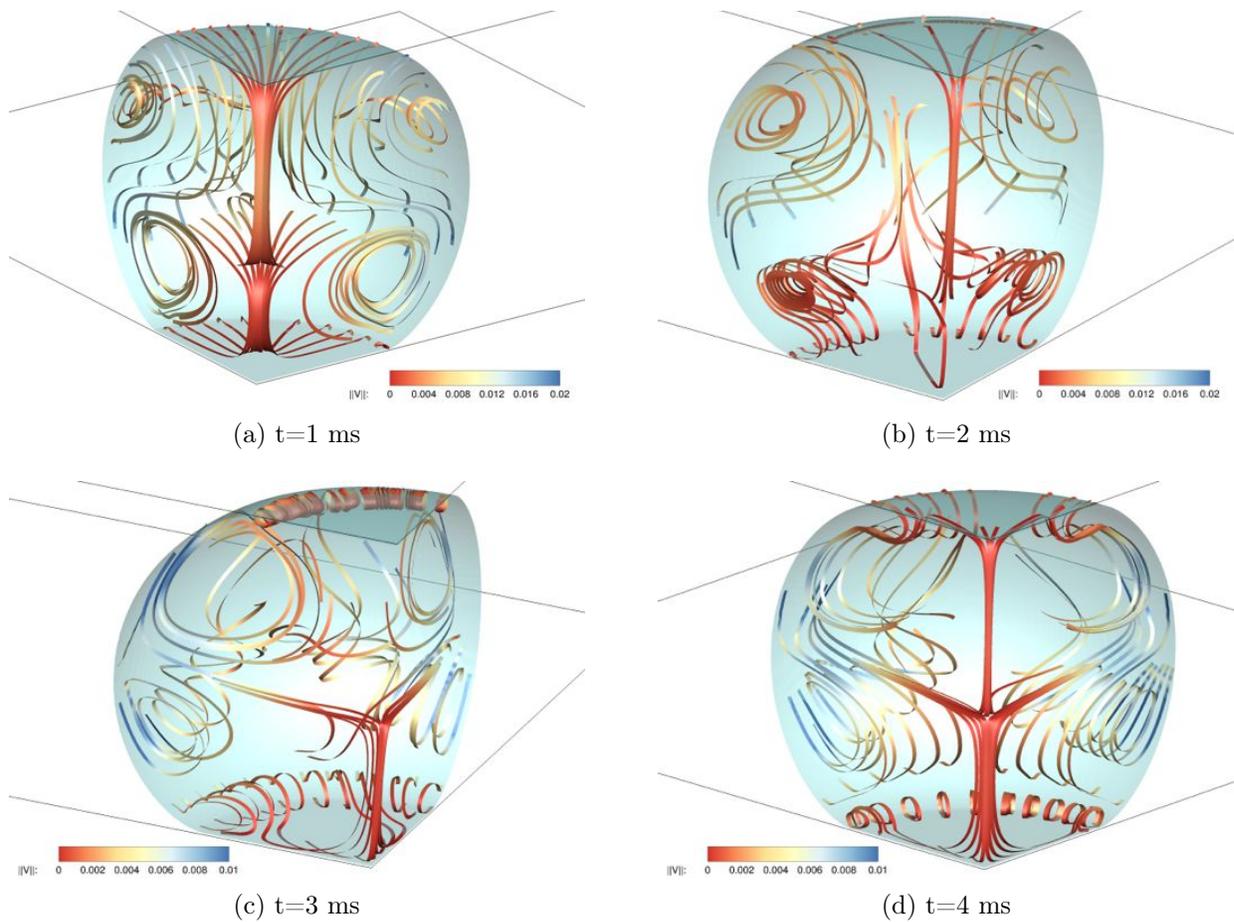


FIGURE 3.14 – Mise en équilibre d’un pont pour $\theta = 140^\circ$ avec un demi-écart de 1mm , isosurface (interface eau-air, $C^S = 0.5$) et lignes de courant 3D (norme de la vitesse en couleur sur les lignes de courant, dans le repère du pont).

calculées dans l’axe de déplacement principal avant la sortie du domaine.

Nous pouvons y voir l’impact à la fois de l’écartement, qui minimise les forces de rappel des parois dans les configurations étudiées (la vitesse augmente). De même, l’importance de la condition de mouillage est mise en évidence, pour des parois hydrophobes, la vitesse est jusqu’à cinq fois plus importante en sortie de domaine. Le confinement pour de faibles écartements contraint les ponts à se mouvoir plus lentement. Les différences entre les vitesses pour les cas mouillants et non mouillants sont conservées quelque soit l’écartement.

La forme des ponts prend rapidement une forme établie, un mouvement de translation s’opérant par la suite. Les figures (3.17 et 3.18) montrent la mise en écoulement de ces ponts, pour deux propriétés de mouillabilité et pour les deux écarts étudiés. Les effets gravitationnels sont nettement marqués, même sur des ponts liquides avec une paroi mouillante, et pour déterminer leur influence, nous nous intéresserons à l’étude des mouvements de fluides localement, dans le

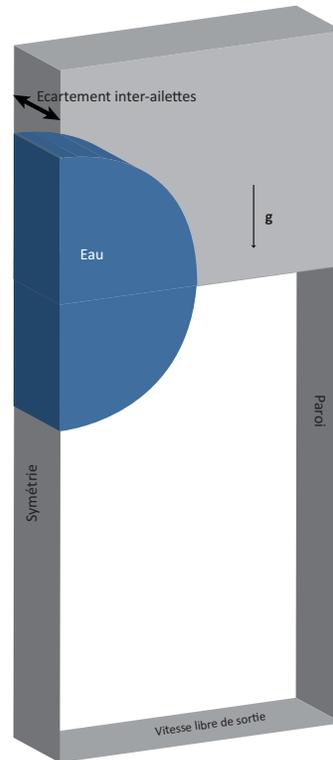


FIGURE 3.15 – Position initiale des ponts avant chute due à l'inclinaison du domaine.

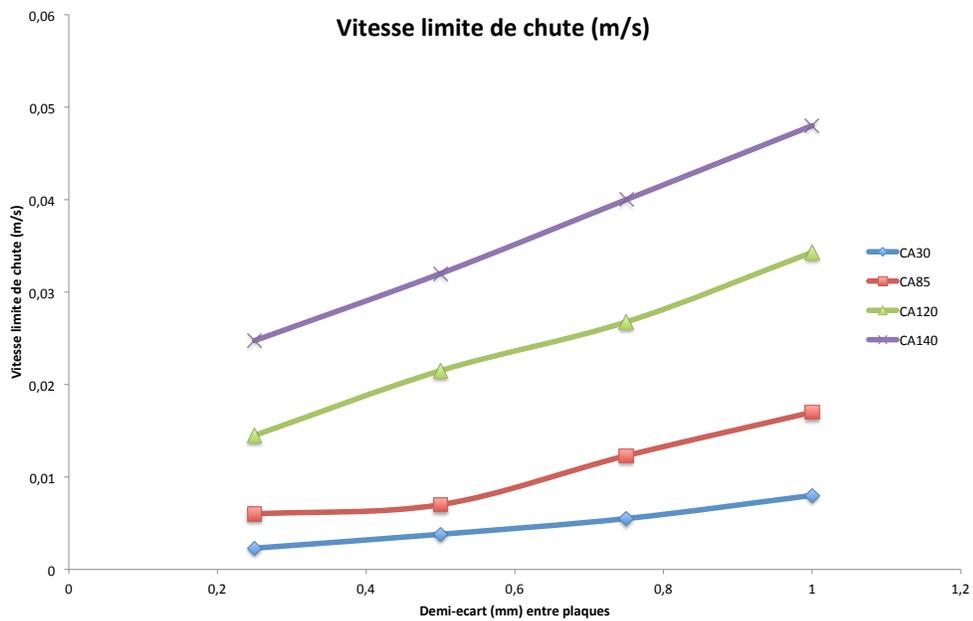


FIGURE 3.16 – Vitesse limite de sortie due à l'inclinaison du domaine dans le cas des ponts liquides inclinés à la verticale, pour différents angles de contact et écartements. (légende : $CA\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)

pont.

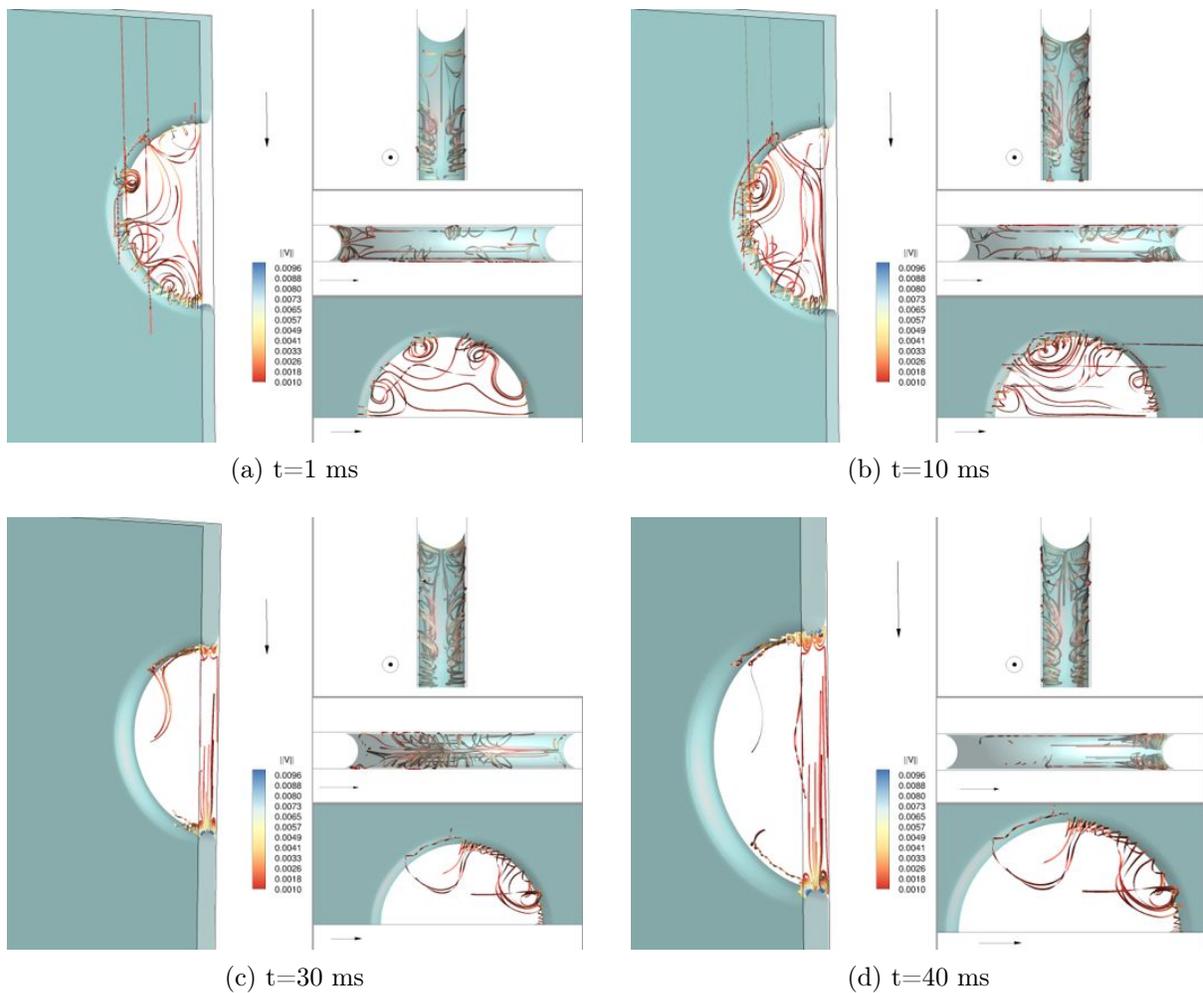


FIGURE 3.17 – Evolution d'un pont liquide entre 2 surfaces lisses mouillantes (angle de contact 30°), écartées de $0,5\text{ mm}$ et pour une inclinaison de 90° des parois.

Nous nous intéresserons à l'évolution de la vitesse, de l'angle de contact et aux mouvements internes du liquide (eau visqueuse définie dans la section sur les gouttes inclinées) lors de la mise en équilibre ainsi qu'une fois l'équilibre atteint. Nous nous intéresserons d'une part à la forme stabilisée (en déplacement) et d'autre part, à la dynamique de mise en équilibre du volume final, notamment via l'évolution de la vitesse et de l'angle de contact au niveau de la ligne de contact en fonction du temps. De plus, les mouvements internes au liquide sont mis en évidence lors du déplacement. Les effets gravitationnels se faisant plus sentir du fait de l'inclinaison à 90° des parois, les ponts liquides ont une forte tendance à se déformer en présence d'une paroi non mouillante ou partiellement non mouillante. Les effets de tensions de surface faisant office de force de rappel, nous pouvons observer tout de même une déformation sensible lorsque le matériau constituant la paroi est non mouillant (3.18). Les écoulements internes sont semblables

à ceux que nous retrouvons dans une goutte soumise à une inclinaison.

Tout d’abord, pour de faibles écarts (inférieurs à la longueur capillaire), la présence d’une paroi mouillante ralentit sensiblement (voire bloque dans certains cas) le déplacement du pont, bien que ce dernier possède une masse non négligeable. Cet effet n’est plus observé lorsque l’écartement grandit, voire dépasse la longueur capillaire. Pour de plus forts angles de contact (non mouillage partiel ou total), le pont liquide formé, de forme tonoïdale loin du caténoïde observé dans les cas mouillants, a une nette tendance à se déplacer, via des recirculations internes proches de la ligne de contact notamment (plusieurs échelles de recirculations, toutes connectées). Ces recirculations sont proches de celles observées dans le cas de gouttes se déplaçant sur une surface inclinée ou verticale. Concernant la forme, un hystérésis apparaît pour de forts écarts et de grands angles de contact, comme nous pouvons le voir sur la figure (3.18). Deux régimes sont mis en avant ici, un régime de mouillage total où un pont capillaire est bloqué par les effets de tensions de surface et de mouillage de la paroi ; et un régime de non mouillage où le pont liquide est librement mobile, que ce soit pour de faibles ou grandes dimensions (vis-à-vis de la longueur capillaires de l’eau).

Nous pouvons vérifier la loi d’Hoffman (1.12). Nous avons mesuré les angles d’avancée et les longueurs d’étalement entre les zones incurvées de l’interface, L , telle que définie sur la figure (3.19).

Bico [BQ01] explique que dans le cas de ponts liquides tombant dans un tube de dimension capillaire, un équilibre de force s’exprime entre les forces de gravité, les forces visqueuses (influence non négligeable) et les forces de tensions de surfaces et mouillabilité. Cet équilibre peut s’exprimer via l’équation (3.4).

$$\frac{8\eta V}{R^2}L = \rho gL + \frac{2\sigma \cos\theta_{bas}}{R} - \frac{2\sigma}{R-h} \quad (3.4)$$

avec R le rayon du tube.

Ici, nous sommes dans une configuration différente mais assez proche pour faire des comparaisons des relations. Le rayon du tube peut être vu comme étant l’écartement entre nos plans verticaux. Nous avons réalisé un relevé de l’angle de contact d’avancée. Nous avons par la suite calculé le paramètre en logarithme décrit dans l’équation (1.10) et son évolution en fonction des conditions de mouillage et de l’écartement de nos plaques (3.20).

Sachant que nous devons retrouver l’équation d’Hoffman-Tanner (3.5, empirique) pour les cas mouillants et non mouillants, excepté pour le cas proche d’un angle de 90° pour lequel la loi ne semble pas être en adéquation avec les relevés numériques (pente proche de 0.07 donc loin de la racine cubique), nous pouvons donner l’évolution du paramètre Γ selon la forme décrite dans l’équation (3.6) en omettant ce cas particulier. Il faut noter que les différents nombres capillaires évoqués pour chacune des conditions de mouillage sont calculés pour les différents

écartements (vitesse limite de chute en sortie).

$$\theta_{bas} = (\Gamma Ca)^{1/3} \quad (3.5)$$

$$\Gamma = f(\theta_s) = 26,5\theta_s + 364,4 \quad \forall e \quad (3.6)$$

Cette loi empirique nous permet de construire une corrélation numérique entre l'angle d'avancée et l'angle de contact statique imposé, pour nos ponts liquides, assimilés à leur volume initial sous forme sphérique. Cette loi numérique est valable dans notre configuration, à savoir une goutte de volume de $2\mu L$ située entre deux plaques distantes d'un écartement donné. Cette loi nécessite de mesurer le nombre capillaire de chute limite, basé sur les propriétés de notre fluide et sur la vitesse de sortie maximale.

$$\theta_{bas} = ((26,5\theta_s + 364,4) Ca_\infty)^{1/3} \quad (3.7)$$

Cette corrélation précise la loi d'Hoffman-Tanner dans notre configuration. Elle offre une latitude supplémentaire pour l'utilisation de cette loi empirique sur une gamme plus large que celle sur laquelle elle a été écrite.

3.2 Déplacements sous écoulement forcé

Un échangeur de chaleur d'une pompe à chaleur sur l'air est en permanence soumis à un écoulement d'air, écoulement généré par un dispositif de ventilation latérale. Ce dispositif, de type ventilateur circulaire, brasse un flot continu d'air (froid) au travers de l'échangeur, pour des vitesses allant de $1m.s^{-1}$ à $2,5m.s^{-1}$. De ce constat découlent deux études possibles, la première correspondant à prédire comment une goutte se déplace quand elle est soumise à un flux d'air latéral et qu'elle est déposée initialement sur une surface de propriétés de mouillage particulières, et la seconde est l'identique question mais concernant le déplacement de ponts liquides. Un goutte (ou un pont) sera donc cisailée par un déplacement d'air, de type écoulement de Poiseuille, entre deux plaques. Le déplacement d'un pont lui est très important, notamment pour savoir si une cassure peut survenir, cassure qui reviendrait par la suite à advecter deux gouttes collées à une des ailettes.

Déplacement de ponts liquides sur des surfaces verticales sous écoulement d'air.

Le fonctionnement avec air soufflé en continu dans les pompes à chaleur (dans les échangeurs de chaleur) induisent des cinétiques de déplacement particulières que les études précédentes ne peuvent présenter. Des ponts liquides sous écoulements latéraux sont étudiés ici, dans une configuration déjà étudiée en cas hors écoulement. Nous étudierons une taille de pont précise entre 2 ailettes séparées de $2mm$, pour différentes propriétés de surface et différentes vitesses d'écoulement d'air latérales. Le rayon apparent du pont (cf. figure 3.21) à l'état initial est de 1,2 millimètres. Une seule configuration est traitée, mais une gamme de Weber sera exposée ainsi qu'une gamme de nombre capillaire. Le tableau (3.4) détaille ces cas.

θ_c (°)	$V_{air}(m.s^{-1})$	We	Ca
30	0,1	0,167	0,0014
	1	16,667	0,014
70	0,1	0,167	0,0014
	1	16,667	0,014
140	0,1	0,167	0,0014
	1	16,667	0,014

TABLE 3.4 – Détails pour les cas étudiés pour les ponts sous écoulement latéral d’air, entre deux plaques verticales.

Le suivi temporel de la norme de la vitesse absolue adimensionnée par la vitesse de chute maximale, ainsi que de l’évolution de la différence de pression entre l’intérieur du pont (ou du volume d’eau) et l’extérieur sont détaillés dans les graphes (3.22). Nous pouvons y lire que les effets de mouillabilité ont une importance assez grande sur la vitesse de déplacement absolue, notamment que les effets hydrophobes ont tendance à moins freiner le déplacement du volume liquide, contrairement aux effets hydrophiles. De plus, en vitesse de déplacement absolue, la vitesse du gaz est assez peu ressentie par le volume de liquide, son influence est surtout portée sur la compétition entre forces gravitaires et forces dynamiques comme cela est visible sur les figures (3.23). Concernant l’évolution de la différence de pression interne/externe, les tendances sont en adéquation avec la forme des volumes (sphères pour les grands angles de contact, caténoïdes pour les faibles). Nous pouvons observer la rupture du pont dans le cas à faible vitesse et faible angle de contact, car la pression augmente d’un coup sur la section médiane avant la rupture. Cette rupture s’explique par une force de capillarité importante, qu’il conviendra d’estimer vis-à-vis des autres forces en présence.

Le mécanisme de la rupture de certains ponts est du aux effets de drainage de la paroi. La paroi mouillante a une tendance naturelle à vouloir augmenter la surface de contact du volume avec elle, de part son affinité. L’écoulement d’air vient exercer une pression plus importante sur la section centrale du pont (écoulement de Poiseuille se met en place entre les plaques) et accentue l’effet de drainage, poussant le pont à rompre en deux volumes collés de part et d’autre, sur les plaques. Par contre, lors des cas hydrophobes, la situation est différente, les surfaces repoussant le volume et l’écoulement l’accélégrant, sa forme est profilée et le volume bouge à accélération constante, sans se casser.

Nous avons superposé pour différents instants la position des ponts, pour les différentes configurations étudiées, sur les figures (3.23). Nous pouvons y observer une trajectoire différente pour chacun des cas, la trajectoire étant déterminée par la compétition des forces de gravité et des forces dues à l'écoulement. Les forces de mouillabilité, au-delà d'un effet important sur le drainage du pont pouvant entraîner sa rupture totale, n'ont qu'une influence modeste sur la trajectoire, mais néanmoins présente. Ainsi, les angles de mouillage élevés (hydrophilie) entraînent un angle de chute plus grand par rapport à la verticale descendante, montrant les effets de rappel que la paroi provoque sur le pont.

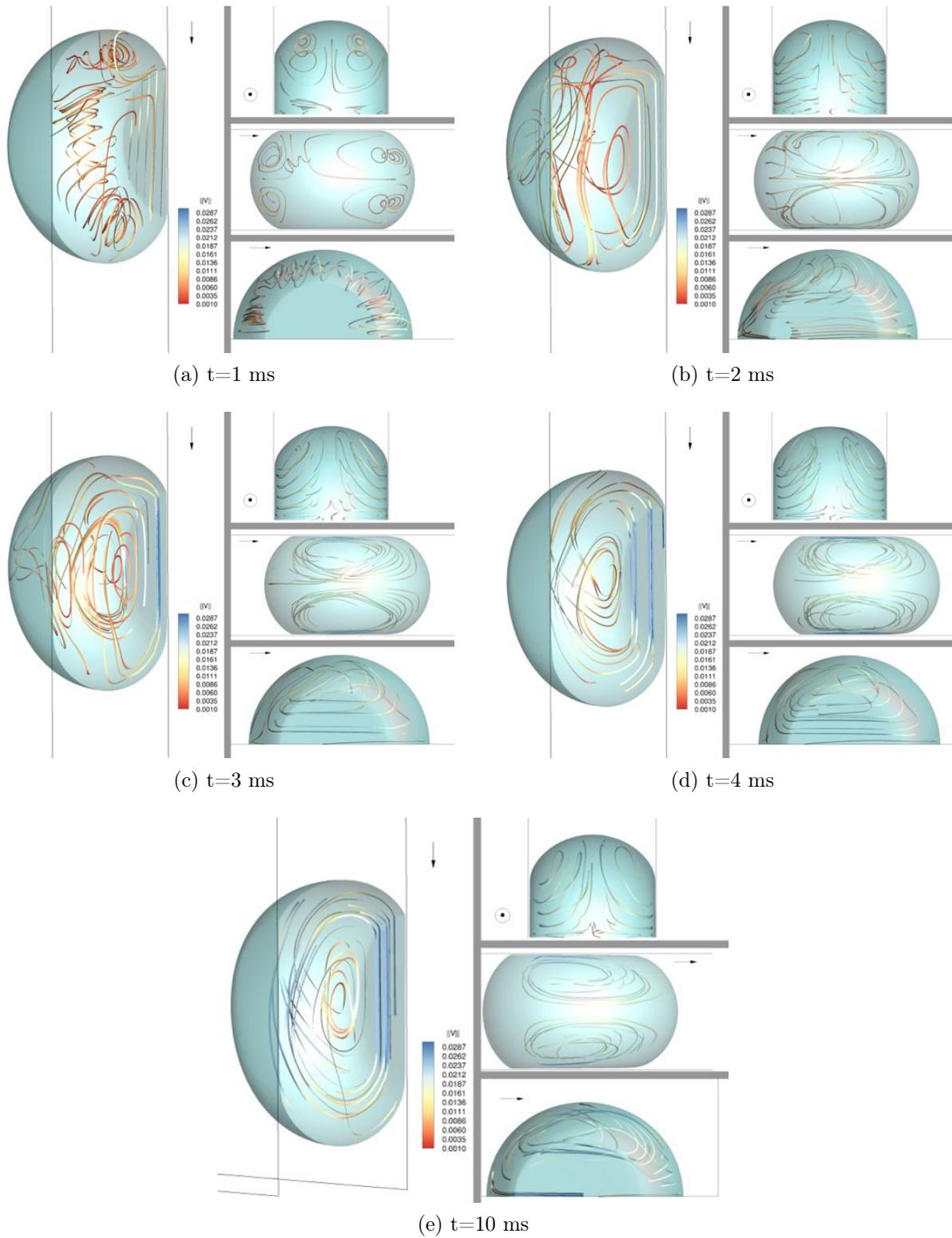


FIGURE 3.18 – Evolution d'un pont liquide entre 2 surfaces lisses non mouillantes (angle de contact 140°), écartées de 2mm et pour une inclinaison de 90° des parois.

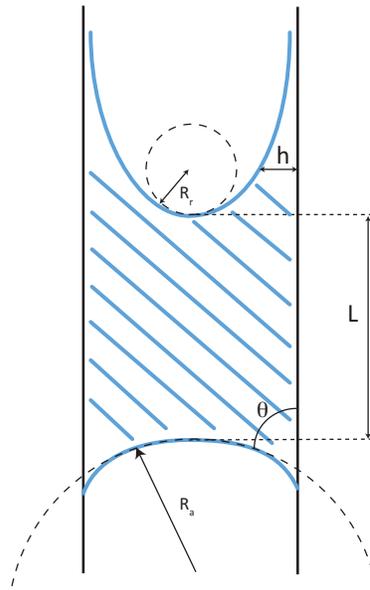
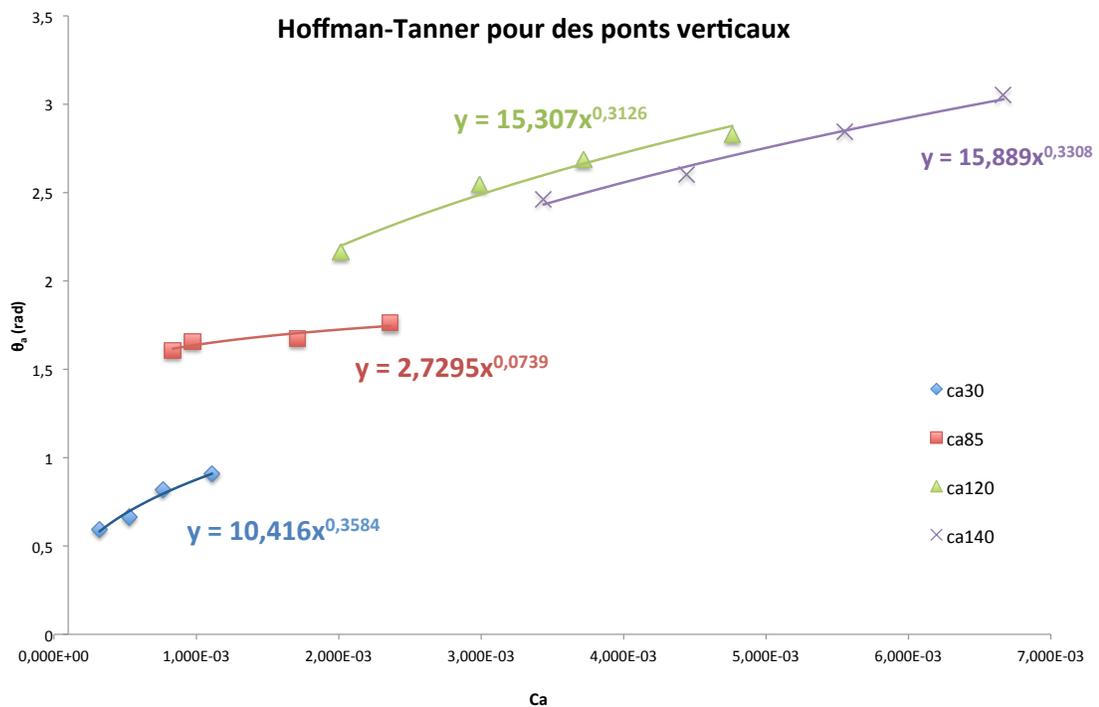


FIGURE 3.19 – Description des mesures réalisées pour vérifier la loi d'Hoffman.

FIGURE 3.20 – Evolution de l'angle d'avancé en fonction du nombre capillaire, pour différentes propriétés de mouillage. (légende : $CA\theta$ avec θ l'angle de contact imposé)

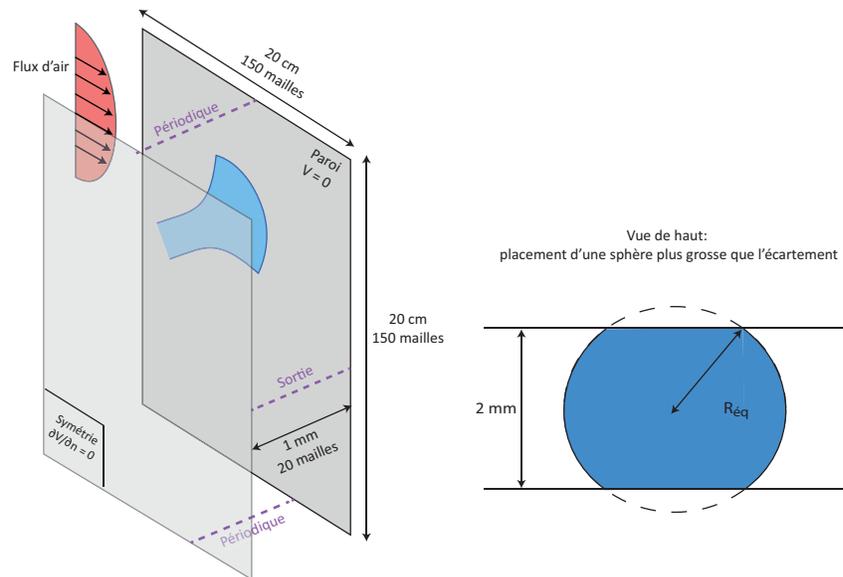


FIGURE 3.21 – Position initiale des ponts sous écoulement latéral de type poiseuille.

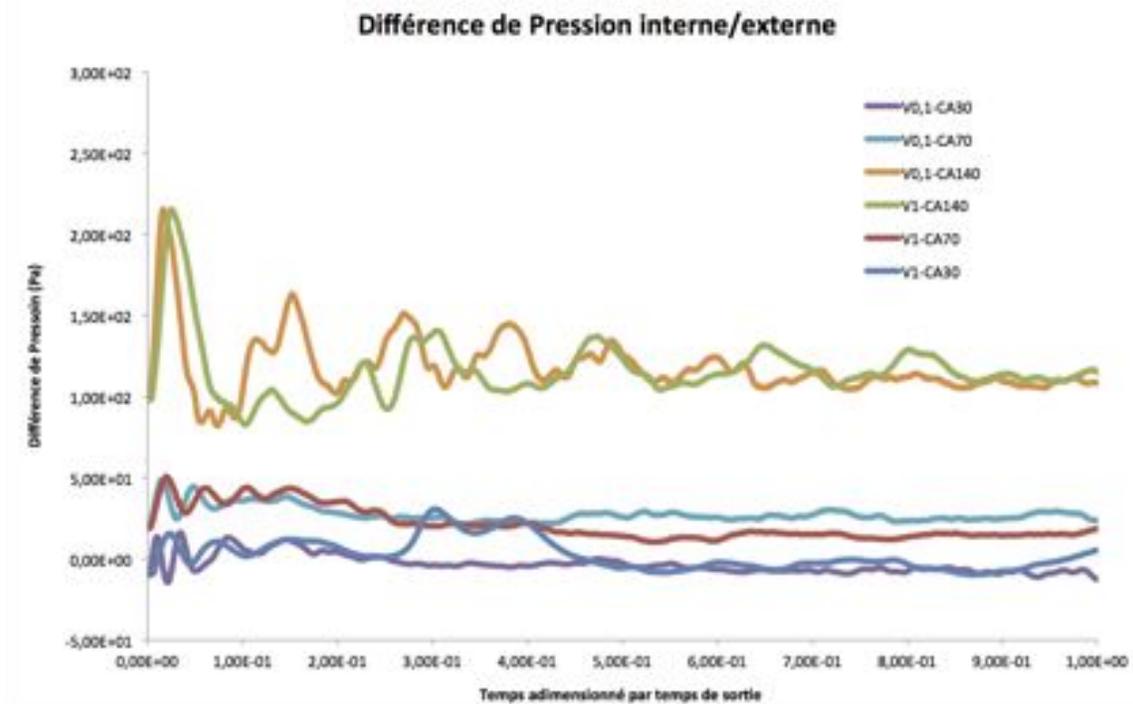
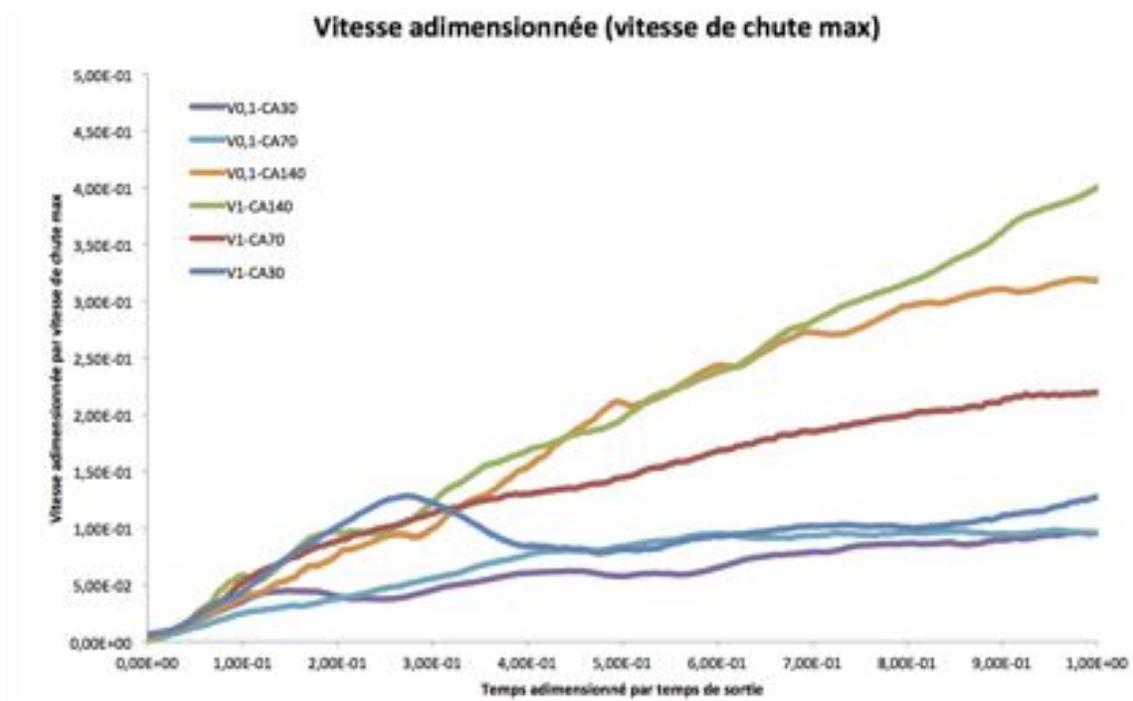
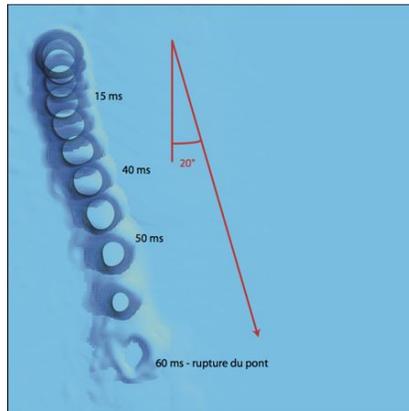
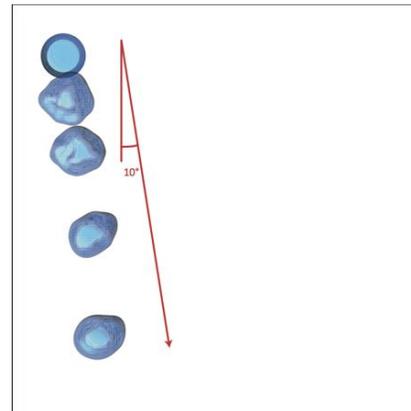


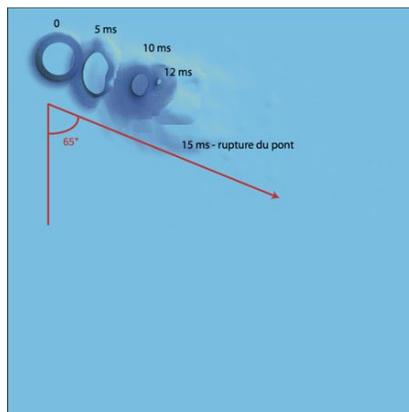
FIGURE 3.22 – Vitesses adimensionnées par la vitesse de sortie et différence de pression int/ext au cours du temps adimensionné par le temps de sortie, pont liquide soufflé entre plans verticaux.



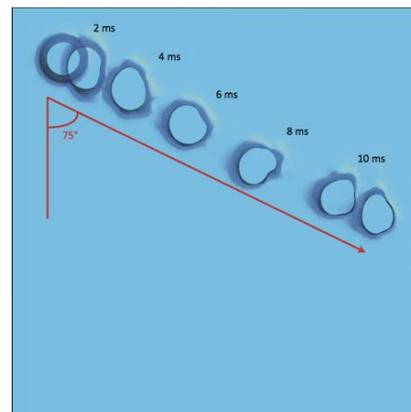
(a) $\theta = 30^\circ$ et $v = 0.1 m.s^{-1}$ - rupture du pont



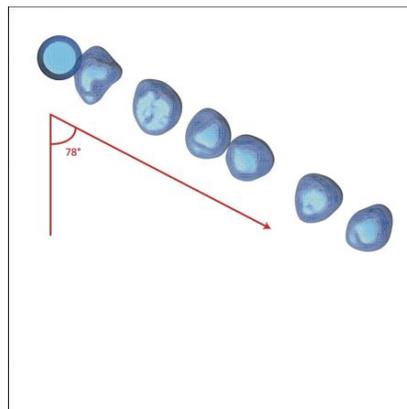
(b) $\theta = 140^\circ$ et $v = 0.1 m.s^{-1}$



(c) $\theta = 30^\circ$ et $v = 1 m.s^{-1}$ - rupture du pont



(d) $\theta = 70^\circ$ et $v = 1 m.s^{-1}$



(e) $\theta = 140^\circ$ et $v = 1 m.s^{-1}$

FIGURE 3.23 – Evolution de la trajectoire d'un pont liquide entre 2 plaques verticales soumis à un écoulement latéral d'air, en fonction de la mouillabilité.

Afin de confirmer ces résultats et de comprendre comment l'équilibre entre les forces se met en place, ce dernier justifiant un angle de chute précis, nous avons réalisé un bilan de forces sur le volume de liquide, comme développé dans (3.8). Ce bilan est réalisé en volumique, il sera nécessaire de ramener la force capillaire résultante au volume considéré.

$$m \frac{d\mathbf{V}}{dt} = m \text{ Cte} = m\mathbf{g} + \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_t \quad (3.8)$$

avec \mathbf{F}_c représentant la résultante des forces capillaires et \mathbf{F}_t la résultante des forces de trainée. La force de trainée étant une force indépendante du volume d'étude (seule compte ou presque la surface apparente à l'écoulement), les autres forces sont calculées en fonction de la masse et donc du volume réel du pont, à savoir $6,32\mu L$ dans les présentes études et non $2\mu L$ comme précédemment.

Les forces de trainée et de gravité sont les principales responsables de l'angle de chute, comme les figures (3.23) le laissent supposer. De plus, l'évolution de la vitesse montre dans la plupart des cas une pente constante, donc une accélération constante. Nous pouvons dans un premier temps estimer les forces de trainée comme étant celles (dans le référentiel relatif au pont) d'un cylindre supposé rigide, plongé dans un champs de vitesse latéral. Ainsi, si nous nous rapportons aux expériences réalisées et corrélations obtenues par Munson, Young et Okiishi [MYO98], nous pouvons définir un coefficient de trainée C_x valant 2 pour les cas où $We = 0,167$ et 1 dans le cas où $We = 16,7$.

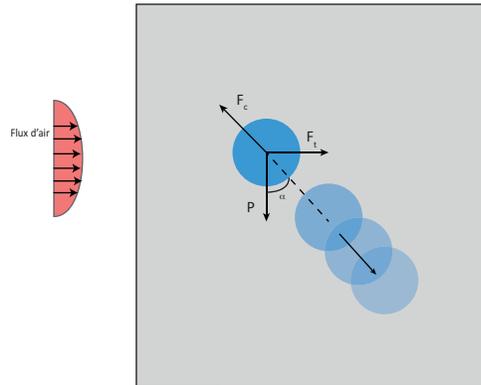


FIGURE 3.24 – Equilibre des forces appliquées à un pont sous écoulement latéral, vue de profil.

La force de trainée peut s'écrire sous la forme décrite par (3.9).

$$\mathbf{F}_t = \frac{1}{2} \rho S C_x \|V_{cylindre/air}\|^2 \mathbf{u}_x \quad (3.9)$$

avec S la surface apparente du pont pour l'écoulement, à savoir si nous le considérons tout d'abord indéformable, environ $2Re$, e l'écartement et R le rayon du pont. Ainsi, nous pouvons

en projetant la force capillaire sur le repère, en déduire sa forme (3.10) par unité de volume.

$$\mathbf{F}_{c,vol} = \begin{cases} -m Cte \sin\alpha + \frac{\rho S C_x \|V_{cylindre/air}\|^2}{2} \\ -m Cte \cos\alpha + m g \\ 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

De plus, nous pouvons aussi estimer la force capillaire à la ligne triple en intégrant sur un contour (une fois la stationnarité atteinte) la forme $\sigma \cos(\theta)$. En effet, nous pouvons définir la force capillaire s'exerçant sur le pont comme étant donnée par (3.11).

$$\|\mathbf{F}_c\| = R_{pont/plaque} \int_0^{2\pi} \sigma \cos\theta d\phi \quad (3.11)$$

avec $R_{pont/plaque}$ le rayon de la section du pont en contact avec la plaque. Cette expression est valable à tout instant, nous l'utiliserons dans toutes les simulations, y compris celles où une rupture du pont intervient (et dans ce cas, avant rupture, bien qu'il est compréhensible que cette force soit prépondérante devant les autres à ce moment-là). Ainsi, si nous comparons les deux expressions précédentes, nous pouvons déduire à partir du relevé des forces capillaires (3.11) en injectant dans la norme de l'expression du vecteur (3.10), la valeur de l'angle de chute α .

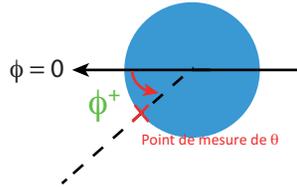


FIGURE 3.25 – Description de la mesure angulaire de l'angle de contact pour les ponts avec écoulement.

En posant $X = \tan^2(\alpha/2)$, nous réécrivons l'expression égalant les deux entités précédentes :

$$\frac{[m^2 Cte^2 + (m g)^2 + \|F_t\|^2 - \|F_c\|^2 + 2 m^2 g Cte]}{2 m Cte} X^2 - \|F_t\| X - m g = 0 \quad (3.12)$$

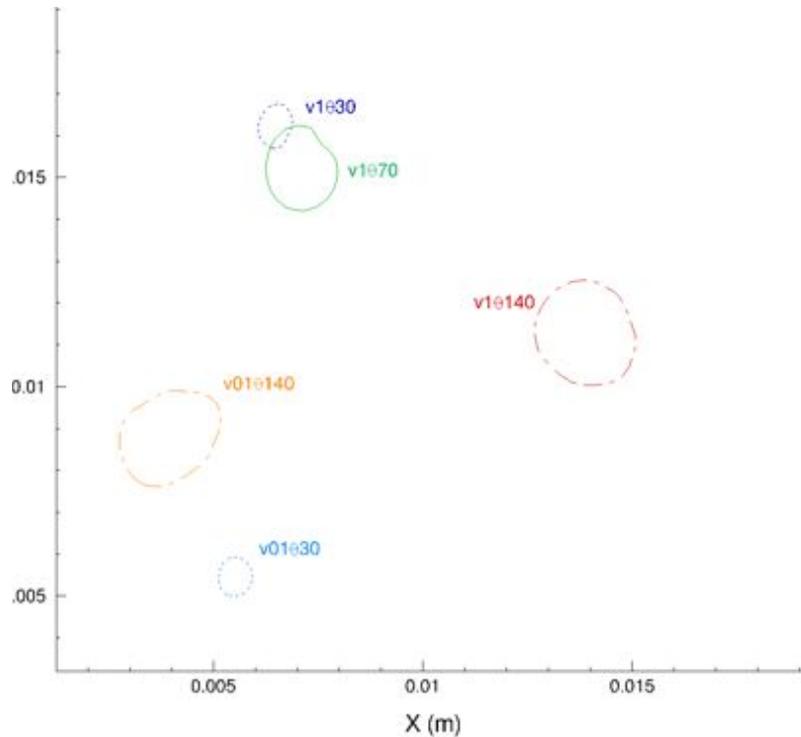
Nous avons rassemblé les résultats des estimations des forces capillaires issues de la seconde expression dans le tableau (3.5). Nous vérifions les mesures du point de vue angle de chute, qui est similaire entre les prédictions issues de la simulation et celles issues de l'expression précédente. Les mesures de l'angle de contact en fonction de la position angulaire sur la plaque sont

θ_c (°)	$V_{air}(m.s^{-1})$	We	F_c via (3.11)	α (°) d'après (3.12)	α (°) mesuré
30	0.1	0.167	2,964E-04	22	20
	1	16.667	4,251E-04	68	65
70	0.1	0.167	1,701E-05	17	16
	1	16.667	1,013E-05	69	75
140	0.1	0.167	2,999E-05	11	10
	1	16.667	3,854E-05	76	78

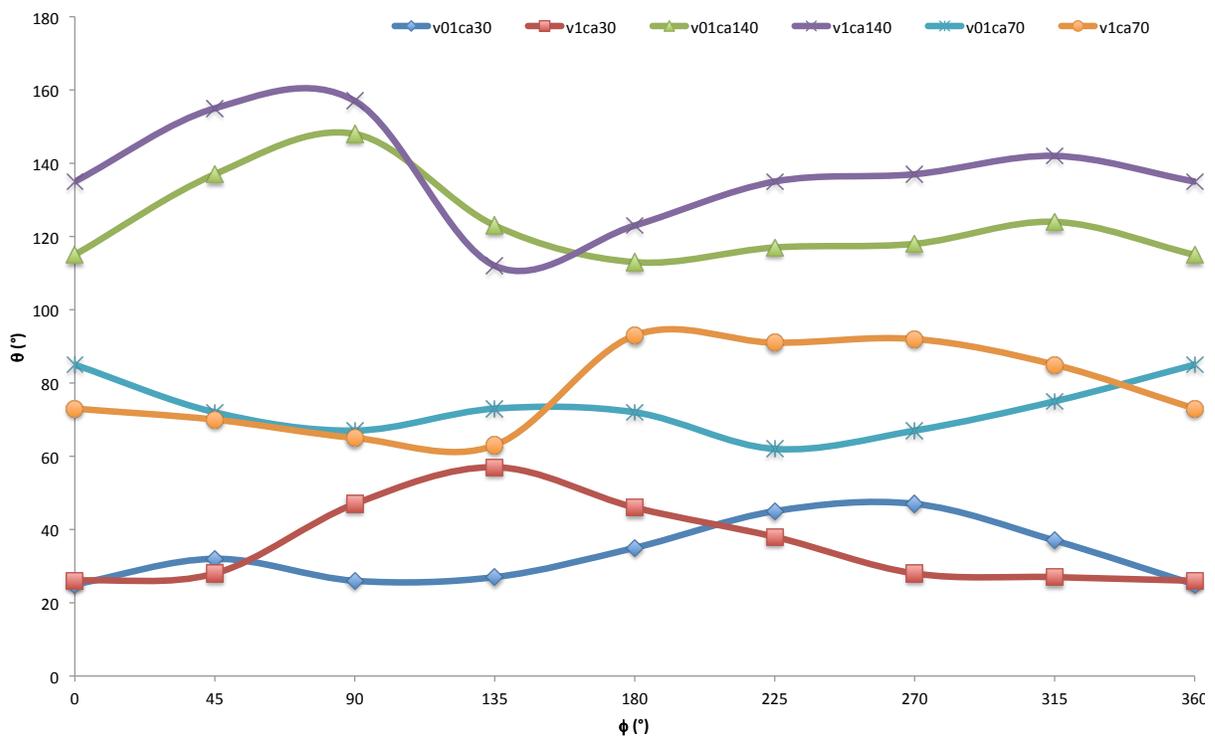
TABLE 3.5 – Calculs de la norme de la résultante des forces capillaires pour les ponts sous écoulement latéral d'air, entre deux plaques verticales.

reportées sur le graphique (3.26). Les ponts ne sont pas symétriques selon la direction de l'écoulement principal, une assez forte déformation existe comme le relevé de l'angle de contact selon le déplacement angulaire ϕ (défini sur la figure (3.25)) le montre. Cette déformation, induite par l'écoulement latéral principalement, est accentuée par la chute mais lissée par les effets de mouillage qui eux sont identiques pour toute position angulaire.

Nous pouvons constater que les relevés des angles de contact corroborent le calcul prédictif via la conservation de la quantité de mouvement concernant la force capillaire. Les mêmes ordres de grandeurs sont mesurés et calculés. De même, des forces capillaires plus élevées sont mises en jeu lors de l'imposition d'un angle de contact faible (mouillant) sur la paroi. Deux conclusions sont à tirer de cette étude mais une tendance dans les deux cas apparaît. Les courbes de la figure (3.27) montrent que si l'écoulement est négligeable devant les effets de gravité, une surface hydrophobe va réduire le temps de séjour. De même, si l'écoulement est prépondérant devant les effets de la gravité, alors une surface hydrophobe réduira encore une fois le temps de séjour.



(a) Sections transverses



(b) Angles de contact

FIGURE 3.26 – Section transverse dans le plan entre les ailettes (mi-distance entre deux ailettes) et évolution de l'angle de contact apparent en fonction de la position angulaire, pour les ponts en écoulement, mesures relevées sur leur forme stationnaire ou avant rupture selon les cas.

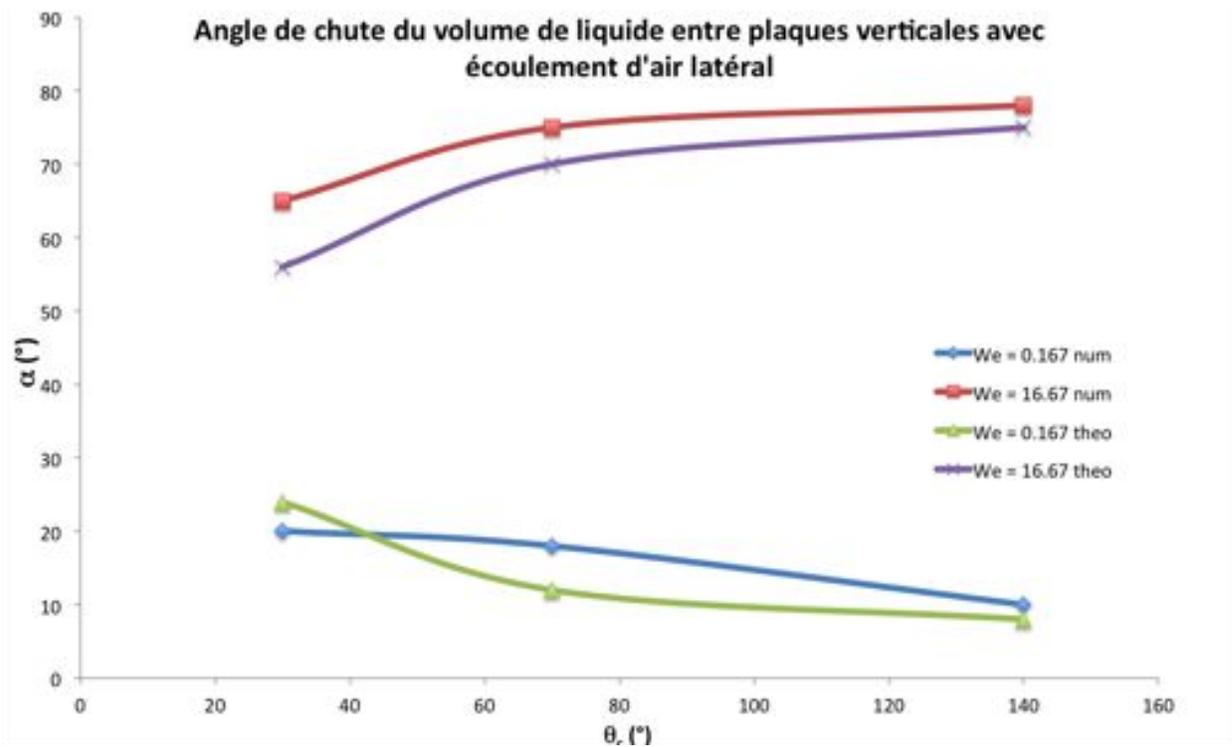


FIGURE 3.27 – Evolution de l'angle de chute verticale en fonction du nombre capillaire pour les ponts liquides soumis à un écoulement latéral d'air : comparaison entre prédiction et calcul.

3.3 Micro-structuration de la surface : la superhydrophobie

La recherche d'une solution optimale pouvant éviter l'effet de collage de l'eau lors de la période de dégivrage nous a conduit à nous intéresser à la qualité de superhydrophobie de certains matériaux. Ainsi, les ailettes des échangeurs de chaleur des pompes à chaleur pourraient être constituées de zones où les gouttes ne pourraient s'agglomérer, voire mettre en place une ailette complètement hydrophobe. Il faut nuancer cette approche par la longévité de telles surfaces, mécaniquement fragiles (arrachage des micro-rugosités "facile" par les poussières, compte-tenu des échelles).

Nous nous intéresserons à observer des comportements à l'échelle locale, chose difficilement réalisable de manière expérimentale. Pour cela, nous nous intéresserons à la transition entre les états Cassie-Baxter et Wenzel.

Transition Cassie-Wenzel et dynamique de déposition.

Nous allons étudier le cas de la déposition d'une goutte sur une surface structurée. Celle-ci est formée de picots de forme régulière répartis uniformément sur le domaine. Nous nous sommes attachés à comparer les résultats expérimentaux de Laura Barbieri [Bar06] avec les calculs numériques. L'idée principale est d'observer la transition entre le régime de type Cassie et celui de type Wenzel, transition correspondant à un empalement de la goutte sur les picots et se traduisant par une chute brutale de l'angle de contact, d'une valeur nettement supérieure à celle intrinsèque au matériau vers celle du matériau. Nous voulons voir la transition d'un état superhydrophobe vers un autre. Le domaine géométrique considéré sera un cube. Sur sa base inférieure nous disposerons un tapis de picots dont l'espacement pourra varier.

Nous nous intéresserons à une huile $C_{16}H_{34}$, dont la viscosité vaut $3.10^{-3} Pa.s$, la masse volumique vaut $769,67 kg.m^{-3}$ et la tension de surface (vis-à-vis de l'air) vaut $27,48 mN.m^{-1}$, toutes ces valeurs à $25^{\circ}C$. La transition étudiée est celle observée pour une variation du pitch (distance inter-picots, centre à centre, cf. figure (3.28)). Nous réaliserons une étude comparative avec l'expérience de Barbieri [Bar06] portant sur une étude identique mais avec de l'eau (angle de contact du matériau : 110°) qui complètera cette étude sur l'huile.

Nous avons donc fait varier le pitch pour des picots de diamètre de $10\mu m$, de hauteur $40\mu m$ et constitués d'un matériau faisant un angle de contact de 65° pour une surface plane avec cette huile. La configuration initiale est présentée sur la figure (3.29). Les évolutions des angles mesurés sont reportées en figure (3.31a) pour l'huile et en figure (3.31b) pour l'eau. Nous pouvons y déceler des comportements différents entre les simulations et les expériences, notamment sur le comportement global des cas utilisant l'huile. En effet, nous pouvons observer un comportement analogue pour les cas basés sur l'eau, avec une transition entre les états Cassie-Baxter

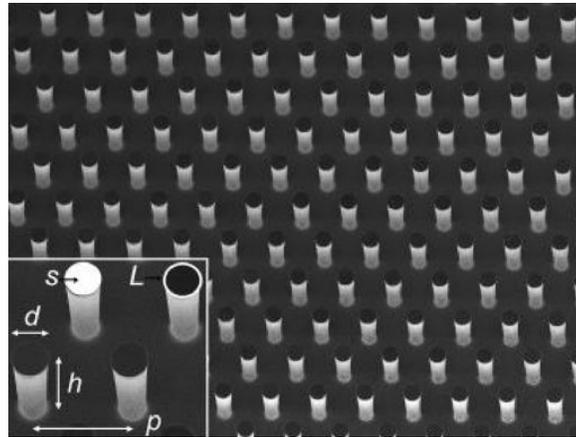


FIGURE 3.28 – Description de la géométrie des picots superhydrophobes, issue de Barbieri [LBH07].

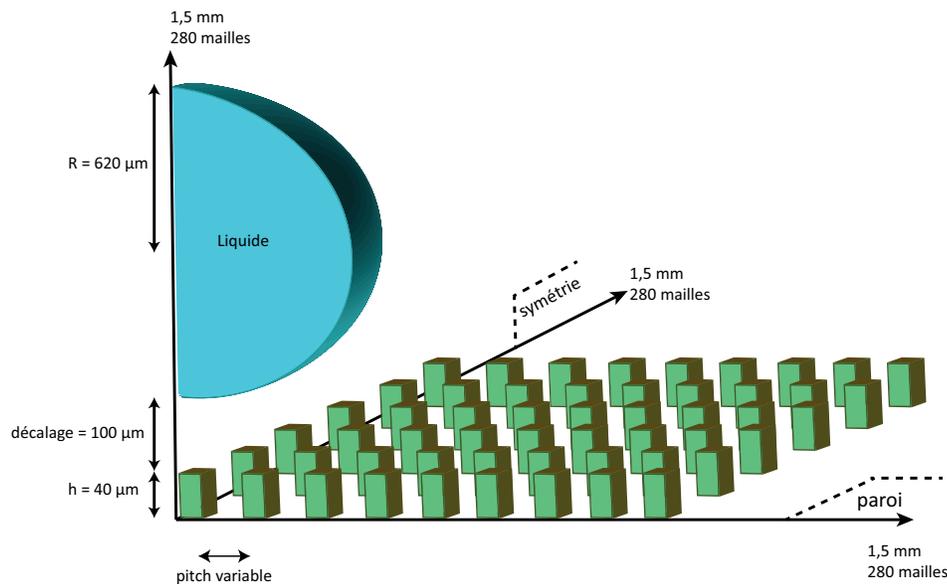


FIGURE 3.29 – Description de la configuration étudiée pour les cas de superhydrophobie.

et Wenzel. Cette transition est décalée entre expériences et simulations numériques, mais présente. Cette transition est prédictible via l'équation (1.29). Une étude en convergence n'a pu être entreprise, mais sera nécessaire afin de valider le comportement.

Les courbes théoriques présentes sur la figure (3.31) montrent le comportement d'une goutte pour les deux modes Cassie-Baxter et Wenzel. Nous pouvons voir que pour un angle à plat supérieur à 90° l'angle statique relevé augmente puis diminue en même temps que le pitch augmente, pour tendre vers la valeur à plat. Ceci est normal, si nous considérons que la goutte considère le matériau rugueux comme un matériau quasi-lisse pour de grands pitches. Au contraire, si le matériau est plutôt mouillant en configuration lisse, alors nous pouvons voir que la transi-

tion n'apparaît pas. Les courbes théoriques ne se croisent pas dans ce cas de figure, donc nous pouvons supposer qu'aucune transition n'est possible. Pourtant, l'expérience montre son existence. De plus la faible rugosité (pitch élevé) rend le matériau plus oléophile qu'il ne devrait si nous supposons la constatation précédente vraie. La rugosité expérimentale, visible sur la figure (3.30), est à plusieurs échelles. La mise en place numérique de ces différentes échelles n'est pas possible. L'objectif est de modéliser des comportements sur de grandes surfaces (ailettes) donc la modélisation des effets aux petites échelles pourra être un travail d'ouverture intéressant permettant de diminuer les coûts numériques.

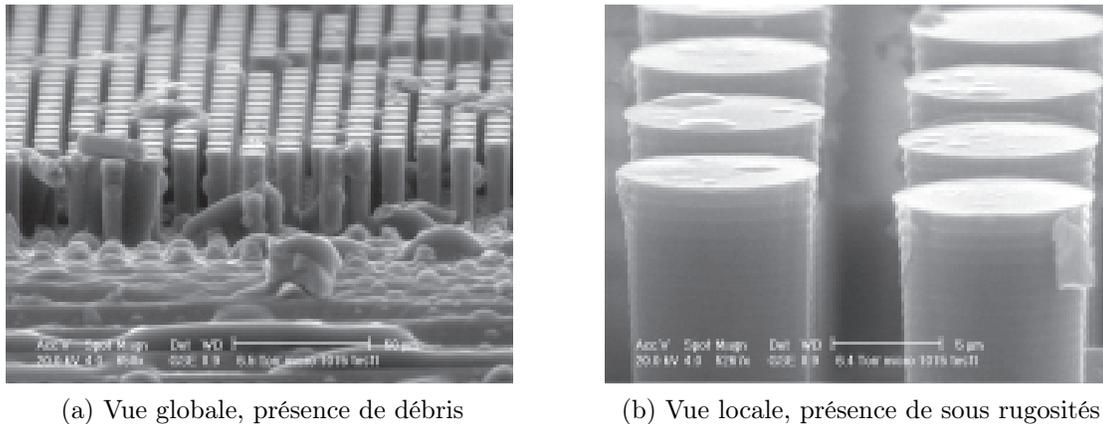
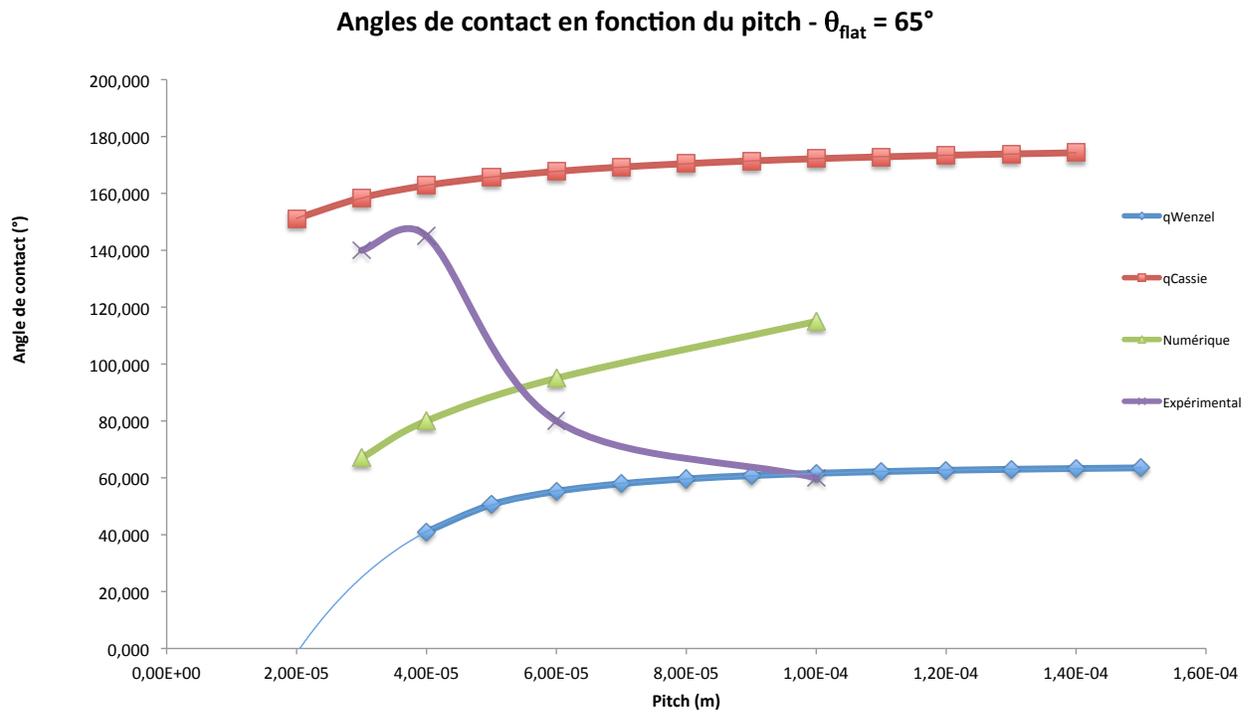


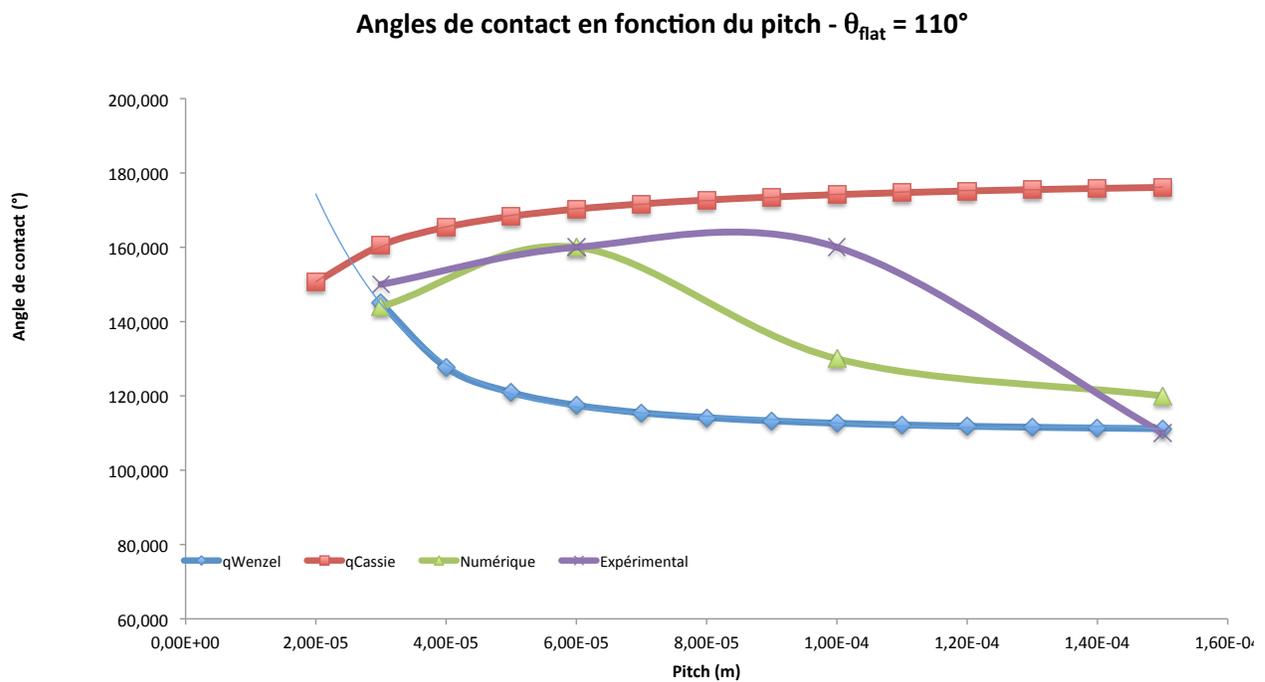
FIGURE 3.30 – Vue au microscope électronique à balayage de la surface de picots expérimentaux.

Les courbes numériques reproduisent assez bien ce comportement dans le cas d'un matériau non mouillant, comme c'est le cas dans les cas avec l'eau. Toutefois, cette transition est décalée par rapport aux expériences, la rugosité numérique étant parfaite, une sur-rugosité peut exister sur les matériaux utilisés et conçus pour les expériences. Cette sur-rugosité montre une caractéristique encore superhydrophobe malgré le seuil atteint. La tendance mesurée numériquement est dans tous les cas identique à celle des expériences. Au contraire, pour les expériences numériques réalisées avec l'huile de paraffine, l'influence de l'angle de contact à plat est nette. Aucune transition existe entre les états Cassie-Baxter et Wenzel, bien qu'un comportement hybride soit présent. En effet, nous pouvons lire sur la figure (3.31a) que l'angle de contact est intermédiaire.

Les figures (3.32) montrent de plus une vue en trois dimensions de l'évolution d'une goutte d'huile déposée sur une surface réalisée via la géométrie décrite précédemment (pitch de $30\mu m$). Les figures (3.33-3.34-3.35) montrent une coupe sur le plan de diamètre le plus grand de cette même goutte pour différents pitches, avec notamment l'évolution du champ de pression. Nous pouvons observer que la goutte vient se plaquer contre la surface des picots à l'équilibre. Des suppressions locales, dues à la courbures plus importante contre les picots, apparaissent. En outre, si l'écartement entre picots est suffisamment large, la remontée de la goutte (receding) pourra réussir à vider certains interstices si la dynamique de la goutte a suffisamment d'énergie pour lutter contre les forces capillaires dans le liquide emprisonné entre ces picots.



(a) Huile



(b) Eau

FIGURE 3.31 – Evolution de l'angle de contact apparent à l'équilibre, résultant de la présence de picots sur une surface, pour les fluides huile et eau.

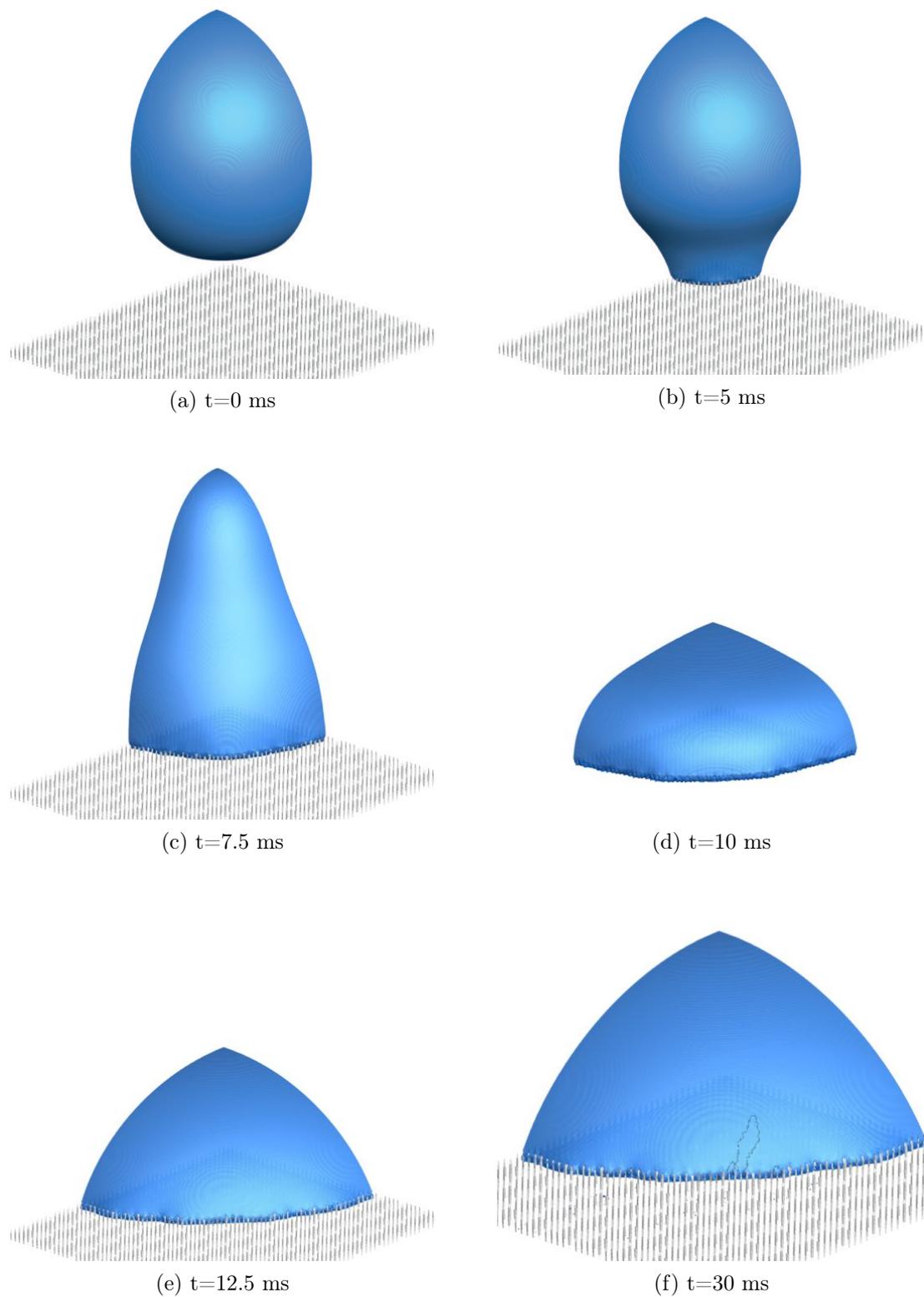


FIGURE 3.32 – Vue 3D d’une goutte d’huile sur un matériau superhydrophobe à angle de contact de 65° à plat avec un pitch de $30\mu m$ (isosurface de l’interface air-huile en bleu).

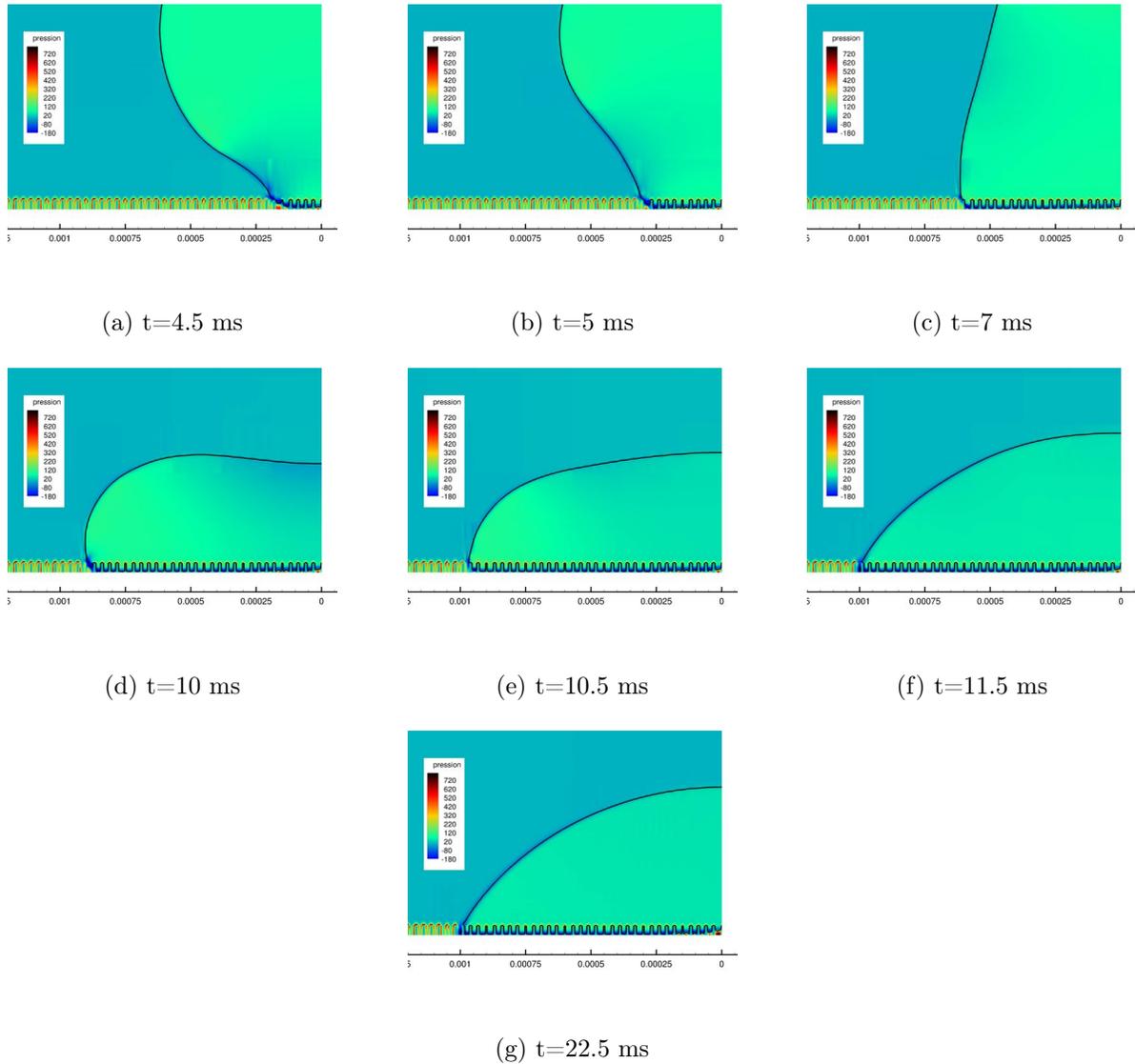


FIGURE 3.33 – Vue 2D d’une goutte d’huile sur un matériau superhydrophobe à $\theta_s = 65^\circ$ à plat avec un pitch de $30\mu m$ (coupe pour le diamètre maximal), champ de pression et isocontour en noir de la fonction $VOF = 0.5$.

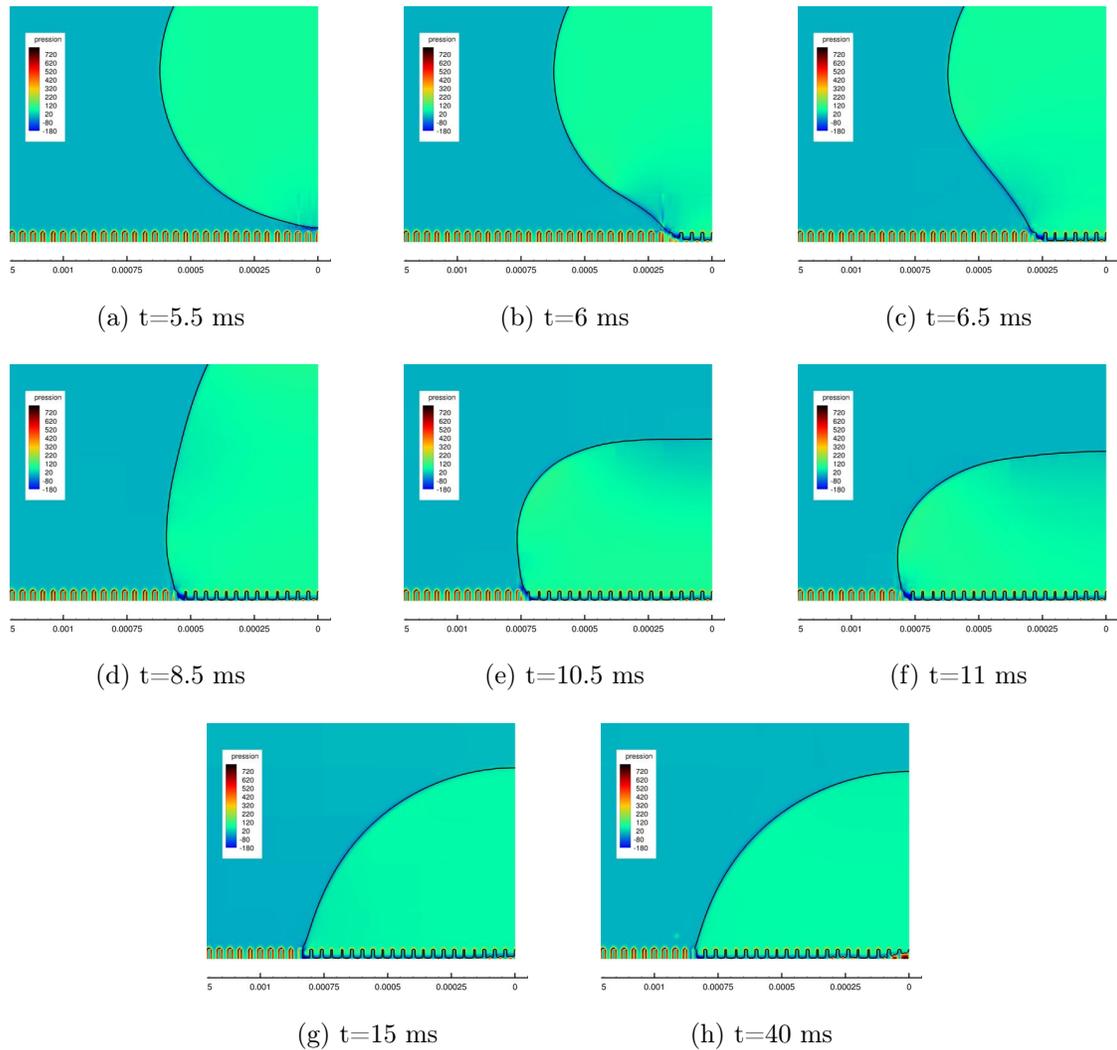


FIGURE 3.34 – Vue 2D d’une goutte d’huile sur un matériau superhydrophobe à $\theta_s = 65^\circ$ à plat avec un pitch de $40\mu m$ (coupe pour le diamètre maximal), champ de pression et isocontour en noir de la fonction $VOF = 0.5$.

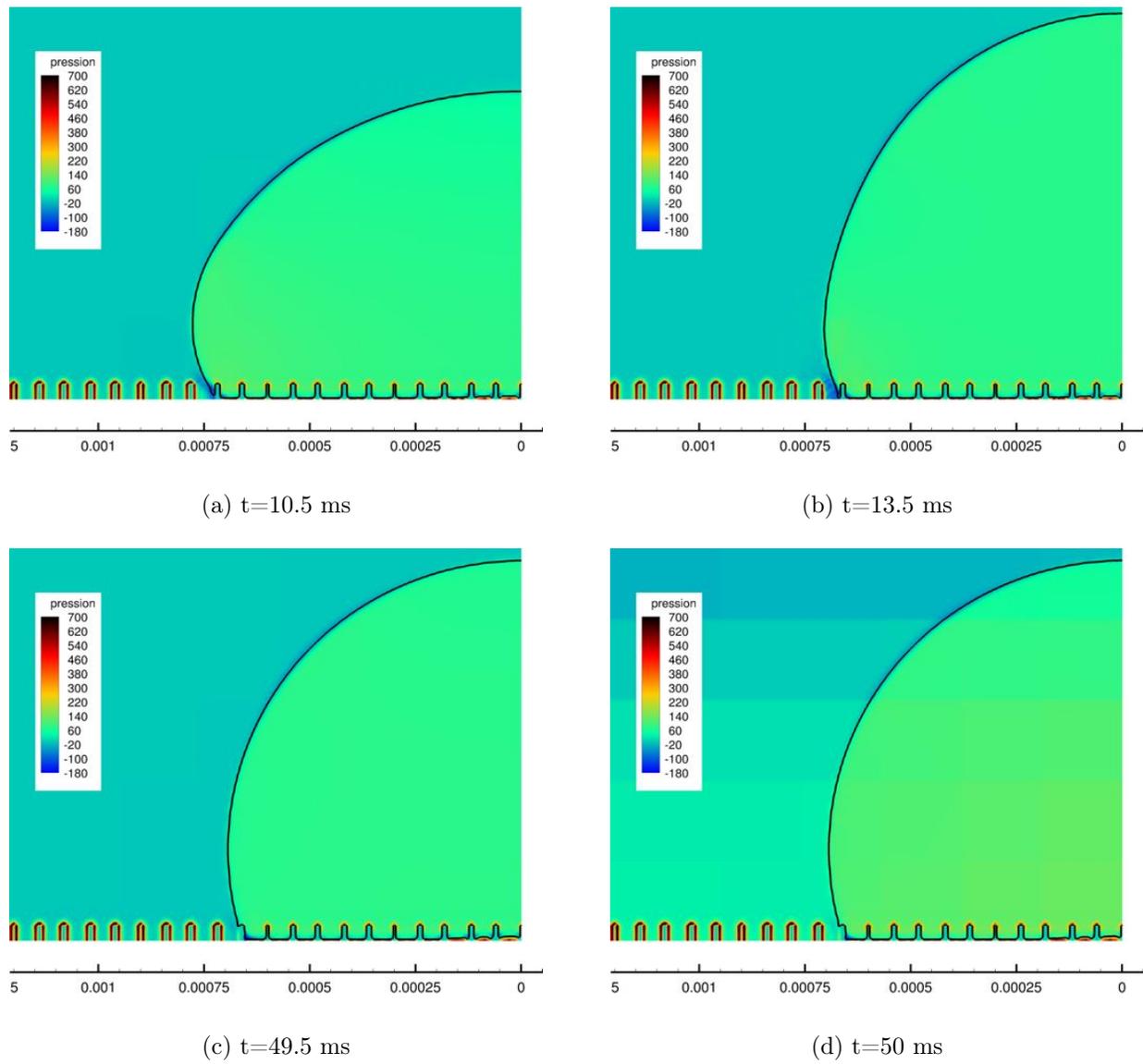


FIGURE 3.35 – Vue 2D d’une goutte d’huile sur un matériau superhydrophobe à $\theta_s = 65^\circ$ à plat avec un pitch de $60\mu m$ (coupe pour le diamètre maximal), champ de pression et isocontour en noir de la fonction $VOF = 0.5$.

Nous avons étudié les écoulements internes proches des picots lors de l'étalement d'une goutte d'huile sur une surface de pitch $100\mu m$. Nous avons choisi cette configuration afin de comprendre pourquoi la transition Cassie-Wenzel ne se produit pas.

Nous pouvons voir sur les figures (3.36) les recirculations qui se mettent en place au niveau des picots, lors de la chute initiale de la goutte puis de son receding et stabilisation. Des écoulements contra-rotatifs existent en tête et en pied de picots, afin d'assurer un effet moteur permettant à la goutte des les franchir ou de s'y accrocher. Ces écoulements, absents sans picot sont générés par des forces de rappel à leur niveau. De la même façon, des surpressions apparaissent autour des picots immergés, dues à des effets de courbure importants de l'interface à cause de la présence même des picots.

Il convient aussi d'étudier à une échelle un peu plus grande l'évolution de la ligne triple, en vue de dessus, afin d'observer les changements de courbure lors des phases d'avancées et de recul de la goutte. Nous pourrions aussi observer les effets de surpression le long de la ligne de contact. Les vues (3.37 et 3.38) ont été réalisées à $10\mu m$ de hauteur, afin d'avoir un contraste suffisant sur le champ de pression. En effet, la goutte d'huile, s'enfonçant totalement sur toute la hauteur des picots, écrase littéralement le matériau ne permettant pas de discerner la pression de manière claire. Nous pouvons observer pour de faibles pitch un effet de compression lors de la phase d'avancée le long de la ligne de front. Cette compression disparaît par la suite. Elle est due, comme pour les cas de gouttes sur surface lisses inclinées, à des effets de recirculations importants le long de la ligne de contact, et présente ici une distribution contrainte par la présence des picots.

De plus, nous pouvons observer un effet de vidange des interstices vers la fin de la simulation, près de la zone centrale (le trou qui apparaît). Pour de plus forts pitches, nous observons de manière générale une pression plus forte, répartie sur l'ensemble du matériau et non sur les têtes de picots. Enfin, la forme de la ligne de contact a tendance à suivre la disposition des picots, et possède une courbure dépendant de la nature du mouvement de la goutte (avancée ou recul).

Nous pouvons aussi observer une distribution sur la pression pour le cas à faible pitch présentant deux échelles de motifs. La plus grande échelle montre la présence d'un macro-motif sur les picots eux-mêmes, motifs du à une limite en terme de maillage. Ce macro-motif explique le champ de pression présentant des géométries locales carrées à certains endroits, avec un agencement régulier. Si nous observons plus finement le motif des picots résultant du maillage, nous pouvons voir que ces carrés de pression suivent les formes de la figure (3.39). Une simulation avec un maillage plus fin (doublé dans toutes les directions, nécessitant plus de ressources de calculs) montre que cet effet est uniquement du au maillage et ne modifie rien de la dynamique et de l'équilibre observés.

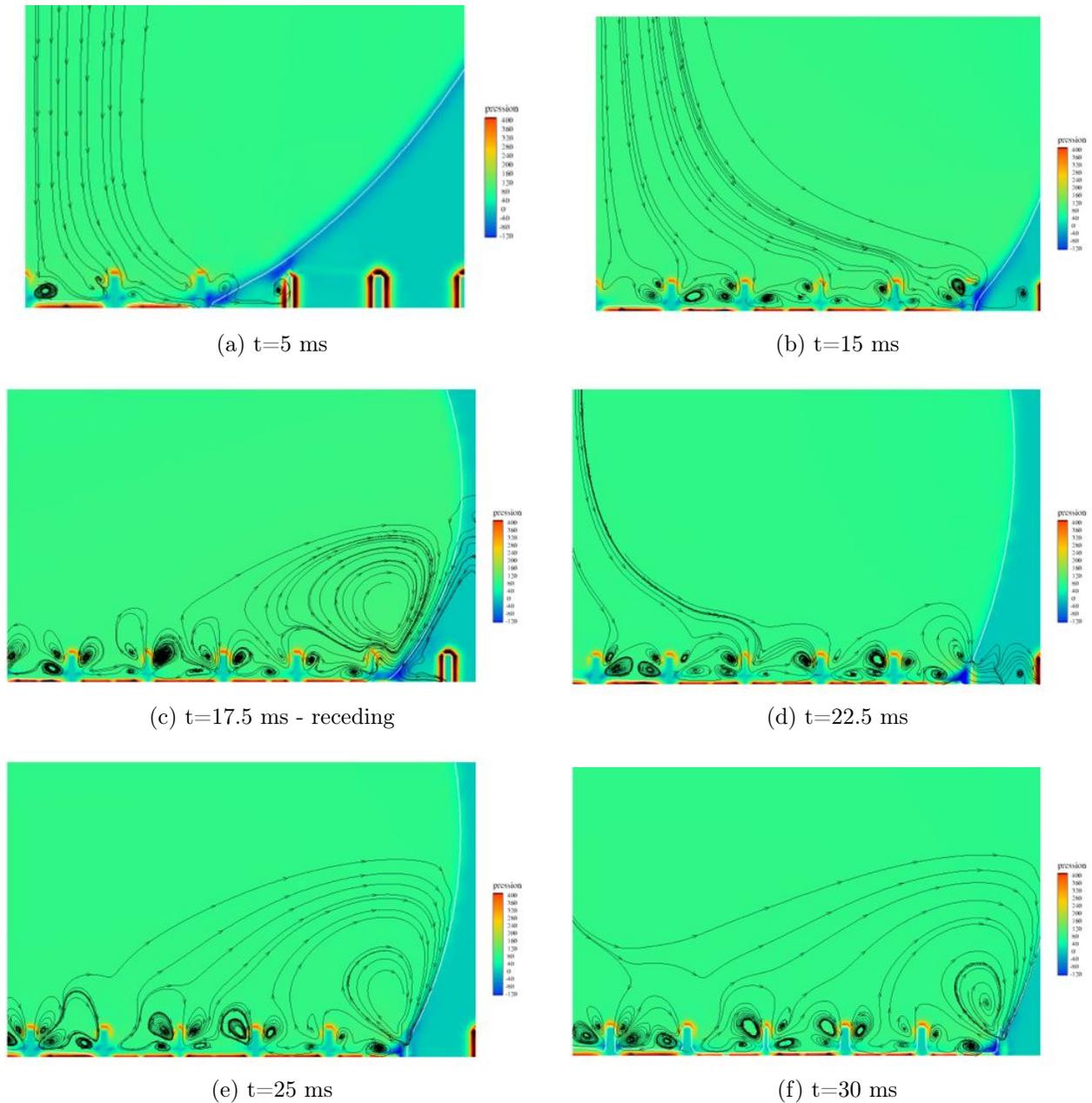


FIGURE 3.36 – Vue 2D d’une goutte d’huile sur un matériau superhydrophobe à angle de contact de 65° à plat avec un pitch de $100\mu m$ (coupe pour le diamètre maximal), lignes de courant en noir, isocontour en blanc de la fonction $VOF = 0.5$ et champ de pression.

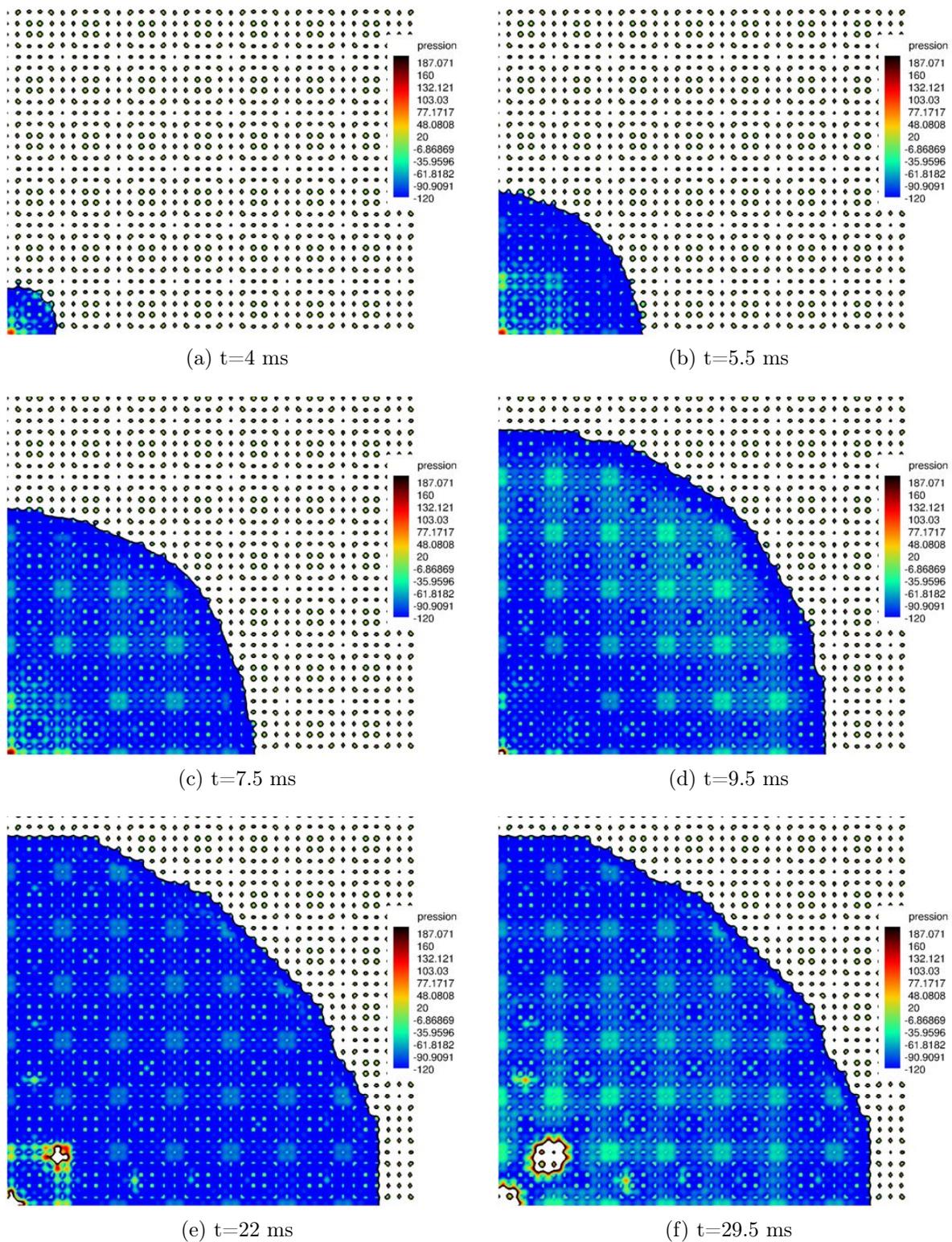


FIGURE 3.37 – Vue dessus d’une goutte d’huile sur un matériau superhydrophobe à angle de contact de 65° à plat avec un pitch de $30\mu\text{m}$ (coupe à la hauteur de $10\mu\text{m}$), isocontour en noir de la fonction $\text{VOF} = 0.5$ et champ de pression (points noirs : picots vus de haut).

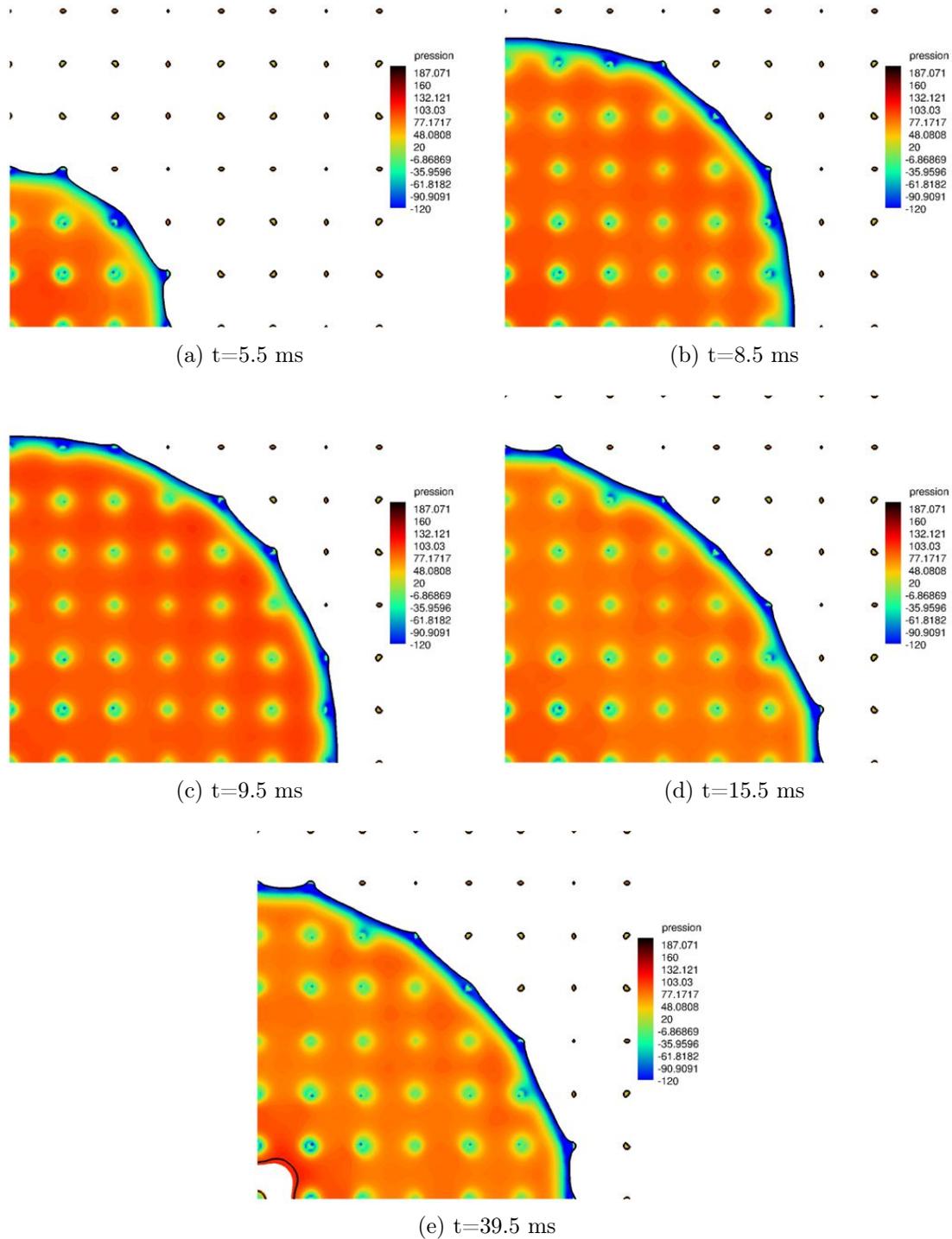


FIGURE 3.38 – Vue dessus d’une goutte d’huile sur un matériau superhydrophobe à angle de contact de 65° à plat avec un pitch de $100\mu\text{m}$ (coupe à la hauteur de $10\mu\text{m}$), isocontour en noir de la fonction $\text{VOF} = 0.5$ et champ de pression (points noirs : picots vus de haut).

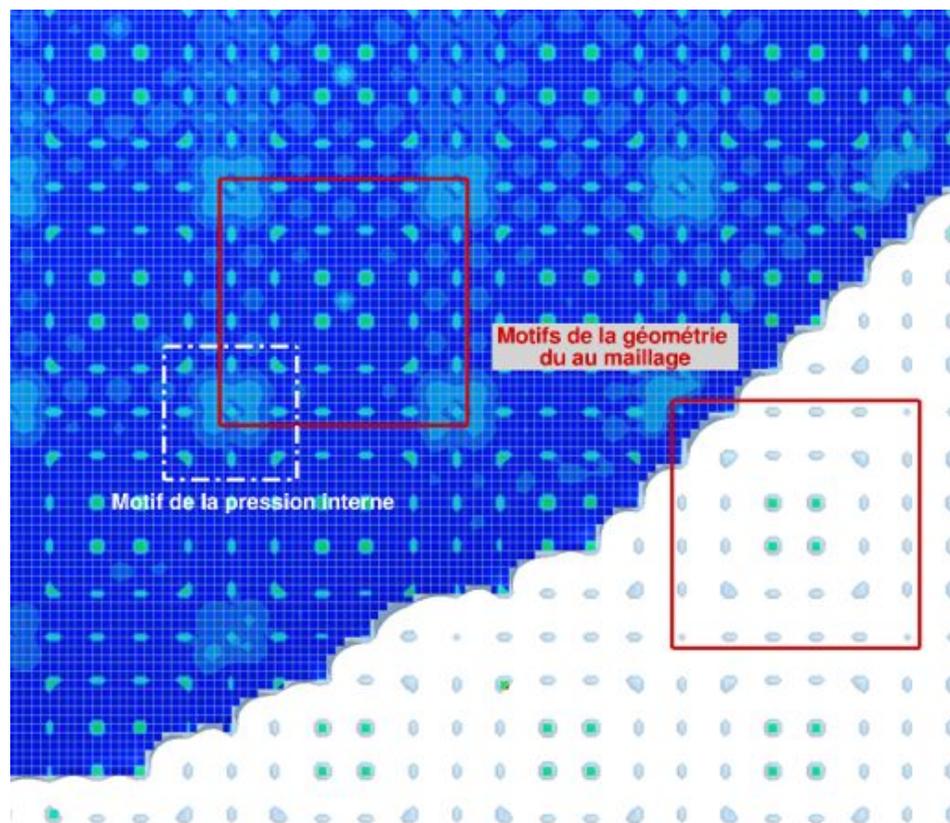


FIGURE 3.39 – Motif de la géométrie étudiée apparaissant à cause du maillage, pitch $30\mu m$, pour les cas de superhydrophobie.

3.4 Conclusion et perspectives soulevées

Les cas présentés dans ce chapitre présentent de nombreux intérêts pour la thématique générale. Des effets antagonistes entre les surfaces hydrophiles et hydrophobes existent quant à l'objectif de drainage rapide et efficace. Cette première approche globale des effets permet de mettre en place une première démarche expérimentale pour assurer une évacuation efficace de l'eau résultant de la fonte du givre formé lors du pompage de la chaleur. Nous pouvons à présent définir certaines voies à suivre en fonction des effets désirés.

Ainsi, si nous souhaitons accélérer les temps d'évacuation sans consommer d'énergie pour mettre en mouvement via le dispositif de soufflage (ventilateur) les gouttes et ponts formés lors du dégivrage du bloc évaporateur (phase de consommation d'énergie), il serait plus judicieux d'utiliser des surfaces hydrophobes. En effet, ces surfaces montrent que sans écoulement moteur (seulement la gravité), une goutte (voire un pont liquide, censé être plus stable) peut se déplacer, sans laisser de film résiduel derrière elle, tout en assurant une vitesse de chute élevée.

Au contraire, si le but est de régulariser l'épaisseur de l'interface pour augmenter la durée de la phase de récupération d'énergie (pompe à chaleur dans son utilisation normale), alors il est judicieux d'utiliser un matériau hydrophile (ou mouillant) afin de drainer le plus vite possible tout volume issu de la condensation de la vapeur d'eau. Ce phénomène est amplifié par la présence d'un écoulement latéral, venant casser un éventuel pont liquide résultant de la phase précédente de dégivrage.

La problématique sur la superhydrophobie montre de bons résultats, qu'il convient de mettre en réserve vis-à-vis des nécessaires études de convergence. L'impact des conditions de calcul (nombre de points très important) nous a conduit à aborder une approche de type modélisation des effets de la superhydrophobie aux petites échelles, afin de ne pas avoir à modéliser les picots eux-mêmes, mais uniquement leur influence. Cette modélisation se base sur la réalisation de calculs préliminaires tels que décrit dans la figure (3.40). Ces calculs sont basés sur l'étude de la déposition d'une goutte 2D sur une surface ondulée, possédant une propriété de surface donnée (angle de contact statique) et une géométrie particulière. Cette géométrie est caractérisée par une longueur d'onde et une amplitude fixe, dans le but d'observer quel angle de contact fera la goutte à l'équilibre.

Ainsi, un modèle aux petites échelles pourra être mis en place permettant de simuler l'effet de la présence de picots sur une goutte, sans modéliser les picots eux-mêmes mais seulement leur effet. Un damier de picots peut en effet être vu comme une surface ondulée possédant une amplitude et une longueur d'onde précise. Ces simulations et la modélisation qui en découlera nécessitent d'être menées.

Il faut néanmoins garder à l'esprit l'aspect industrialisation et tenue dans le temps d'un bloc extérieur (soumis aux conditions climatiques intenses) vis-à-vis de telles surfaces structurées.

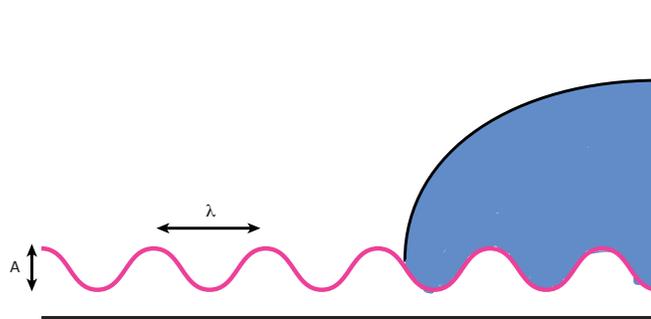


FIGURE 3.40 – Type d'étude à mener pour réaliser une modélisation de l'effet d'une surface texturée sur l'angle de contact, afin de ne pas à décrire cette surface explicitement lors d'autres simulations.

Une idée serait de travailler dans la masse de l'ailette, plutôt que sur sa surface, via des micro-canaux par exemple. Cette approche permettrait de régulariser l'épaisseur du film de condensat, voire permettrait d'améliorer les échanges thermiques pour capter une plus grande quantité de chaleur lors de la phase de givrage (libération de chaleur latente continue et sur une plus grande période).

Deuxième partie

Aspect thermique : le traitement du
changement de phase

Chapitre 4

Le givrage

Les travaux sur les meubles frigorifiques ventilés (MFV, par exemple les meubles dans les supermarchés) présentent comme les PAC du givre lors de leur utilisation. Les différences d'utilisation entre une PAC et un MFV montrent que la nature du givre peut être très différente. En effet, l'utilisation d'une pompe à chaleur est souvent réalisée pour des températures d'air extérieur bien inférieures à celles des MFV pour l'air ambiant. L'humidité absolue est relativement basse pour les PAC au contraire des MFV, si bien que le givre ne se forme qu'en hiver pour les PAC (lorsque l'humidité relative dépasse les 60%). Le givrage qui en résulte est donc différent, si bien que la durée de givrage avant colmatage est bien plus courte sur les PAC que sur les MFV. Cette durée réduite pour les pompes à chaleur conduit à former un givre poreux, mince, à faible masse volumique, en couches cristallines simples à température négative.

Ainsi, nous devons trouver des méthodes de changement de phase adaptées à ces conditions spécifiques, optimales et compatibles avec nos approches concernant la mécanique des fluides.

4.1 Le changement de phase ou la transition d'état

4.1.1 Équation de conservation de l'énergie

La thermique est liée de près ou de loin à la mécanique des fluides. Modéliser ces phénomènes est nécessaire pour assurer une compréhension plus juste des comportements étudiés. De plus, les variations de pression ainsi que les frottements visqueux développent des variations de l'énergie interne qui peut conduire à une variation locale de la température du fluide et donc à une variation de ses propriétés physiques contrôlant une partie de son mouvement. Les démonstrations suivantes sont extraites du cours de J.-P. Caltagirone [Cal10].

En affirmant le premier principe de la thermodynamique, la dérivée temporelle de l'énergie E , $\frac{dE}{dt}$, représente la somme des puissances issues des forces extérieures et de la puissance

calorifique reçue :

$$\frac{dE}{dt} = P_e + P_c \quad (4.1)$$

Si nous décomposons sur le domaine D issu de la figure (1.18) l'équation précédente, alors :

$$\frac{d}{dt} \iiint_D \rho \left(e + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) dv = \iiint_D \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} dv + \iint_{\partial D} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{u} ds + \iiint_D q dv - \iint_{\partial D} \boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{n} ds \quad (4.2)$$

avec $q(\mathbf{x}, t)$ la production volumique d'énergie calorifique due par exemple au rayonnement absorbé dans D et f une force volumique.

Via l'utilisation de l'expression intégrale de l'équation de continuité et du théorème de la divergence, nous obtenons :

$$\iiint_D \left(\rho \frac{d}{dt} \left(e + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) - \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) - q + \nabla \cdot \boldsymbol{\varphi} \right) dv = 0 \quad (4.3)$$

soit, en supposant la continuité de la fonction intégrée, quelque soit le domaine considéré, nous avons l'expression locale :

$$\rho \frac{d}{dt} \left(e + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) = \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) + q - \nabla \cdot \boldsymbol{\varphi} \quad (4.4)$$

En appliquant la loi de Cauchy, multipliée scalairement par \mathbf{u} , et en simplifiant l'équation obtenue, nous avons en prenant en compte le terme $\mathbf{u} \cdot \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \nabla(\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - Tr(\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{u})$, l'expression (4.4) réécrite comme suit :

$$\rho \frac{de}{dt} = -\nabla \cdot \boldsymbol{\varphi} + Tr(\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}) + q \quad (4.5)$$

En la développant sous forme indicelle, en remplaçant le terme de tenseur de contraintes et en regroupant les termes de viscosité sous un terme de dissipation, noté Φ , relié à la dégradation de l'énergie cinétique en chaleur via les frottements visqueux au sein du fluide, nous obtenons alors :

$$\rho \frac{de}{dt} = -\nabla \cdot \boldsymbol{\varphi} - p \nabla \cdot \mathbf{u} + \Phi + q \quad (4.6)$$

Le terme de gauche représente la variation d'énergie interne, le premier terme du membre de droite représente le flux de chaleur, le second terme du membre de droite les effets de la compressibilité, le troisième la dissipation visqueuse et le dernier un terme source.

La notation enthalpique peut être intéressante pour mieux appréhender les phénomènes de transferts énergétiques. Soit h , l'enthalpie massique, telle que $h = e + p/\rho$:

$$\rho \frac{de}{dt} = \rho \frac{dh}{dt} - \rho \frac{d}{dt} \left(\frac{p}{\rho} \right) \quad (4.7)$$

Si nous reportons cette expressions dans l'équation de l'énergie (4.6), alors nous avons après simplifications :

$$\rho \frac{dh}{dt} = -\nabla \cdot \boldsymbol{\varphi} + q + \frac{dp}{dt} - \frac{p}{\rho} \left(\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \Phi \quad (4.8)$$

L'équation de continuité d'une grandeur dans le domaine Ω appliquée à l'enthalpie massique donne :

$$\rho \frac{dh}{dt} = -\nabla \cdot \varphi + q + \frac{dp}{dt} + \Phi \quad (4.9)$$

L'enthalpie est une fonction de la pression et de la température, donc nous avons la formulation suivante :

$$\rho \frac{dh}{dt} = \left(\frac{dh}{dT} \right)_p \frac{dT}{dt} + \left(\frac{dh}{dp} \right)_T \frac{dp}{dt} \quad (4.10)$$

Dès lors, nous pouvons via les expressions des termes de compressibilité isochore et d'expansion thermique, réécrire l'équation (4.6) :

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T \right) = -\nabla \cdot \varphi + \beta T \frac{dp}{dt} + \Phi + q \quad (4.11)$$

Il reste à exprimer le terme de flux de chaleur. Pour cela, nous appliquerons la loi phénoménologique de Fourier, reliant les flux aux forces en présence via les gradients de température :

$$\varphi = -\Lambda \cdot \nabla T \quad (4.12)$$

Λ est un tenseur de conductivité thermique, diagonal dans le cas d'un corps homogène et sphérique dans le cas d'un corps isotrope. Il s'exprime en fonction de la conductivité thermique, scalaire positif dépendant de la température. Ainsi, on peut en déduire l'expression du flux de chaleur φ :

$$\varphi = -\lambda(T) \cdot \nabla T \quad (4.13)$$

Ainsi, l'équation de l'énergie peut s'exprimer comme suit, étant donné que nous sommes en présence d'un écoulement incompressible (donc le deuxième terme du membre de droite de l'équation (4.11) devient nul) :

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \Phi + q \quad (4.14)$$

Dans les problèmes qui nous intéressent, le rayonnement et la dissipation visqueuse sont négligeables donc nous poserons $\Phi = 0$.

Equations d'état

Un problème où coexistent des transferts à la fois de chaleur et de quantité de mouvement, couplés, est souvent caractérisé par la connaissance des variables "fonctions" spatio-temporelles. Au nombre de six, elles sont : la température T , la pression p , les trois composantes de la vitesse des corps \mathbf{V} et la masse volumique de ces corps ρ . Cinq équations relient ces variables, la conservation de la masse, les équations de conservation de la quantité de mouvement (Navier-Stokes, au nombre de trois) et l'équation de l'Energie. Afin de fermer le système insolvable sinon, il convient de rajouter une loi d'état, dont deux sont couramment utilisées :

– **Gaz parfait**

La loi des gaz parfaits relie la pression, la masse volumique et la température via la relation suivante :

$$p = \rho RT \quad (4.15)$$

avec R la constante des gaz parfaits. Cette loi reste une bonne approximation du comportement des gaz réels pour une pression peu élevée et une température assez haute.

– **Fluide faiblement compressible et dilatable**

Pour de faibles écarts de températures et de pression, la loi d'état d'un fluide est définie via une fonction linéaire de la température et de la pression :

$$\rho = \rho_0(1 - \beta(T - T_0) + \chi_T(p - p_0)) \quad (4.16)$$

avec β le coefficient thermodynamique de dilatation isochore, χ_T le coefficient thermodynamique de compressibilité isotherme, p_0 une pression de référence et T_0 une température de référence.

D'autres lois peuvent être utilisées en fonction des conditions de température ou de pression, voire adaptées en fonction de la concentration d'espèces (notamment via une approche de type Peng Robinson par exemple).

4.1.2 Terme source : le changement d'état

Un corps peut exister sous forme gazeuse, liquide ou solide. Ces différents états thermodynamiques constituent une phase. Le changement d'état est évoqué quand certaines conditions de température et de contraintes (rupture d'un équilibre énergétique), la matière se transforme et développe un nouvel état à partir d'un autre. Toutefois, à l'état solide, un matériau peut posséder plusieurs structures cristallines, que l'objet de l'étude ne prendra pas en compte.

La chaleur latente

Du fait de son ordonnancement atomique presque parfait, un solide possède une énergie interne moins élevée que celle d'un liquide, elle-même moins élevée que celle d'un gaz. La solidification d'un liquide (ou la condensation solide d'un gaz) se caractérise par la libération d'une énergie (à quelques exceptions près). Cette chaleur nécessaire pour réaliser le changement d'état, en unité massique, dans des conditions de température et de pression précises, s'appelle la chaleur latente. Cette chaleur latente L peut être exprimée par un saut de l'enthalpie massique, lors du changement d'état (figure 4.1), si le matériau est pur. Pour un matériau composé, celui-ci est défini sur un écart de température.

La solidification des corps purs, hypothèse dans laquelle nous nous placerons dorénavant, est caractérisée par des paliers isothermes. Ce palier permet l'évacuation de la chaleur latente, la

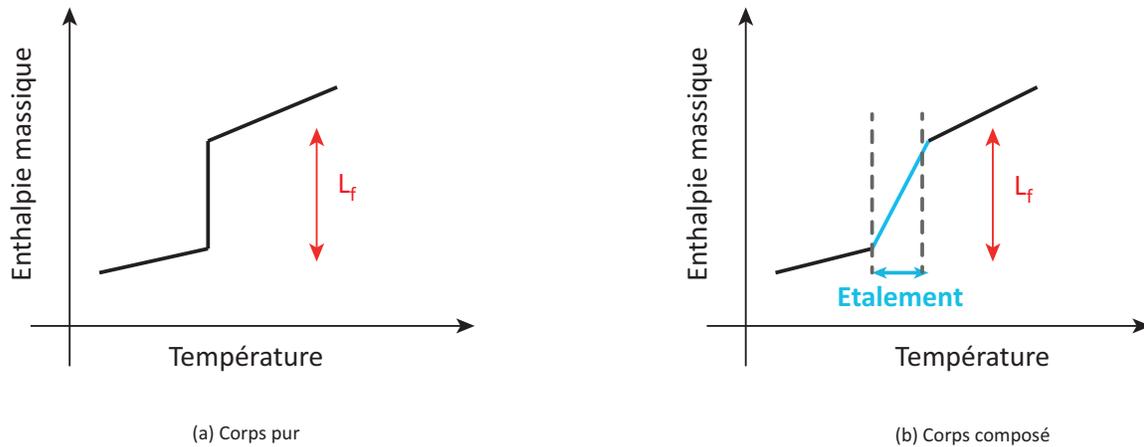


FIGURE 4.1 – Diagrammes enthalpie-température.

durée de cet échange est déterminée par les transferts thermiques avec l'environnement (figure 4.2).

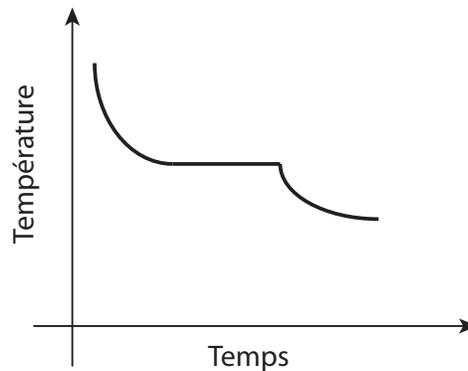


FIGURE 4.2 – Évolution de la température au cours du temps.

Afin de mieux comprendre le changement d'état, il est nécessaire de présenter une des théories sur la germination, montrant au passage un lien fort avec les propriétés de mouillabilité du fluide vis-à-vis du solide dans le cas de solidification sur une paroi.

Le phénomène de germination : une dimension microscopique aux effets macroscopiques

Le concept de germination est propre aux phénomènes de condensation/cristallisation ou d'ébullition. Si nous nous focalisons dans cette sous-section aux phénomènes de cristallisation, notre observation se portera sur des particules solides qui apparaîtront puis croîtront. La thermodynamique peut expliquer ces phénomènes.

Un corps pur est dans un état stable d'énergie si l'énergie libre G est la plus basse et que les énergies libres des phases solides et liquides sont égales pour une unique température T_f

[KF86, Til91]. Comme $G = H - TS$, avec H l'enthalpie et S l'entropie du corps étudié, nous avons une relation la relation suivante à la température T_i :

$$G_L - G_S = H_L - H_S - T_i(S_L - S_S) = L_f - T_i\Delta S_{fusion} \quad (4.17)$$

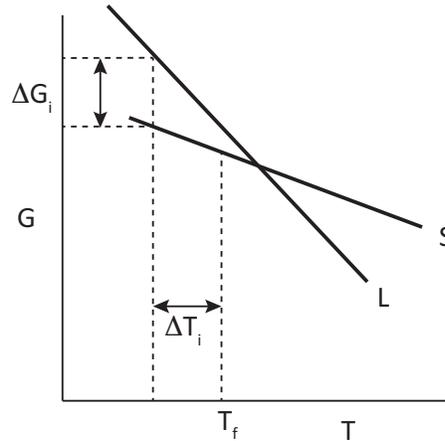


FIGURE 4.3 – Variation de l'énergie libre G en fonction de la température, pour un corps pur solide ou liquide.

La chaleur latente L_f peut s'exprimer comme fonction de l'entropie via la relation $L_f = T_f\Delta S_{fusion}$, avec T_f la température de changement d'état. Ainsi, nous avons la relation pour l'énergie libre :

$$\Delta G_i = -\Delta T_i\Delta S_{fusion} \quad (4.18)$$

Ainsi, lors de la solidification d'un liquide à la température T_i , son énergie interne diminue de ΔG_i . Malgré cela, le changement de phase ne peut avoir lieu, du fait de l'énergie interfaciale positive induite par la création d'un germe solide seul. La théorie de germination homogène d'un corps pur montre que lors de la formation d'un germe sphérique de rayon r , la variation totale d'énergie libre ΔG_{homo} peut être écrite comme la somme des termes volumique et de surface tels que :

$$\Delta G_{homo} = -4/3\pi r^3\Delta S_{fusion}\Delta T_i + 4\pi r^2\sigma \quad (4.19)$$

La maximum d'énergie, soit un équilibre instable, peut s'exprimer via un rayon critique r_c .

$$r_c = \frac{2\sigma}{\Delta S_{fusion}\Delta T_i} \implies \Delta G_c = \frac{16\pi\sigma^3}{3(\Delta S_{fusion}\Delta T_i)^2} \quad (4.20)$$

Si la particule présente un rayon inférieur au rayon critique, elle refondra pour minimiser l'énergie mais si elle possède un rayon supérieur, alors elle aura tendance à se développer aux dépens du liquide environnant et ainsi devenir un germe de croissance. (figure 4.4).

Le rayon de la particule tend vers l'infini près du point de fusion, puisque dans l'équation (4.20), la différence de température tend vers zéro. Nous devons alors avoir surfusion, si nous

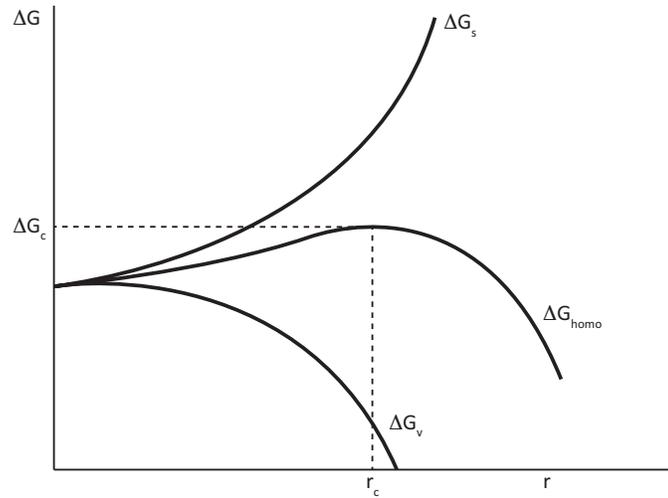


FIGURE 4.4 – Variation de l'écart d'énergie libre en fonction du rayon du germe.

restons dans la théorie de la germination homogène. Cette surfusion devant être très importante (plusieurs centaines de degrés), nous ne serons jamais hors laboratoire dans de telles conditions.

Si au contraire, nous possédons dans notre milieu certains points étrangers, des impuretés, insolubles dans la phase d'intérêt, alors nous pourrions abaisser l'énergie interfaciale. La germination hétérogène est un processus, à l'échelle microscopique, intéressant et rencontré la plupart du temps dans les systèmes étudiés en conditions réelles. Si nous plaçons un germe étranger, de forme calotte sphérique (figure 4.5), sur une paroi, dans un liquide "souhaitant" changer d'état, un calcul purement géométrique permet de déterminer la variation d'énergie totale libre hétérogène en fonction de la variation d'énergie totale libre homogène via l'angle de contact que fait ce corps étranger à la paroi :

$$\Delta G_{hetero} = \Delta G_{homo} f(\theta) \quad (4.21)$$

avec $f(\theta) = \frac{1}{4}(2 + \cos\theta)(1 - \cos\theta)^2$.

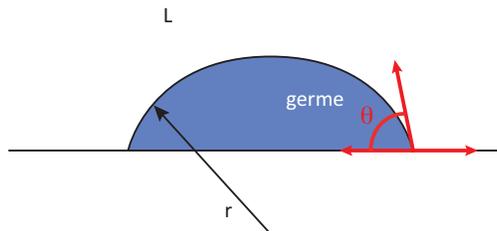


FIGURE 4.5 – Germination hétérogène sphérique.

Ces phénomènes à l'échelle microscopique ne peuvent être captés à proprement parler via notre approche, mais leur résultante est intrinsèquement présente dans les modèles développés.

4.1.3 Modèles de givrage

La problématique principale des pompes à chaleur sur l'air est la formation de givre puis de glace sur les ailettes d'échangeurs extérieurs. Ce givre est un composé non isotrope et perméable. La porosité est une donnée spatio-temporelle importante et sa connaissance est fondamentale pour mieux modéliser la formation de cette couche de givre. En effet, le givre a tendance à se densifier avec le temps, par effet de tassement et via l'infiltration de la vapeur d'eau en son sein. Une fois totalement formé, nous avons un réel bloc de glace homogène et imperméable. Afin de modéliser au mieux cet aspect, il convient de faire un état de l'art sur les modèles disponibles.

Le Gall et Grillot

Ce modèle proposé par Le Gall, Grillot [GGJ97] expose une étude de la masse volumique et de la conductivité thermique dans une couche de givre ainsi qu'une étude et un modèle du calcul de la tortuosité afin de connaître au mieux le facteur de diffusion de l'eau au sein de la couche de givre.

Il s'agit d'un modèle mono-dimensionnel, entendons par là un transport mono-dimensionnel de l'eau givrante. Il est considéré ici des conditions d'équilibre thermodynamique local et que l'air suit la loi des gaz parfaits, que la pression au sein de la couche de givre (pression totale) est constante et égale à la pression de référence atmosphérique (la couche est poreuse donc un équilibre de pression se met en place), que les effets convectifs et radiatifs sont négligés tout comme les effets Soret et Dufour et enfin que les évolutions de la température de l'air humide et des propriétés de la glace sont négligées. La couche de givre est considérée dans ce modèle (et dans tous les suivants d'après cette étude) comme un milieu pseudo-homogène, poreux dans lequel les lois de diffusion thermique et de transport sont respectivement celles de Fourier et de Fick.

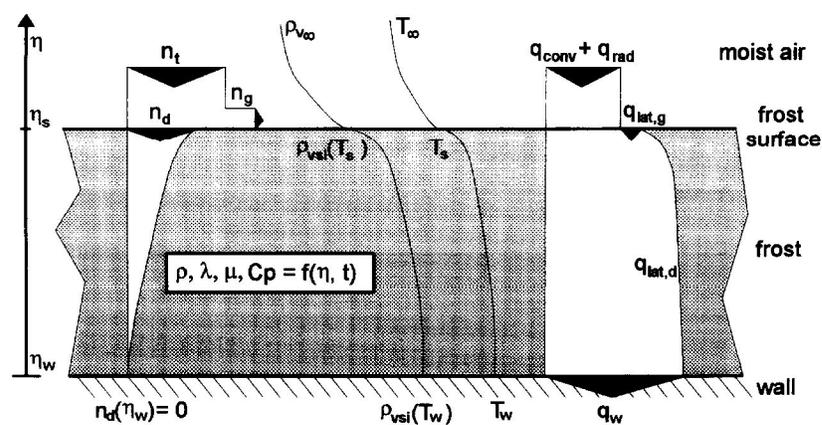


FIGURE 4.6 – Lois de Fick et de Fourier selon Le Gall *et al.* [GGJ97]

La couche de givre est ici caractérisée par sa fraction volumique, paramètre décrivant

le milieu et sa température. Les données thermo-équivalentes de tout le domaine sont donc construites à partir de la fraction volumique de givre et des données thermodynamiques des différents constituants pris indépendamment.

Le modèle présenté par Le Gall et Grillot [GGJ97] est résumé ainsi :

$$\begin{cases} [\zeta(T)(1 - \varepsilon_\alpha)] \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) + [\rho_\alpha - \rho_{vs}(T)] \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} \right) = \nabla n_d \\ [\rho C_p(\varepsilon_\alpha, T)] \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) - (L_{sub} \rho_\alpha) \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial t} \right) = \nabla [\lambda_e(\varepsilon_\alpha, T) \nabla T] \end{cases} \quad (4.22)$$

La première équation traduit l'évolution du flux massique de vapeur au sein de la couche de givre, flux variant en particulier avec la température grâce à la relation de Clausius-Clapeyron et la loi des gaz parfaits. La seconde équation permet de prédire le champ de températures dans le domaine. Le flux massique de vapeur est fonction notamment du coefficient de diffusion effectif de la vapeur d'eau, coefficient lui-même fonction de la tortuosité et du coefficient de diffusion moléculaire de l'eau.

Cette tortuosité est étudiée dans la suite de la publication. En effet, un modèle est proposé pour prédire au mieux ce facteur, modèle basé lui aussi sur la fraction volumique de givre. Ce modèle est de plus comparé à ceux d'Auracher et de Tao *et al.*

- Formulation simple de la résistance de diffusion : $v = (1 - \varepsilon_\alpha)/\tau$, où τ est la tortuosité de la couche de givre.
- Modèle d'Auracher : $v = \frac{1 - \varepsilon_\alpha}{1 - C_0 \varepsilon_\alpha}$, avec $C_0 = 0.58$.
- Modèle de Tao : $v = (1 + F)(1 - \varepsilon_\alpha)$.
- Modèle de Le Gall et Grillot [GGJ97] : $v(\varepsilon_\alpha, F_v) = \frac{1 - \varepsilon_\alpha}{1 - C_0 \varepsilon_\alpha} + F_v k \varepsilon_\alpha (1 - \varepsilon_\alpha)^k$, avec $C_0 = 0.58$ et $k = 10$.

Il ressort des travaux de Le Gall et Grillot [GGJ97] que leur modèle permet de mieux calibrer un cas de givrage en jouant sur un facteur de tortuosité à l'aide de deux paramètres k et F_v de calibration.

Andreas Lüer et Hans Beer

Ce modèle, proposé par Lüer et Beer [LB00], propose une étude paramétrique du modèle précédent en utilisant la proposition d'Auracher pour la loi de Fick avec les mêmes contraintes que Le Gall et al. [GGJ97]. Leur approche est proche d'un modèle Navier-Stokes – équation de l'énergie – équation de transport. La variable de l'équation de transport est la fraction volumique de glace.

Domaine Air

– Continuité :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.23)$$

– Navier-Stokes :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p_{dyn} + \frac{1}{Re_d} \Delta \mathbf{u} \quad (4.24)$$

– Energie :

$$\frac{\partial T_g}{\partial t} + \nabla \cdot (T_g \mathbf{u}) = \frac{1}{Re_d Pr} \Delta T_g \quad (4.25)$$

– Transport de la fraction volumique de vapeur dans l'air :

$$\frac{\partial \rho_{Vg}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{Vg} \mathbf{u}) = \frac{1}{Re_d Sc_g} \Delta \rho_{Vg} \quad (4.26)$$

Domaine Givre

– Energie :

$$\begin{aligned} \rho_f C_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = & \frac{1}{Re_d Pr} \nabla \cdot (\lambda_f \nabla T_f) + \\ & \frac{1}{Ste} \left(-\frac{\partial \epsilon \rho_{Vf}}{\partial t} + \frac{1}{Re_d} \nabla \cdot \left(\frac{\epsilon}{Sc_f} \nabla \left(\frac{\rho_{Vf}}{\rho_P} \right) \right) \right) \end{aligned} \quad (4.27)$$

– Transport : l'expression de cette équation est intégrée dans l'équation de l'énergie.

L'influence du nombre de Reynolds sur le transfert de masse (et donc sur la densité et l'épaisseur de la couche de givre) et son influence sur le transfert de chaleur ne sont pas négligeables. D'une part, le transfert de masse s'accroît avec l'augmentation de Re , accélérant dans le même temps le caractère divergeant de la simulation (la surface de la couche de givre arrivant au point triple de l'eau à cause d'une densification n'ayant pas le temps de s'opérer et donc une augmentation de la résistance thermique). D'autre part, le transfert de chaleur est, comme évoqué précédemment, perturbé à fort Re , à cause d'une densification incomplète/inhomogène.

L'influence de l'humidité et de la température de l'air (variant de concert et indissociablement) est non négligeable à cause de l'augmentation du dépôt de givre lors de l'augmentation de l'humidité. De plus, si l'humidité relative de l'air est de 60%, nous pouvons observer un accord entre l'expérience et la simulation, preuve que leur modèle est assez fiable pour ce type de gamme d'étude. Une comparaison et une explication sont faites avec les travaux d'Hayashi [HAAH77] afin de tenter d'expliquer ces observations.

L'influence de la température de la plaque va dans le même sens que celle de l'air, dans le sens où la plaque va faciliter ou non le givrage. En effet, la conductivité thermique de la plaque va influencer le dépôt de givre sur son épaisseur et sa densité.

Modèle de sursaturation : Na et Webb

Ce modèle, proposé par Na et Webb [NW04b] et [NW04a], expose une étude de l'effet de la méthode de calcul de la sursaturation de l'air au-dessus de la plaque froide / au-dessus de la couche de givre. En effet, ils présentent une expression plus adéquate de la saturation (en réalité sursaturation comme décrit ci-après) permettant de dégager une formulation plus correcte du transfert massique étant donné que la vitesse de croissance dépend de cette sursaturation.

Si nous voulons une formation de givre (de cristaux dans un premier temps), il nous faut, dit Fletcher [NW04a], l'équation (4.28) de sursaturation influant sur la vitesse de formation des cristaux. Celle-ci permet de calculer P_{vap} , pression qui permet à son tour de calculer la densité de la vapeur à la surface de la couche de givre (loi des Gaz Parfaits) laquelle donne le taux d'humidité qui permet donc de calculer le taux de transfert massique.

$$\varrho = K \exp[-A/\ln(P_v/P_{vs})] \quad (4.28)$$

où K et A sont des constantes et le rapport $P_v/P_{vs} = (1 + S)$ avec S la sursaturation.

D'après Na et Webb [NW04b], le maximum de sursaturation est présent dans la couche limite, il sera donc intéressant de voir par cela comment initialiser notre "couche" (qui n'existera pas initialement) en jouant sur ce paramètre. Une étude sur le facteur de tortuosité est aussi réalisée (figure 4.7), avec pour principale conclusion que le modèle de Le Gall n'est pas forcément le bon, les modèles de Prager (4.29) ou d'Auracher sont parmi les plus fiables.

$$\tau = (1 + \varepsilon_\alpha)/2 \quad (4.29)$$

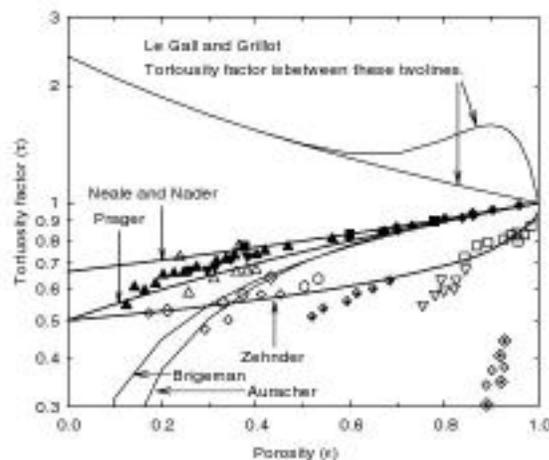


FIGURE 4.7 – Comparaison des modèles de tortuosité par Na et Webb [NW04b]

4.1.4 Modèle "complet" : Lenic, Trp et Frankovic

Ce modèle, construit autour des différents modèles précédemment exposés et proposé par Kristian Lenic [LTF08] au cours de sa thèse, permet notamment d'introduire les résultats de Na et Webb [NW04b] et [NW04a] dans le modèle de Lüer et Beer [LB00]. La tortuosité est caractérisée par l'approximation de Prager (4.29) et les propriétés physiques de la couche de givre (en particulier la conductivité thermique) sont exposées.

Equations résolues

Les équations gouvernant le givrage, basées sur le sous-domaine décrit par les pointillés de la figure 4.8, sont décrites ci-après. Elles sont exprimées en fonction du sous-domaine dans lequel nous nous trouvons. Cette approche en domaines séparés n'est toutefois pas compatible avec notre approche des domaines fictifs.

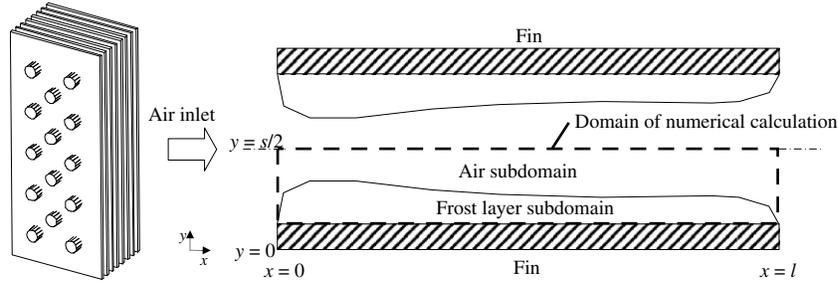


FIGURE 4.8 – Domaine d'étude valide pour les équations de Lenic *et al.* [LTF08]

Sous-domaine de l'air

Les équations de Navier-Stokes, de l'énergie et du transport (cette dernière étant appliquée à la vapeur d'eau) sont utilisées ici pour décrire le sous-domaine de l'air :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x}(\rho_a u_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_a u_y) = 0 \\ \rho_a \frac{\partial u_x}{\partial t} + \rho_a \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) \\ \rho_a \frac{\partial u_y}{\partial t} + \rho_a \left(u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) \\ \rho_a \frac{\partial T_a}{\partial t} + \rho_a \left(u_x \frac{\partial T_a}{\partial x} + u_y \frac{\partial T_a}{\partial y} \right) = \frac{\lambda_a}{C_{p,a}} \left(\frac{\partial^2 T_a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_a}{\partial y^2} \right) \\ \rho_a \frac{\partial w}{\partial t} + \rho_a \left(u_x \frac{\partial w}{\partial x} + u_y \frac{\partial w}{\partial y} \right) = \rho_a D \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) \end{array} \right. \quad (4.30)$$

Sous-domaine de la couche de givre

Les équations de l'énergie et de diffusion sont utilisées pour modéliser ce sous-domaine. L'équation de l'énergie et celle de la diffusion ont été regroupées (le terme $\frac{\partial \rho_a}{\partial t}$ décrit par l'équation de

la diffusion étant remplacé dans l'équation de l'énergie 4.31).

$$\begin{aligned} \rho_\alpha \frac{\partial T_\alpha}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\lambda_\alpha}{C_{p,\alpha}} \frac{\partial T_{fl}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\lambda_\alpha}{C_{p,\alpha}} \frac{\partial T_\alpha}{\partial y} \right) + \\ & q_{sub} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{eff\rho_a} \frac{\partial \rho_v/\rho_a}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{eff\rho_a} \frac{\partial \rho_v/\rho_a}{\partial y} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.31)$$

Ses principaux résultats

Lenic a détaillé les mesures qu'il a faites, notamment la géométrie de son étude, l'évolution de la masse volumique du givre, de son épaisseur, de sa température en fonction du temps. Il a pu valider son modèle vis-à-vis des expériences qu'il a pu mener en parallèle de son investigation numérique.

4.2 Le changement d'état : variation avec la porosité et l'humidité

4.2.1 La porosité

La première variable importante est la porosité. Cette dernière est définie par l'équation (4.33), permettant ainsi de définir la masse volumique de la couche de givre via les masses volumiques de l'air humide et de la glace pure en réalisant une combinaison linéaire (moyenne arithmétique, possibilité de revoir cette définition) de ces deux masses volumiques. Cette équation provient de l'équation (4.32), définie comme telle :

$$\begin{cases} \varepsilon = \frac{V_a}{V_a + V_i} \\ \rho_{fl} = \frac{\rho_a V_a}{V_a + V_i} + \frac{\rho_i V_i}{V_a + V_i} \end{cases} \quad (4.32)$$

soit

$$\varepsilon = \frac{\rho_i - \rho_{fl}}{\rho_i - \rho_{ah}} \quad (4.33)$$

où les indices i , ah et fl mentionnent respectivement la glace pure, l'air humide et la couche de givre. L'équation (4.34) expose le calcul via une moyenne arithmétique de la masse volumique de la couche de givre en fonction de la porosité.

$$\rho_{fl} = \varepsilon \rho_{ah} + (1 - \varepsilon) \rho_i \quad (4.34)$$

4.2.2 L'humidité

L'approche des domaines fictifs est au centre de ce récapitulatif permettant de recentrer les idées sur ce que nous pouvons étudier. Le modèle 1-fluide est lui utilisé uniquement quand nous

sommes dans un cas multiphasique, c'est-à-dire pour notre étude uniquement lors de la fusion de la couche de givre en eau, eau qui va être advectée par l'écoulement d'air au sein du domaine.

Il convient de calculer une chaleur spécifique, une conductivité thermique, une masse volumique et une viscosité en tout point du domaine dans l'approche des domaines fictifs (4.35). Concernant la couche de givre, la conductivité thermique ne suivra pas cette approche, une relation empirique permettant de l'approcher avec plus de précision.

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho C_p = (1 - \varepsilon)\rho_{\text{fl}}C_{p_{\text{fl}}} + \varepsilon\rho_{ah}C_{p_{ah}} \\ \rho = (1 - \varepsilon)\rho_{\text{fl}} + \varepsilon\rho_{ah} \\ \mu = (1 - \varepsilon)\mu_{\text{fl}} + \varepsilon\mu_{ah} \\ k = (1 - \varepsilon)k_{\text{fl}} + \varepsilon k_{ah} \end{array} \right. \quad (4.35)$$

avec $k_{\text{fl}} = 0.132 + 3.13 \cdot 10^{-4}\rho_{\text{fl}} + 1.6 \cdot 10^{-7}\rho_{\text{fl}}^2$

où les termes indicés par ah décrivent une combinaison linéaire (4.36) des grandeurs propres à l'air sec et à la vapeur d'eau, moyenne réalisée via la fonction de composition dans l'air, à savoir l'humidité relative (4.37).

$$X_{ah} = wX_v + (1 - w)X_a \quad (4.36)$$

Le rapport de mélange, soit la fraction massique de vapeur dans l'air w , est donné par la relation microscopique (4.37). Cette formulation est à redimensionner à une échelle macroscopique, en utilisant l'équation de transport sur le fluide air humide, en voyant l'air humide comme un mélange de deux constituants, l'air sec et la vapeur d'eau.

$$w = 0.622 \frac{P_v}{P - P_v} \quad (4.37)$$

où 0.622 correspond au rapport des masses molaires moyennes de la vapeur sur l'air sec, P_v est la pression de la vapeur d'eau et P la pression totale. Afin de prendre en compte de manière macroscopique, nous calculerons ce rapport de mélange à l'aide d'une équation de transport, $(1 - w)$ étant alors la fraction massique d'air sec présent. L'interface air-givre sera pénalisée par la valeur du rapport de mélange w_{fs} caractéristique de la sursaturation présente à cet endroit du domaine. Concernant l'approche du modèle 1-fluide, les grandeurs précédentes sont indexées par la fonction de phase C propre au fluide (à l'état liquide, vapeur ou solide) dans lequel nous nous trouvons. Dès lors, la fusion de la couche de givre peut bien s'opérer avec une modification des propriétés de la phase advectant l'eau liquide formée.

4.2.3 Réécriture de l'équation de conservation de la masse

Assez souvent, l'écoulement est sous l'hypothèse d'incompressibilité ($\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$), mais nous ne pouvons pas affirmer que cette hypothèse est justifiée ici. En effet, à l'interface, l'écoulement

subit le changement de phase de la vapeur d'eau en glace, vapeur d'eau qui tout d'abord se condense en micro-gouttellettes si petites que la pression à l'extérieur est nettement plus faible que la pression de Laplace qui règne en leur sein, laquelle est beaucoup plus importante que la pression de saturation. Pour tenir compte de cela, nous allons développer un modèle compressible. A l'interface entre les deux domaines étudiés, la conservation de la masse est décrite par les équations suivantes (4.38 et 4.39).

$$\frac{d}{dt} \iiint_D \rho dv = \iiint_D \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) \right] dv + \iint_{\partial D} [[\rho(\mathbf{V} - \mathbf{W})] \cdot \mathbf{n}] ds \quad (4.38)$$

$$[[\rho(\mathbf{V} - \mathbf{W})] \cdot \mathbf{n}] = (\rho_{D_1} (\mathbf{V}_{D_1} - \mathbf{W})) \cdot \mathbf{n} - (\rho_{D_2} (\mathbf{V}_{D_2} - \mathbf{W})) \cdot \mathbf{n} \quad (4.39)$$

avec \mathbf{W} la vitesse de l'interface, \mathbf{N} le vecteur normal à cette interface. En fait, le terme $[[\rho]] \mathbf{W} \cdot \mathbf{N}$ est le terme responsable du transfert de masse lors d'un changement de phase. Il faut donc dans notre cas connaître la vitesse de déplacement de l'interface, vitesse liée à la fraction d'air dans la couche ε par une relation d'advection (4.40).

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \mathbf{W} \cdot \nabla \varepsilon = 0 \quad (4.40)$$

Nous avons donc l'équation (4.41) sur tout le domaine à l'exception de l'interface ∂D et une condition de saut nulle sur le débit massique à l'interface (4.42), \mathbf{V}_r étant la vitesse relative de l'interface par rapport au fluide. Le débit de flux massique, m , au travers d'une surface discontinue (∂D) est lui continu. Du fait du changement de phase "vapeur-glace" synonyme de transfert de masse à travers l'interface ∂D , l'évolution de l'interface air-givre nous permet de dire que la vitesse de l'interface \mathbf{W} est non nulle, paramètre important dans notre modèle compressible.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (4.41)$$

$$[[\rho(\mathbf{V} - \mathbf{W})] \cdot \mathbf{n}] = [[\rho \mathbf{V}_r]] = 0 \quad (4.42)$$

Hors interface : La conservation de la masse peut être reformulée hors de l'interface de la manière suivante (4.43 et 4.44), où nous pouvons lire que la variation de masse volumique au cours du temps dépend des variations temporelles de la pression, de la température et du rapport de mélange w .

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (4.43)$$

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial t} - \rho \chi_T \frac{\partial P}{\partial t} + \rho \beta \frac{\partial T}{\partial t} \quad (4.44)$$

où χ_T est le coefficient de compressibilité isotherme et β le coefficient thermoélastique d'augmentation relative de pression isochore.

Nous pouvons dès lors assimiler le terme $\frac{\partial \rho}{\partial w}$ à une fonction du type $\rho \zeta$, ce qui nous donne l'équation de conservation de la masse suivante (4.45) :

$$\frac{d\rho}{dt} = \rho \zeta \frac{\partial w}{\partial t} - \rho \chi_T \frac{\partial P}{\partial t} + \rho \beta \frac{\partial T}{\partial t} \quad (4.45)$$

Nous nommerons la fonction ζ le coefficient thermoélastique d'augmentation de pression en fonction du rapport de mélange w . Si nous adimensionnons cette équation (4.45) afin de voir l'influence du coefficient thermoélastique d'augmentation de pression en fonction de w vis-à-vis des variations de pression et de température, le modèle compressible est, dans le cas général, de la forme suivante (4.46) :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla P - \frac{1}{\chi_T} \nabla \cdot \mathbf{V} + \frac{\beta}{\chi_T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\zeta}{\chi_T} \frac{\partial w}{\partial t} \quad (4.46)$$

A l'interface ∂D : D'après Shin et Juric [SJ02], la relation liant la divergence de la vitesse et le flux massique à l'interface est la suivante (4.47) :

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = [[\rho]] \int_{\partial D} \dot{m}_\Gamma \delta_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma) ds \quad (4.47)$$

où \dot{m}_Γ est défini comme étant le flux massique interfacial, c'est-à-dire défini selon (4.48), δ_i étant la localisation de l'interface et \mathbf{x} les coordonnées du point considéré (\mathbf{x}_Γ se rapportant à la localisation de l'interface).

$$\dot{m}_{\partial D} = [[\rho(\mathbf{V} - \mathbf{W})]] \cdot \mathbf{n} \quad (4.48)$$

Ce modèle n'aura pu être utilisé lors de ce manuscrit, il est indiqué ici pour le lecteur afin de montrer la démarche permettant d'assurer un changement de phase complet et optimal en tenant compte des caractéristiques hygrométriques de l'air ambiant, et ce de manière indépendante des méthodes utilisées par la suite.

Chapitre 5

Les méthodes numériques pour le changement d'état

Un des objectifs initiaux était de comprendre les mécanismes propres au givrage et au dégivrage. Cet objectif devait notamment être réalisé par la mise en place d'une méthode de changement de phase permettant de réaliser du givre, matériau poreux dans lequel l'humidité de l'air pouvait circuler. De ce fait, nous devions par la même occasion mettre en place un modèle de transport de l'humidité avec enrichissement et appauvrissement de la quantité de vapeur dans l'air.

Nos différents modèles et méthodes alors en place dans le code de calcul Thétis semblaient répondre à une grande partie de ces objectifs, permettant dès lors une plus grande place à l'observation et à la compréhension des phénomènes. Nous nous sommes rendues compte que la méthode, dite de Voller et décrite ci-après, ne permettait pas de réaliser une partie de ces attentes, sans devoir la repenser intégralement. Ainsi, nous avons imaginé une correction de la méthode New Source, permettant de répondre au caractère à masse volumique variable que le givrage impose. Les résultats de cette correction étant limités et certains problèmes techniques s'étant déclarés, nous avons voulu néanmoins mettre en place une nouvelle méthode, originale, consacrée au changement de phase. Cette méthode, développée dans les derniers mois de thèse a montré de très bons résultats, et son originalité ouvre la voie à de nombreuses améliorations par la suite.

5.1 Traitement de l'équation de conservation de l'énergie

L'équation de l'énergie a été discrétisée vis-à-vis du temps et de l'espace. Les schémas de discrétisation temporelle et spatiale sont identiques à ceux définis pour résoudre les équations de Navier-Stokes, en les appliquant à l'énergie via la variable température comme variable à résoudre :

$$\rho C_p \left(\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla T^{n+1} \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T^{n+1}) \quad (5.1)$$

Un schéma hybride pour les termes de convection et centré pour les termes de diffusion sont utilisés pour assurer une discrétisation spatiale efficace.

5.2 Traitement de l'équation du changement d'état - méthodes et limitations

Nous nous intéresserons dorénavant à des méthodes adaptées à capter les phénomènes nécessaires au changement de phase entre une phase solide et une phase liquide (peu importe le chemin et le sens de ce chemin, solide \Rightarrow liquide ou inversement). Ces méthodes proposent des approches parfois opposées et parfois, leur mise en place n'est pas compatible avec certaines méthodes et modèles concernant la résolution des équations de Navier-Stokes.

5.2.1 Domaines séparés

L'idée ici est de résoudre explicitement l'équation de l'énergie (en température) dans chaque sous-domaine (Delaunay, 90 [Del90]) et de prendre en compte le changement de phase via une relation à l'interface entre la phase liquide, la phase solide et la phase gazeuse. La relation à l'interface est une condition limite interne au système de type Stefan-Neumann, indiquant que la conservation des flux thermiques est régie par l'équation (5.2) :

$$\lambda_s \nabla T_s \cdot \mathbf{n} - \lambda_l \nabla T_l \cdot \mathbf{n} = \rho L_f \mathbf{V}_f \cdot \mathbf{n} \quad (5.2)$$

Les indices l et s font références respectivement aux phase liquide et solide, le terme \mathbf{V}_f faisant lui référence à la vitesse de déplacement de l'interface de changement d'état et L_f étant la chaleur latente de changement de phase.

Cette méthode possède plusieurs points positifs dont le principal est de donner le champ de température de manière explicite. Cependant, elle ne permet pas de prédire la position du front de changement d'état et n'est pas compatible numériquement avec l'approche utilisée dans notre code numérique, à savoir la modélisation par domaines fictifs. Il est néanmoins très commode d'un point de vue analytique pour calculer la température dans chaque sous domaine, de façon à pouvoir faire une comparaison avec la simulation.

5.2.2 New source

L'objectif de cette méthode est de calculer le terme de changement de phase via un terme source S_c placé dans l'équation de l'énergie (5.3).

$$S_c = \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (5.3)$$

Ce terme source est similaire à la condition de Stefan-Neumann nécessaire pour assurer la continuité des flux dans la cas du modèle à domaines distincts. Il semble être un modèle efficace

pour simuler le changement de phase en utilisant des maillages fixes, comme le souligne Bertrand [Ber99], néanmoins Voller [Vol90] a développé un nouveau modèle qu'il a appelé "New Source", modèle basé sur le constat que le changement d'état se déroule à température constante (celle du changement d'état) et où l'on fait converger le terme source via la fraction solide du volume de contrôle où se déroule le changement d'état. En effet, ce modèle part du principe que le changement d'état est une transformation franche, lors de laquelle un volume de contrôle du maillage ne peut être que liquide ou solide. Ce modèle est actuellement utilisé dans notre code de calcul via un algorithme de point fixe, décrit ci-après (5.4) :

$$\begin{cases} S_c(t) &= S_{c(t-1)} + \rho C_p \frac{T-T_f}{\Delta t} \\ &\circlearrowleft \\ f_l &= f_{l_0} + \Delta t \cdot S_c \cdot (\rho L_f)^{-1} \end{cases} \quad (5.4)$$

La linéarisation de cette méthode est décrite dans la section suivante.

5.2.3 Chaleur spécifique apparente

La méthode de la chaleur spécifique apparente, abrégée méthode du C_p apparent, consiste à reformuler le terme source précédent (5.3) en le réarrangeant pour faire apparaître la température (5.5)

$$S_c = \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} = \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (5.5)$$

Ce terme est réinjecté dans l'équation de l'énergie via le terme de chaleur spécifique, mais entraîne des comportements particuliers lors du changement de phase, avec notamment une zone de températures où s'opère le changement de phase (et non plus une température franche) ce qui nécessite une vitesse de changement de phase modérée. Nous pouvons définir une précision pour cette technique (ici, cela s'apparente plus à de la technique qu'à un modèle physique) via le nombre de Stefan tel que défini dans la nomenclature.

5.2.4 Méthode enthalpique

La méthode enthalpique est une réécriture de l'équation de l'énergie d'un point de vue enthalpique, d'après Voller [Vol87] de façon à séparer la chaleur sensible et la chaleur latente (5.6) :

$$h(T) = \int_{T_{ref}}^T C_p(\theta) d\theta + f_l L_f \quad (5.6)$$

Le terme de droite correspond à la chaleur latente, celui de gauche à la chaleur sensible. Il faut une relation entre la fraction liquide f_l et l'enthalpie afin de pouvoir prédire un changement de phase franc (5.7) :

$$f_l = \begin{cases} 1 & \text{si } h > 0 \\ 0 & \text{si } h < 0 \end{cases} \quad (5.7)$$

Cette méthode permet de traiter tous les types de changements d'état, le fait est que la prise en compte séparément des chaleurs sensible et latente permet de pouvoir gérer le changement d'état sans prendre en compte la conservation de l'énergie à l'interface entre les deux phases. Le désavantage que souligne Voller [Vol87] est que la vitesse est nulle dans une cellule où s'opère une solidification, condition dite de "zero velocity", qui ne s'applique que dans le cas de maillages fixes. Une parade consiste à dire que la vitesse tend vers zéro quand la chaleur latente moyenne de la cellule tend vers une valeur prédéterminée entre 0 et L_f . Gartling [Gar80] propose une approche semblant être de la pénalisation par un terme visqueux, en faisant tendre la viscosité du liquide se solidifiant vers une grande valeur de façon à annuler la vitesse en son sein. Voller a développé une méthode "enthalpique-porosité" [VS95] qui consiste à coupler les deux approches précédentes. Cette méthode consiste à ajouter un terme source à l'équation de l'énergie écrite de manière enthalpique (5.8), S_h , avec h la chaleur sensible.

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} h) = \nabla \cdot (\alpha \nabla h) + S_h \\ S_h = \frac{\partial \rho \Delta H}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \Delta H) \end{cases} \quad (5.8)$$

avec la chaleur latente :

$$\Delta H = \begin{cases} L_f & \text{si } T > T_f \\ 0 & \text{si } T < T_f \end{cases}$$

Un terme de type Kozeny-Carman est utilisé dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (Navier-Stokes) pour prendre en compte la porosité dans une cellule où il y a changement d'état, porosité qui correspond à la fraction liquide dans la maille, soit le rapport $\Delta H/L_f$. Plusieurs simplifications (notamment en fonction du caractère isotherme du changement de phase) sont établies par Voller. Numériquement, un algorithme de type SIMPLER est utilisé et une mise à jour du terme de chaleur latente est nécessaire, ce qui est fait de manière itérative.

5.2.5 Relation modèle de changement d'état - méthodes numériques

Les différentes méthodes numériques et les méthodes de suivi d'interface ne sont pas toutes compatibles entre-elles. Le tableau (5.1) résume ces compatibilités. De plus, les différents modèles de changement de phase et les différentes méthodes numériques présentés précédemment sont à utiliser de manière conjointe comme décrit dans la tableau (5.2).

Le symbole \times indique une incompatibilité alors que le symbole \checkmark indique que les méthodes – modèles sont compatibles. Nous pouvons noter que la méthode VOF (PLIC, TVD et SVOF dans notre document, associée au modèle 1-fluide) est la plus apte à utiliser la majorité des modèles de changement de phase, notamment le modèle au terme source et le modèle enthalpique. Cela est

	Ghost Fluid Method	Modèle 1-Fluide
<i>Level Set</i>	✓	✓
<i>Front Tracking</i>	✓	✓
<i>Volume Of Fluid</i>	✗	✓

TABLE 5.1 – Compatibilité entre méthodes de suivi d'interface et modèles/méthodes numériques

	Dom. séparés	T. Source	C_p apparent	Mod. Enthalpique
<i>LS + GFM</i>	✓	✗	✗	✗
<i>VOF + MUF</i>	✗	✓	✓	✓
<i>LS + MUF</i>	✗	✗	✗	✓
<i>FT + MUF</i>	✗	✗	✓	✓

TABLE 5.2 – Compatibilité entre méthodes de suivi d'interface - méthodes numériques et modèles de changement d'état

du à la manière d'advecter notre phase. Nous choisirons donc pour la suite d'utiliser la méthode de Voller (méthode New Source) et définirons une nouvelle approche Eulérienne-Lagrangienne permettant de réaliser des simulations précises à moindre coûts de calculs.

5.3 Première proposition : amélioration de la méthode New Source via la masse volumique variable

Le point problématique du modèle New Source est que lorsqu'une maille du domaine de calcul est dans une situation où le changement d'état peut se faire (la température passe par la température de changement d'état), la masse volumique du fluide en présence dans la phase (et les autres propriétés thermodynamiques, viscosité, chaleur spécifique ou conductivité thermique) n'est pas actualisée au cours du processus de résolution de l'équation de l'énergie.

Ce processus, actuellement réalisé sous la forme d'une méthode de point fixe (basée sur la valeur de la fraction solide), doit donc être corrigé afin de prendre en compte une évolution temporelle, lors de la résolution du changement de phase, de la masse volumique (et des autres propriétés physiques). L'idée est donc d'ajouter au cours de ce point fixe une fonction de réactualisation des propriétés physiques par rapport au propriétés thermiques (température, via une loi d'état) et de mélange (composition réelle de la maille).

5.3.1 Développement de la méthode : schéma itératif

Revenons à l'équation de l'énergie locale, avec terme source de changement de phase (4.14 dans laquelle nous appliquons la méthode New Source, donc avec $\Phi = 0$ et $q = \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t}$). Nous pouvons discrétiser en temps le terme source, de la manière suivante :

$$q = \frac{\rho L_f}{\Delta t} \left(f_s^{n+\frac{k+1}{K}} - f_s^n \right) \quad (5.9)$$

avec K un nombre d'itérations internes nécessaires pour obtenir la convergence à l'instant $n + 1$.

La linéarisation du terme source est donc nécessaire et une démarche présentée par Patankar sera utilisée. Aucun terme convectif n'existe dans les équations suivantes. La démarche de linéarisation complète est développée dans la thèse d'Olivier Bertrand [Ber99]). Nous rappellerons la procédure itérative finale pour assurer une bonne convergence du champ de fraction solide et du champ de température dans (2).

Cette méthode permet d'utiliser un pas de temps assez petit en début de simulation (phénomène rapide dans les premiers instants). Les tests de convergence sur f_s est basé uniquement sur un seuil de tolérance à l'ordre 1, entre deux instants consécutifs dans la boucle, sur l'écart entre les deux valeurs successives du champ considéré.

Algorithm 2 Schéma algorithmique de convergence pour la fraction solide et la température

```

 $n_{max} = 1$ 
 $n_{\Delta t} = 1$ 
for  $k = 1 \rightarrow 10$  do
  Calcul de  $T^{n+\frac{k+1}{K}}$  (équation 5.1 associée à 5.9) et de  $f_s^{n+\frac{k+1}{K}}$  (équation 5.4b)
  if  $f_s^{n+\frac{k+1}{K}} - f_s^n \geq 1$  then
     $\Delta t = \Delta t/2$ 
     $n_{\Delta t} = 2n_{\Delta t}$ 
     $n_{max} = 2(n_{max} - n + 1)$ 
  end if
  test de convergence du  $f_s$  et sur  $T$ 
end for
 $\Delta t = n_{\Delta t} \Delta t$ 

```

5.3.2 Modification proposée

Nous proposons à cette approche une modification nécessaire si nous sommes en présence de constituants possédant dans leurs différents états thermodynamiques des propriétés différentes, notamment leur masse volumique. C'est par exemple le cas de l'eau, possédant à l'état liquide une masse volumique plus grande que celle de l'état solide, typiquement, 1000kg.m^{-3} pour le liquide et 800kg.m^{-3} (voire 500kg.m^{-3}) pour la glace (et le givre). Ainsi, lors du traitement des phénomènes de transferts de masse et de chaleur via la méthode New Source "classique", lors de la résolution au sein d'une maille changeant d'état (à un instant t fixé), cette évolution des propriétés n'est pas ou partiellement prise en compte. Cela implique donc que le changement de phase ne se déroule qu'à masse volumique fixe, sans prise en compte d'effets dus aux variations de masse volumique.

Nous proposerons ici une méthode modifiant en partie cet état de fait. Lors de la boucle de résolution de la méthode New Source, nous réactualiserons la masse volumique dans les mailles où se déroulent le changement de phase, en fonction de la composition du volume élémentaire considéré. Afin de ne pas complexifier cette réactualisation, nous choisirons un seuil sur la quantité de fraction solide au-delà duquel nous imposerons la masse volumique du volume élémentaire de contrôle comme étant celle de la glace ou du mélange gaz/liquide (mélange calculé via la fraction volumique issue du VOF). Cette méthode a été validée dans le chapitre suivant, où une étude du seuil a été menée. Nous avons évoqué le concept approximatif de cette correction, car l'évolution d'une masse volumique induit une évolution du volume. Nous sommes en présence de phases incompressibles, nous subirons donc un effet de perte ou de création de masse lors de nos simulations. Néanmoins, les rapports de masse volumique étant assez faibles, compte-tenu que nous souhaitons avoir des tendances sur l'évolution d'un bloc de glace coincé entre deux ailettes par exemple, nous pouvons utiliser ces approches.

Nous avons par ailleurs voulu utiliser ces approches dans des configurations où le volume de glace formé/résiduel peut se déplacer (que ce soit dans un écoulement forcé ou selon la gravité) ou se déformer. Ainsi, nous avons utilisé deux méthodes différentes concernant la manière de gérer la nature de la phase solide : solide imperméable, pénalisé via une approche Kozeny-Carman [Koz27] telle que que les mailles où le solide existe soient bloquées via une pénalisation de type Darcy (vitesse nulle si le matériau est non poreux), ou via une méthode dite de "viscosité" [Mau08], où le solide est vu comme un liquide indéformable (imposition d'une viscosité de plusieurs ordres de grandeur supérieure à celle du fluide principal) et est donc susceptible de se mouvoir. Ces deux approches ont aussi été comparées, en gardant à l'esprit que les blocs de glace doivent pouvoir bouger, dans le chapitre suivant. Des comparaisons ont été menées dans le chapitre 6.1.3.

5.4 VOF-PC : le changement de phase par un schéma VOF-PLIC

Les méthodes précédentes possèdent des avantages évidents, notamment leur robustesse numérique et leur précision. Néanmoins, il est important d'y noter leur aspect très ciblé sur une problématique donnée, à savoir le changement de phase solide/liquide, et sont notamment issues des études portant sur les changement de phases de métaux. Cet aspect est important à noter, car le côté "masse volumique variable" sera toujours une donnée importante pour quantifier un mécanisme de changement de phase. Nous avons donc conçu une nouvelle méthode, basée sur une approche basée sur la résolution explicite de la condition de Stefan à l'interface (conservation du flux thermique correspondant à la chaleur latente) dans chaque maille où le changement de phase doit s'opérer, permettant de prédire avec une meilleure sensibilité les effets de transferts de masse et de chaleur lors du changement de phase. Cette méthode est originale et permet une conservation de la masse via l'utilisation d'une approche VOF-PLIC.

Nous détaillerons le concept de cette méthode dans le cas de solidification d'eau liquide. Ainsi, le principe est le suivant : un volume élémentaire coupé par une interface entre le liquide et un autre fluide (même le solide, qui sera aussi vu comme un fluide extrêmement visqueux, cf. méthode New Source en viscosité) est un volume qui doit changer de phase si sa température est inférieure ou égale à celle de solidification. Cette interface entre le solide se formant et le liquide se dégradant, plane à l'échelle de la maille, est vue comme une frontière entre plusieurs phases distinctes, se déplaçant à une vitesse prévisible via le problème de Stefan plan à deux phases, à masse volumique variable non conservatif (cf. chapitre 6). La vitesse est donnée par l'expression (5.10), via l'égalité des flux de chaleur à l'interface.

$$V_{cp} = \frac{(\lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial n} - \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial n})_{interface}}{\rho_l L_f} \quad (5.10)$$

Cette vitesse peut donc être directement utilisée pour déplacer le champ de fraction solide et effectuer des bilans de matières à l'échelle de la maille afin de déterminer le taux de transformation de phase. Nous avons choisi la méthode VOF-PLIC, pour ses propriétés de conservation de la masse et pour son caractère continu par morceaux (l'interface dans les mailles d'intérêt est toujours plane à l'échelle locale), pour réaliser ce déplacement. Ainsi, notre méthode peut être développée selon l'algorithme 3. Nous avons nommé cette méthode VOF-PC, pour Volume Of Fluid - Phase Change.

La connaissance des bonnes températures locales qui seront utilisées dans le calcul du flux à l'interface est très importante, notre choix se faisant sur les mailles voisines en fonction de l'orientation du vecteur normal à l'interface. Ainsi, si l'interface est préférentiellement selon une des trois directions de l'espace, en fonction du sens du vecteur normal à l'interface, nous choisirons les mailles de part et d'autre de l'interface comme mailles de références pour les températures liquides et solides pour le calcul du flux. Cette approche respecte ainsi le concept des volumes finis tout en simplifiant les interpolations.

Afin de respecter la condition à l'interface sur la température, nous imposerons une modification de l'équation de l'énergie, dans la maille en cours de changement de phase via l'ajout du terme source de changement d'état basé sur la variation de fraction solide. L'énergie est modifiée localement avec le terme source basé sur le champ de fraction solide C_s , à savoir :

$$q = \frac{\rho_l L_f (C_s^{n+1} - C_s^n)}{\Delta t}$$

Algorithm 3 Algorithme de changement de phase via la méthode VOF-PC - solidification

for $k = 1 \rightarrow NbMail_{max}$ **do**

Calcul de la présence de l'interface dans chaque maille $\frac{\nabla C^s}{\|\nabla C^s\|_k} = \mathbf{n}_k$

if $\|\mathbf{n}_k\| = 1$ (présence de l'interface dans la maille k) **then**

Orientation de $n_k \Rightarrow$ Température froide $T_{s0,k}$ et chaude $T_{l0,k}$ (**solidification**)

Calculs des flux de part et d'autre de l'interface, via repérage de l'interface (interpolation) étant à $T = T_f$, $C_s = 0.5$

Calcul de $V_{cp,k}(t)$, via (5.10)

end if

Advection à $V_{cp,k}$ via VOF-PLIC de $C_{k,s}$

Actualisation de $C_{k,l}$ en fonction de $C_{k,s}$

T_k^{n+1} via imposition d'un terme source q , temps de correction de l'équation de l'énergie

end for

Cette méthodologie est appliquée par Shin et al. [SJ02], mais basée dans cet article sur le front-tracking. L'originalité ici est de réaliser l'advection par la méthode VOF-PLIC, assurant une bonne conservation de la masse, et restant compatible avec les différentes méthodes utilisées pour simuler l'écoulement notamment.

Porosité de la couche de givre et humidité de l'air

Nous avons imaginé comment faire intervenir la porosité dans cette méthode. En effet, comme nous l'avons vu auparavant, le givre est un milieu poreux, où l'air et la vapeur d'eau sont susceptibles d'évoluer. Il convient dès lors de modifier les lois physiques régissant la manière dont se comporte la phase "solide" (les guillemets sont utilisés pour la raison que cette phase est fluide aux yeux de la mécanique des fluides).

Concernant l'humidité de l'air, la résolution d'une équation de transport appliquée à une espèce portant l'information de l'humidité peut être utilisée. Cette espèce doit prendre en compte à la fois le changement de phase (effet de pompage possible si le volume disponible est insuffisant dans la maille) et la porosité (lois à mettre en place au niveau de l'interface givre/air+vapeur) afin de prendre en compte l'effet de l'infiltration de la vapeur dans la couche de givre. Cette dernière remarque montre aussi que le givre doit aussi prendre en compte cet effet, pour symboliser sa densification par effets de gravité ainsi que par la fonte d'une partie du givre sous-interface puis regivrage.

5.5 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une grande variété de méthodes actuellement disponibles pour réaliser du changement de phase, compatibles ou non avec notre approche 1-Fluide en volumes finis. Deux méthodes ont été développées, l'une basée sur une correction de la méthode New Source déjà existante et l'autre totalement originale, basée sur un transport advectif par méthode VOF-PLIC de l'interface de changement de phase, à la vitesse résolue via un problème de Stefan plan local. Cette seconde méthode sera validée dans le chapitre suivant.

Concernant les phénomènes de transport de l'humidité et de l'aspect poreux du givre, des pistes ont été posées pour une éventuelle mise en pratique par la suite. Il reste sur ces points de nombreuses interrogations, notamment sur les modèles à mettre en place (au-delà des méthodes, il faut savoir modéliser l'humidité comme étant une espèce capable de devenir une phase et inversement). Nous pouvons pour ce dernier point proposer d'utiliser l'approche VOF-SubMesh développée dans [Car11], permettant de voir des marqueurs lagrangiens porteurs d'une information "humidité" et de type phasique.

Chapitre 6

Le changement de phase sous écoulement à masse volumique variable

6.1 Cas du changement de phase hors écoulement

6.1.1 Le problème de Stefan à masse volumique variable

Description du problème de fusion conservatif

Nous avons un domaine initialement solide, à la température $T_0 < T_f$. Ce milieu occupe une région semi-infinie $x \geq 0$. T_f est la température pour laquelle à pression constante un solide fond, elle est appelée température de fusion ou température d'équilibre de changement de phase. Nous fixons la température de la limite pour $x = 0$ à $T_L > T_f$ ce qui implique que dès $t > 0$ nous avons fusion du solide dans le domaine et création de plusieurs sous-domaines.

Le premier sous-domaine est compris entre $x = 0$ et le front de fusion $x = X_s(t)$. Il correspond à la zone où le liquide est formé, et où la température est supérieure à celle de fusion. L'évolution de la température est régie par l'équation de l'énergie. Le second sous-domaine est celui compris entre $x = X_s(t)$ et $x \rightarrow \infty$. Il correspond à la zone où le matériau est encore sous forme solide. De la même façon, l'équation de l'énergie permet de calculer l'évolution de la température dans cette zone. À l'interface entre ces deux sous-domaines, la température est celle de fusion, et la conservation du flux de chaleur se fait au travers de cette interface. C'est ce qu'on nomme la condition de Stefan-Neumann.

Nous pouvons formuler mathématiquement le problème par les équations ci-dessous (6.1, 6.2 et 6.3) :

– Dans la zone liquide

$$\begin{cases} T_l(x=0) = T_L \\ \frac{\partial T_l}{\partial t} = \alpha_l \frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2} \end{cases} \quad (6.1)$$

– Dans la zone solide

$$\begin{cases} T_s(x \rightarrow \infty) = T_0 \\ \frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} \end{cases} \quad (6.2)$$

– A l'interface (projection selon l'axe d'intérêt (Ox), donc signe du terme source $\rho_L L$ négatif du à l'orientation de la normale sortante à l'interface)

$$\begin{cases} T_l(x = X_s(t)) = T_s(x = X_s(t)) = T_f \\ -\lambda_s \left(\frac{\partial T_s}{\partial x} \right)_{x=X_s(t)} = -\lambda_l \left(\frac{\partial T_l}{\partial x} \right)_{x=X_s(t)} - \rho_l L_f \frac{\partial s}{\partial t} \end{cases} \quad (6.3)$$

La projection des équations est selon l'axe d'intérêt (Ox), donc le signe du terme source $\rho_l L$ négatif est du à l'orientation de la normale sortante à l'interface. Les équations (6.1, 6.2, 6.3) sont non adimensionnées. Les températures T_L , T_0 et T_f ainsi que les grandeurs thermodynamiques λ_s , λ_l , α_s , α_l et ρ_l sont considérées constantes dans la gamme de température donnée. Les indices s et l correspondent respectivement au solide et au liquide.

Si les masses volumiques des deux états sont différentes, par exemple celle du solide est plus petite que celle du liquide (typiquement le cas pour l'eau), nous aurons une mise en mouvement du solide du à la contraction de la masse initiale de solide changeant d'état vers un liquide plus dense. Ceci peut être expliqué par un bilan de masse. Soit une masse décrite comme étant égale à celle de liquide ajoutée à celle de solide (6.4). Prenons un point dans le solide à l'abscisse $X_e(t)$ loin de l'interface de fusion. La masse entre $x = 0$ et $x = X_e(t)$ est calculée dans un volume $V(t)$.

$$M(t) = \rho_l [X_s(t) - 0] + \rho_s [X_e(t) - X_s(t)], \text{ pour } t > 0 \quad (6.4)$$

Ainsi, si il y a conservation de la masse, $\frac{dM}{dt} = 0$, nous obtenons :

$$v(t) = \left(1 - \frac{\rho_l}{\rho_s} X'_s(t)\right), \text{ pour } t > 0 \quad (6.5)$$

Nous pouvons donc observer une vitesse, dans le solide, proportionnelle à la vitesse de déplacement du front de fusion. Nous avons dans ce cas précis, du au ratio de masses volumiques $\frac{\rho_l}{\rho_s} > 1$, un déplacement du solide plus rapide que celui du front de fusion. Nous devons donc ajouter un terme dans l'équation de l'énergie sur le solide, qui n'est plus juste une équation de type Fourier, dépendant de cette vitesse.

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} + v(t) \frac{\partial T_s}{\partial x} = \alpha_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} \quad (6.6)$$

Si nous devons résoudre cette équation, nous obtiendrons les solutions sur la température suivantes :

– Dans la zone liquide

$$T_l(x, t) = T_L - (T_L - T_f) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_l t}}\right)}{\operatorname{erf}(\xi)} \quad (6.7)$$

– Dans la zone solide

$$T_s(x, t) = T_0 + (T_f - T_0) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}} - (1 - \mu)\nu\xi\right)}{\operatorname{erf}(\mu\nu\xi)} \quad (6.8)$$

– A l'interface

$$\begin{cases} X_s(t) &= 2\xi\sqrt{\alpha_l t} \\ v(t) &= (1 - \mu)\xi\sqrt{\frac{\alpha_l}{t}} \end{cases} \quad (6.9)$$

ξ est l'unique racine positive (si elle existe) de l'équation transcendante suivante (6.10) :

$$\frac{St_l}{\xi e^{\xi^2} \operatorname{erf} \xi} - \frac{St_s}{\mu\nu\xi e^{(\mu\nu\xi)^2} \operatorname{erf}(\mu\nu\xi)} = \sqrt{\pi} \quad (6.10)$$

où St_l et St_s sont les nombres de Stefan respectifs des états liquide et solide. De plus, $\mu = \frac{\rho_l}{\rho_s}$ et $\nu = \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_s}}$.

La démonstration de cette solution est sensiblement la même que celle qui est exposée dans la sous-section décrivant le problème de solidification non-conservatif.

Description du problème de solidification non-conservatif

Le problème de cette formulation conservative est qu'il faut prendre en compte ces phénomènes de dilatation ou de contraction. Actuellement, nous ne pouvons les prendre en compte au sein de la bibliothèque de calcul scientifique Thétis, utilisée tout au long de ce mémoire. Afin de vérifier si, au-delà de cette forte hypothèse, nous pouvons résoudre de manière adaptée un phénomène de condensation solide de vapeur d'eau en glace peu dense, nous avons résolu un problème de Stefan non-conservatif à masse volumique variable.

Reprenons le système d'équations (6.1, 6.6 et 6.3) dans lequel nous substituons les indices s et l et supprimons le terme convectif dans l'équation de l'énergie dans la zone liquide. L'hypothèse de non-conservation de la masse simplifie l'équation de l'énergie dans la phase liquide. Mais nous perdons par la même occasion le fait d'assurer en écoulement (ce qui n'est pas le cas ici) une conservation de la masse.

– Dans la zone solide

$$\begin{cases} T_s(x=0) = T_0 \\ \frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} \end{cases} \quad (6.11)$$

– Dans la zone liquide

$$\begin{cases} T_l(x \rightarrow \infty) = T_L \\ \frac{\partial T_l}{\partial t} = \alpha_s \frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2} \end{cases} \quad (6.12)$$

– A l'interface (projection selon l'axe d'intérêt (Ox), donc signe du terme source $\rho_L L$ négatif du à l'orientation de la normale sortante à l'interface)

$$\begin{cases} T_l(x = X_s(t)) = T_s(x = X_s(t)) = T_f \\ -\lambda_s \left(\frac{\partial T_s}{\partial x} \right)_{x=X_s(t)} = -\lambda_l \left(\frac{\partial T_l}{\partial x} \right)_{x=X_s(t)} - \rho_l L_f \frac{\partial s}{\partial t} \end{cases} \quad (6.13)$$

Nous pouvons dans un premier temps résoudre les champs de température dans les deux zones, de manière séparée. Pour cela, nous opérons le changement de variable $\xi = \frac{x}{\sqrt{t}}$. Nous obtenons l'équation différentielle sur la zone solide (et par analogie la zone liquide) (6.14).

$$F_s''(\xi) + \frac{\xi}{2\alpha_s} F_s'(\xi) = 0, \text{ avec } F_s(\xi) \text{ la transformée de la température solide.} \quad (6.14)$$

Nous obtenons à des constantes près (notées A et B, indicées selon la nature de la zone) le champs de température solide ou liquide (6.15).

$$\begin{cases} T_l(x, t) = A_l + B_l \sqrt{\pi \alpha_l} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_l t}}\right) \\ T_s(x, t) = A_s + B_s \sqrt{\pi \alpha_s} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}}\right) \end{cases} \quad (6.15)$$

Les constantes se déduisent naturellement des conditions initiales et aux limites, ainsi que de la condition de Stefan-Neumann (égalité des flux de chaleur à l'interface de changement de

phase avec le terme source de chaleur latente). Nous obtenons le système suivant (6.16).

$$\left\{ \begin{array}{l} T_l(x, t) = T_L - (T_L - T_f) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_l t}}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\xi \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}}\right)} \\ T_s(x, t) = T_0 - (T_0 - T_f) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}}\right)}{\operatorname{erf}(\xi)} \\ \sqrt{\pi} = \frac{St_s}{\xi \frac{\rho_l}{\rho_s} e^{\xi^2} \operatorname{erf} \xi} - \frac{St_l}{\sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}} \xi e^{\left(\sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}} \xi\right)^2} \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}} \xi\right)} \\ X_s(t) = 2\xi \sqrt{\alpha_s t} \end{array} \right. \quad (6.16)$$

Nous donnerons l'équation transcendante pour le cas de fusion, car hormis l'interversion des indices dans les champs de température et dans la position du front, aucune autre différence n'apparaît dans la solution en fusion (6.17).

$$\frac{St_l}{\xi e^{\xi^2} \operatorname{erf} \xi} - \frac{St_s}{\frac{\rho_l}{\rho_s} \sqrt{\frac{\alpha_l}{\alpha_s}} \xi e^{\left(\sqrt{\frac{\alpha_l}{\alpha_s}} \xi\right)^2} \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{\alpha_l}{\alpha_s}} \xi\right)} = \sqrt{\pi} \quad (6.17)$$

6.1.2 Démarche de validation et résultats

Comme évoqué précédemment, la glace et l'eau liquide (voire sous forme de vapeur) n'ont pas les mêmes masses volumiques. Ces différences de masse volumique entraîne une dilatation (ou compression) du fluide formé, phénomène physique que nous ne modélisons pas. Nous étudierons les cas en condensation de vapeur d'eau en glace légère (peu dense) et de fusion de glace légère en eau liquide, selon les solutions proposées de Stefan à masse volumique variable non conservatif. Nous avons, à partir des équations précédentes, calculé des solutions semi-analytiques pour le cas de solidification et le cas de fusion.

Plusieurs possibilités s'offrent à nous en termes de résolution et des méthodes employées. Nous nous focaliserons sur les deux méthodes disponibles, à savoir la méthode New Source corrigée pour une masse volumique variable non conservatif et la méthode VOF-PC à Stefan local. Pour la première méthode, nous nous intéresserons d'une part à éprouver notre correction et à discuter de l'intérêt de la variante où le solide est vu comme un fluide à forte viscosité. Nous nommerons le premier cas de changement de phase par "perméabilité" où le solide formé (ou

fondu) est réellement un solide possédant une perméabilité décrite au moyen d'un loi de type Kozeny-Carman [Koz27] (donc reliée à la porosité), perméabilité typiquement valant $10^{-15}m^2$, et impactant l'équation de Navier-Stokes en pénalisant la vitesse via un terme de Darcy.

De plus, un travail sur le calcul des moyennes des propriétés thermodynamiques à l'interface de changement d'état est réalisé. Il consiste à déterminer quel type de moyenne (continue via une combinaison linéaire des propriétés physiques vis-à-vis des teneurs en liquide et en solide, discontinue via un seuil sur la fraction solide) est plus adapté à répondre à notre étude. Une fois ce choix effectué, toutes les études suivantes seront en adéquation avec ce choix.

Concernant la seconde méthode, nous étudierons sa capacité à prédire l'évolution du front de liquéfaction (ou de solidification) correctement ainsi que son aptitude à déterminer de manière adéquate les champs de températures. Nous appliquerons ensuite cette méthode à un cas de liquéfaction d'un bloc de glace sous un écoulement de vapeur chaude, afin d'étudier la dynamique de fusion et le déplacement des phases résiduelle (solide) /formée (eau liquide).

6.1.3 Méthode New Source avec correction

Fusion de glace en eau liquide

L'état initial de notre problème est un domaine, de dimension unitaire selon l'axe d'intérêt ($L = 1m$) et de largeur $L/10m$, le problème étant purement mono-dimensionnel. Tout le domaine est rempli de glace légère (peu dense), dont les propriétés sont rappelées dans le tableau (6.2). Ce domaine est initialement à une température de $268,15K$ et une condition sur la limite inférieure implique une température de $283,15K$. Les parois latérales sont adiabatiques (aucun flux de chaleur ne peut les traverser) et la limite supérieure est aussi adiabatique.

Nous nous plaçons toujours dans une configuration où nous ne pouvons assurer une conservation de la masse, car notre volume de calcul est fixe. L'équation de l'énergie est résolue via un solveur direct (MUMPS [Ame00]), avec une méthode de type Voller [Vol90] pour le calcul du champs de fraction solide. La fraction solide sera prédite via une méthode de point fixe lors de la résolution de l'équation de l'énergie, comme précisé dans le chapitre 4. Le schéma de discrétisation spatiale est de type Hybride (ordre de convergence 1.5), le schéma centré n'étant pas adapté à cette configuration. Le temps est discrétisé à l'ordre 1. Le pas d'espace est choisi égal à $4mm$, le pas de temps lui étant égal à $0,1s$. Pour la méthode de type viscosité, Navier-Stokes doit être résolu. Pour cela, nous utiliserons une méthode de type Lagrangien-Augmenté Adaptatif Algébrique, résolu par un solveur direct. Le pas de temps sera identique à celui de résolution de l'équation de l'énergie. Le résidu lors des résolutions successives est attendu à la précision machine (double précision, de l'ordre de 10^{-14}).

La solution théorique de référence est obtenue via résolution de l'équation transcendante. Cette solution nous permet d'obtenir la position du front de changement de phase en fonction

du temps, mais nous pouvons aussi obtenir le champ 1D de température en fonction du temps et de la position. La comparaison portera sur le champ de fraction solide et donc sur la position du front de condensation. Si notre solution est en adéquation, cela prouvera par la même occasion que le champs de température est en accord avec la solution analytique.

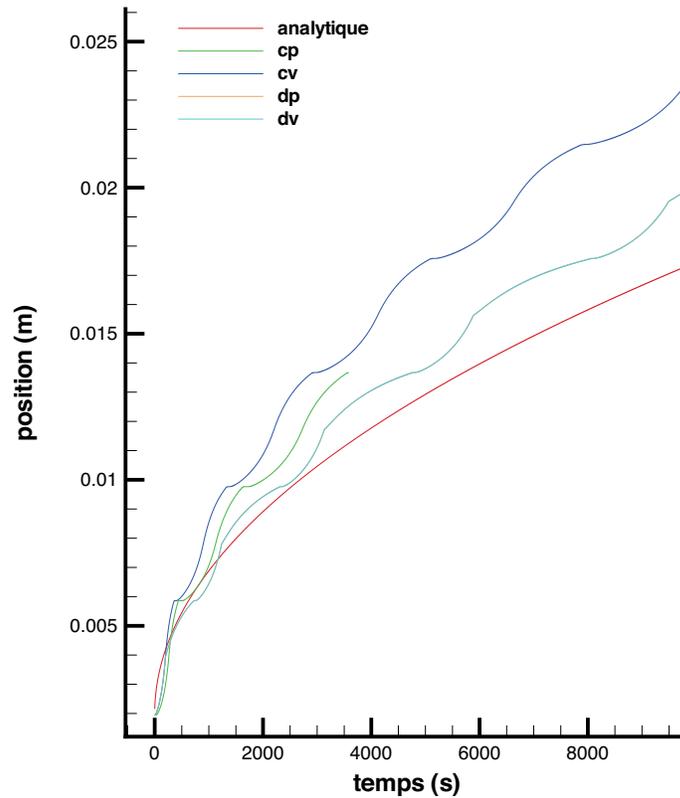


FIGURE 6.1 – Variation de la hauteur d'eau liquide dans le cas de fusion d'un bloc de glace 1D, méthode New Source avec correction.

Nous avons vérifié les résultats entre les méthodes en perméabilité et en viscosité, sur ce cas où aucun écoulement n'est calculé. La méthode viscosité notée *cv* et *dv* (selon la moyenne utilisée, continue ou discontinu) aura notre préférence pour la suite car nos blocs de glace pourront être mobiles, mais nous pouvons noter que son utilisation n'apportera pas forcément de meilleurs résultats. Nous choisissons tout de même d'utiliser cette méthode pour des soucis purement numériques, la méthode en perméabilité ne nous permettrait pas de faire bouger un solide.

Nous pouvons noter sur la figure (6.1) que le choix de la moyenne (*d* pour discontinu et *c* pour continu) est important. Un net écart apparait entre ces deux moyennes. Les oscillations qui apparaissent sont dues à la méthode de suivi du front, sous forme d'interpolation linéaire. Ces ondulations ont la même cause pour les différents maillages utilisés, seule leur amplitude évolue (et leur période). Ces effets n'ont donc aucune influence sur l'erreur relevée, qui est indépendante de la méthode de mesure. Une étude sur le seuil de correction en fonction du

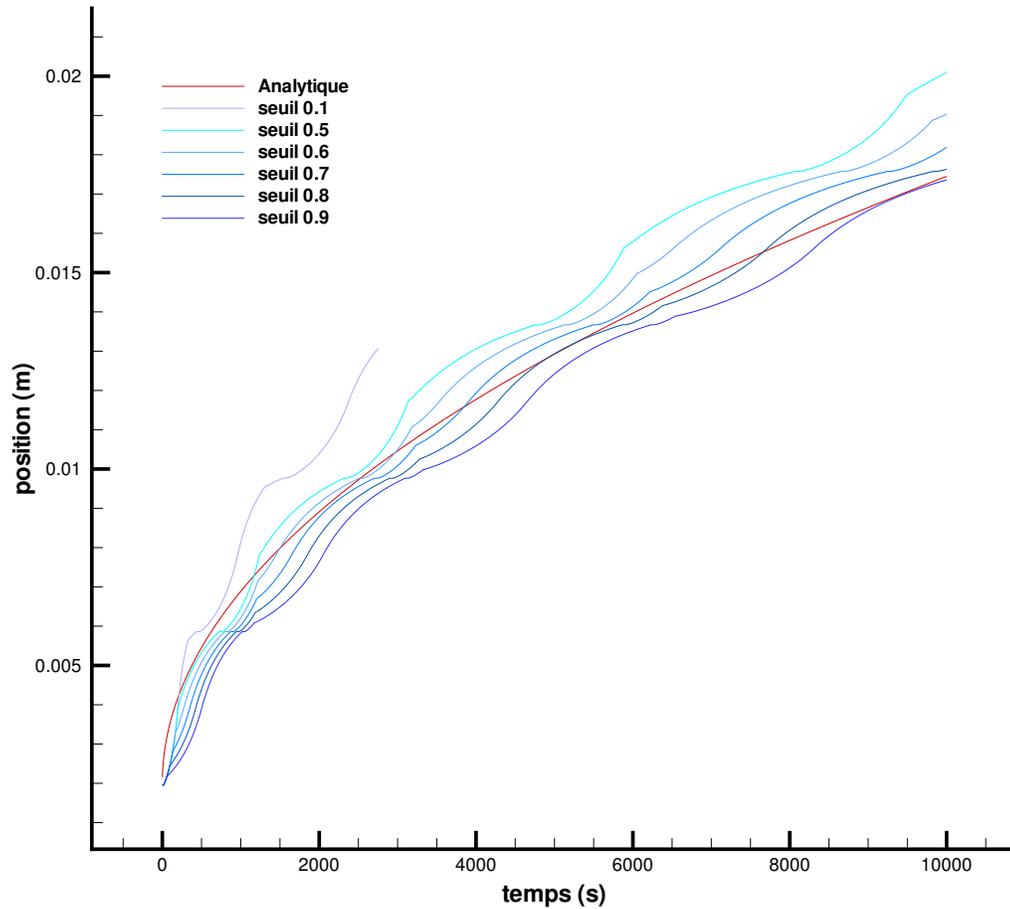


FIGURE 6.2 – Variation de la hauteur d’eau liquide avec la méthode viscosité en moyennes discontinues, en fonction du seuil choisi.

taux de présence de la fraction solide dans un volume de contrôle a aussi été réalisé, visible sur la figure (6.2). Ce seuil permet d’affiner le changement de phase. Une fois le choix sur la moyenne et sur la valeur de ce seuil d’établi, nous garderons ces critères pour les études suivantes. Les erreurs intégrées dans le temps sur les études en fonction de la valeur du seuil (pour la méthode en viscosité avec un calcul des moyennes discontinu) nous permettent de trouver le meilleur critère pour procéder aux tests suivants. La méthode en viscosité avec un calcul des moyennes discontinues et un seuil de 0.8 sera notre référence par la suite.

De plus, nous pouvons observer que l’évolution de l’erreur absolue instantanée (6.3) est très chaotique, un calcul de l’erreur relative intégrée est nécessaire. L’erreur relative (intégrée) est indiquée dans le tableau (6.1). Elle nous conforte dans le choix de la méthode viscosité en moyenne discontinue avec un seuil de 0.8. En réalité, cette méthode accumule de l’erreur au début de la simulation, erreur qui est compensée par la suite. Identiquement, le seuil 0.7 accumule moins d’erreur en début de simulation mais devient par la suite moins précis.

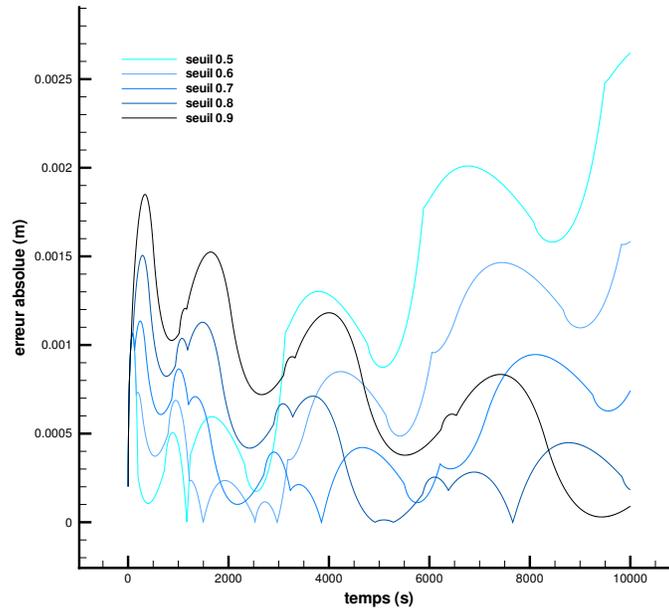


FIGURE 6.3 – Erreur absolue instantanée, avec la méthode viscosité en moyennes discontinues, en fonction du seuil choisi.

Condensation de vapeur d'eau en glace

L'état initial de notre problème est un domaine, de dimension unitaire selon l'axe d'intérêt ($L = 1m$) et de largeur $L/10m$, le problème étant mono-dimensionnel. Tout le domaine est rempli de vapeur saturée d'eau, dont les propriétés sont rappelées dans le tableau (6.2). Ce domaine est initialement à une température de $283,15K$ et une condition sur la limite inférieure implique une température de $263,15K$. Les parois latérales sont adiabatiques (aucun flux de chaleur ne peut les traverser) et la limite supérieure est aussi adiabatique.

De la même façon que précédemment, la solution théorique nous permet d'obtenir la posi-

Seuil	Erreur rel. intégrée
0.5	$1,013433727 \cdot 10^{-1}$
0.6	$6,478213183 \cdot 10^{-2}$
0.7	$4,095740201 \cdot 10^{-2}$
0.8	$3,807675672 \cdot 10^{-2}$
0.9	$6,286596193 \cdot 10^{-2}$

TABLE 6.1 – Erreurs relatives intégrées sur le temps pour les différents seuils testés.

Fluide	μ (en $Pa.s$)	ρ (en $kg.m^3$)	C_p ($J.kg^{-1}$)	λ ($W.m^{-1}.K^{-1}$)
Vapeur	$1,0.10^{-5}$	1,27	1410,0	0,037
Eau liquide	$1,0.10^{-3}$	1000	4180,0	0,55
Glace "Solide"	/	500,0	2060,0	2,1
Glace "Visqueuse"	$1,0.10^5$	500,0	2060,0	2,1

TABLE 6.2 – Grandeurs physiques des espèces rencontrées (pour la vapeur, à $T=5^\circ C$.)

tion du front de changement de phase en fonction du temps, mais nous pouvons aussi obtenir le champ 1D de température en fonction du temps et de la position. La comparaison portera sur le champ de fraction solide et donc sur la position du front de condensation, qui si notre solution est en adéquation, prouvera par la même occasion que le champs de température est en accord avec l'analytique.

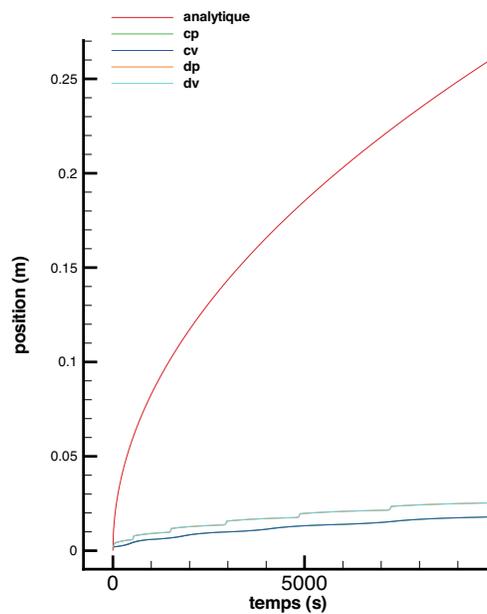


FIGURE 6.4 – Variation de la hauteur de glace.

Notre correction est clairement limitée vis-à-vis de ces problématiques de condensation, voire de condensation solide. En effet, il faut rappeler que la condensation est un processus complexe, faisant intervenir des sites de nucléation de gouttes au niveau desquels des surpressions importantes apparaissent. Les phénomènes qui s'y déroulent ne peuvent être captés via

notre approche, et ces phénomènes sont essentiels d'un point de vue thermodynamique pour réellement modéliser une dynamique de croissance et de manière plus globale de condensation.

6.1.4 Méthode VOF-PC pour le changement de phase

Fusion de glace en eau liquide : Stefan 1D

Nous reprenons le cas précédent de changement de phase entre de l'eau liquide et de la glace. Nous allons étudier ici le processus identique, celui de fusion d'un volume de glace en eau, en 1D, via la méthode VOF-PC. Cette méthode est basée sur le déplacement local de l'interface en répondant à un problème de Stefan, dans les volumes élémentaires où se déroule le changement de phase. Ainsi, en 1D, nous devrions retrouver la solution du problème de Stefan. Nous réaliserons par ailleurs une étude en convergence spatiale de façon à montrer l'ordre de convergence de cette approche, en se basant sur la position du front de solidification.

La géométrie est identique au précédent cas de validation basé sur le problème de Stefan, sous-section 6.1.3. Elle est rappelée sur la figure (6.5). Nous nous intéresserons donc à la fusion d'un domaine de glace, dans un domaine semi-infini, ouvert en haut. Ce problème est 1D, donc la discrétisation sera importante selon la direction de la croissance. La convergence spatiale se portera à raffiner cette direction (verticale). Le pas de temps sera fixé à 1 seconde.

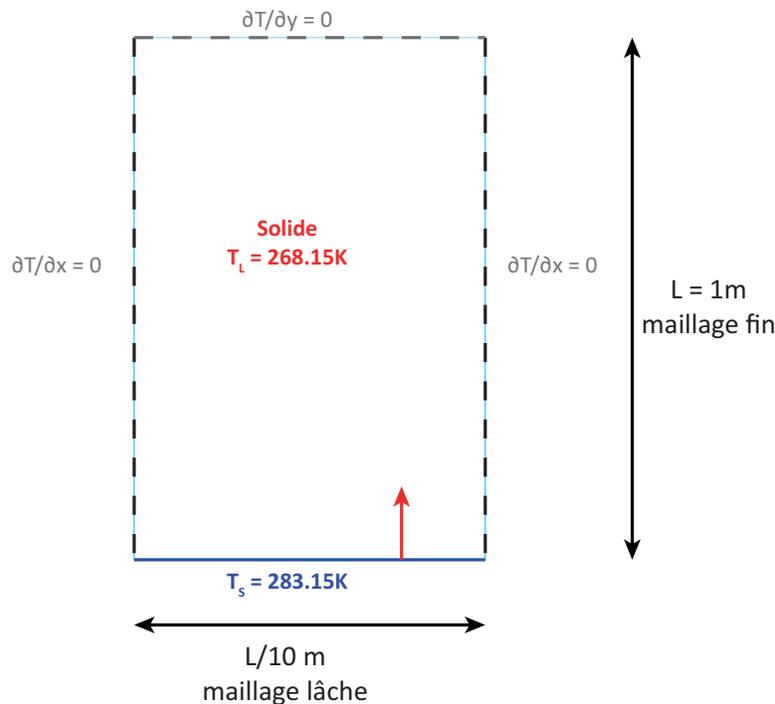


FIGURE 6.5 – Définition de la géométrie étudiée pour le cas de fusion, via l'approche de Stefan.

Nous comparerons donc notre mesure de la position du front de liquéfaction au cours du temps avec la solution semi-analytique du problème de Stefan à masse volumique variable, en

nous intéressant à de l'eau et de la glace "légère". Pour démonstration, la figure (6.6) montre l'adéquation entre la position au cours du temps du front de fusion pour l'analytique et la simulation, pour un maillage donné entre la méthode choisie précédemment (New Source à masse volumique variable, en viscosité avec le seuil choisi) et la méthode présentée ici. Les fluctuations sont dues au schéma utilisé et au maillage, étant donné que l'approche considéré n'est pas optimale concernant les volumes sous-maillage. Nous pouvons y noter que les deux méthodes ont effectivement tendance à rapporter une bonne évolution du front de solidification, mais que la méthode VOF-PC est plus précise. En effet, l'évolution de la position du front est plus proche de la solution analytique que celle observée via la méthode New Source corrigée, qui est plus rapide.

La courbe (6.7) montre l'étude de convergence spatiale menée pour des maillages de plus en plus raffinés selon la direction de propagation.

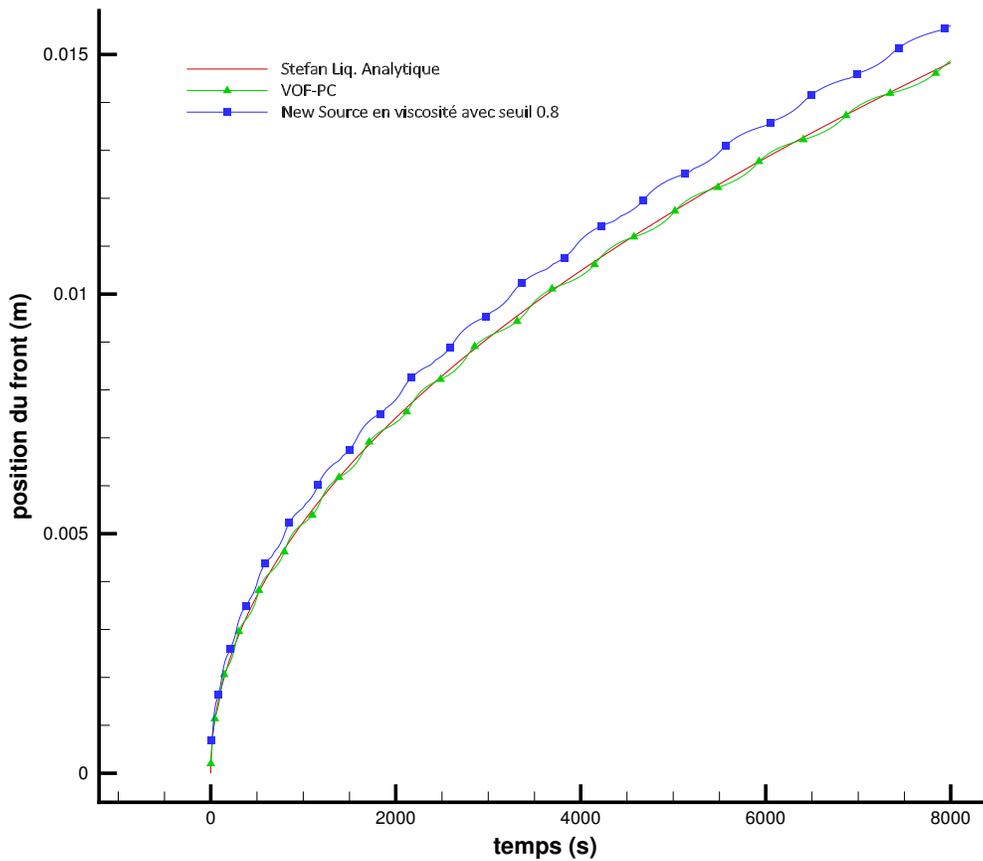


FIGURE 6.6 – Position du front de fusion, au cours du temps, pour les modèles présentés (New Source et VOF-PC), vis-à-vis de la solution analytique.

La méthode VOF-PLIC telle que mise en place dans le code de calcul Thétis est à l'ordre 1, ce que nous retrouvons (proche) pour nos différentes vérifications, pour des maillages deux fois plus fins à chaque essais. Le tableau (6.3) dresse les ordres de convergence locaux pour

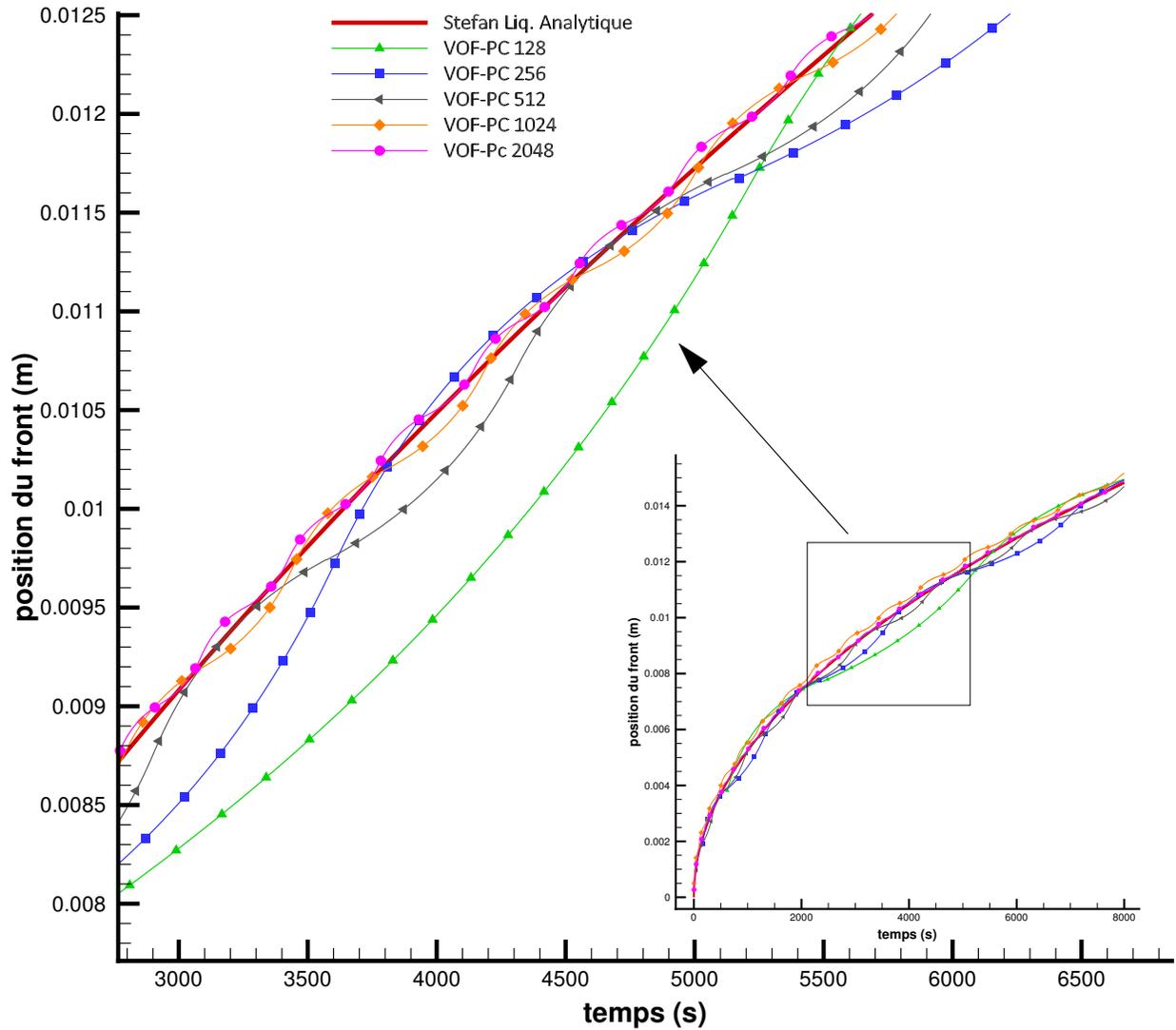


FIGURE 6.7 – Position du front de fusion, au cours du temps, pour différents maillages (méthode VOF-PC), vis-à-vis de la solution analytique.

différents maillages, vis-à-vis de la solution analytique.

L'ordre de convergence est calculé en utilisant la solution analytique comme référence, en réalisant l'intégrale sur le domaine des erreurs absolues entre la simulation et la solution analytique. Cette somme est utilisée afin de déterminer l'ordre de convergence local, via l'approche de Richardson.

$$p = \frac{\ln \frac{E_2}{E_1}}{\ln \frac{h_2}{h_1}} \quad (6.18)$$

avec $E_i = \|f_{exacte} - f_i\|$ les erreurs absolues du maillage i et h_i le pas d'espace du maillage i . L'ordre de convergence est p . Cette approche est uniquement valable dans la zone asymptotique

Maillage	Ordre de convergence local
256	0.619
512	0.632
1024	0.941
2048	0.939

TABLE 6.3 – Ordres de convergence locaux, en fonction du maillage, pour le cas de fusion Stefan 1D avec la méthode VOF-PC.

de convergence, dans laquelle nous nous trouvons.

6.2 Cas du changement de phase sous écoulement latéral

Fonte d'une couche de glace sous un écoulement d'air chaud

Le fonctionnement d'un échangeur de chaleur est donc la plupart du temps soumis à un flux d'air contenant une quantité de vapeur d'eau constante sur des périodes parfois de plusieurs jours (selon les conditions météorologiques de l'environnement). Ce constat nous a donc conduit à étudier comment un transfert de chaleur et de masse se déroule en présence d'un écoulement d'air, lorsque ce changement de phase se déroule entre des fluides/solides de masse volumique différente (le rapport entre ces masses volumiques pouvant aller jusqu'à presque trois ordres de grandeur dans les conditions les plus intenses d'utilisation, notamment en présence du phénomène de condensation solide de la vapeur d'eau en glace).

Nous allons donc étudier le mode de changement de phase d'une couche fine et longue de glace "légère", dans un canal représentant l'espace entre deux ailettes (ici plus large, en étudiant de plus un demi canal via une condition de symétrie), chauffée par la condition à la limite inférieure à température fixe et balayée par un écoulement de vapeur chaud à vitesse constante en entrée. La figure (6.8) décrit la situation initiale.

Le but de cette étude est donc d'observer la manière dont le bloc (qui peut être advecté par l'écoulement, sans déformation) va évoluer au cours du temps, si par exemple une couche d'eau liquide en dessous peut se former et servir de coussin pour améliorer l'évacuation du bloc. Afin de ne pas bloquer son éventuel mouvement, la couche est décollée d'une hauteur d'une maille à la paroi du bas.

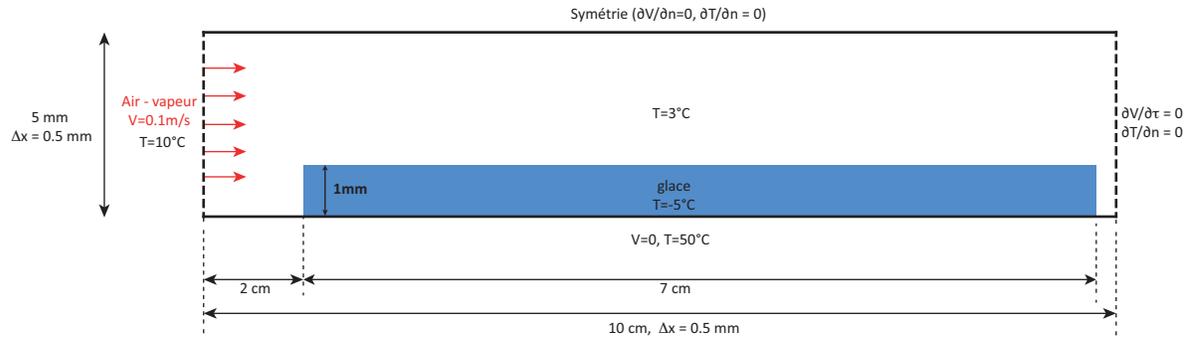


FIGURE 6.8 – Domaine initial d'étude du changement de phase d'une couche de glace sur une plaque chaude en présence d'un écoulement latéral de vapeur chaude.

Déplacement d'un bloc de glace sous un écoulement d'air chaud

L'étude qui sera réalisée est dans un second temps plus simple. Pour cela, nous nous intéresserons à un domaine initialement à la température de 3°C , où un bloc de glace est noyé dans de l'air. La frontière en entrée du domaine possède une température constante de 1°C quand la limite inférieure sur laquelle repose notre bloc de glace est fixée à la température de 50°C , représentant ainsi des conditions de dégivrage. Les autres conditions aux limites sur les frontières restantes sont de type adiabatique. Nous injecterons dans le domaine de l'air, à une vitesse de $0,1\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Le pas d'espace dans le domaine de calcul sera de 0.05 millimètre, le pas de temps de résolution des équations de Navier-Stokes et de l'énergie sont choisis pour que lors d'une itération en temps, 1.10^{-4} seconde se déroule physiquement. La figure (6.9) précise toutes les informations précédentes de manière synthétique.

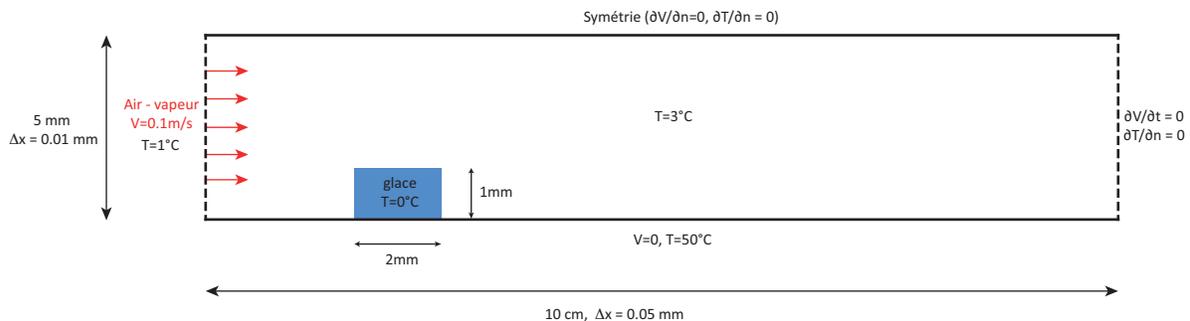


FIGURE 6.9 – Domaine initial d'étude du changement de phase d'un bloc de glace sur une plaque chaude en présence d'un écoulement latéral de vapeur chaude.

Ces cas d'étude n'ont pu être réalisés au cours de la thèse, néanmoins ils pourront servir de base pour mettre en avant les processus de transferts thermiques et massiques sur une ailette de PAC. La géométrie réelle d'une batterie d'échangeur de chaleur d'une PAC étant complexe, il conviendra enfin de réaliser une étude 3D d'un tel échangeur.

Conclusions et Perspectives

Le travail présenté dans ce manuscrit s'inscrit dans une recherche plus globale d'optimisation des systèmes de pompe à chaleur de type aérothermique. Les travaux de recherches, réalisés dans le laboratoire I2M-TREFLE (Transfert et Ecoulements de FLuides Energétiques, département appartenant à l'Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux, I2M) ont eu pour but de déterminer des conditions optimales de drainage des flux hydriques dans les échangeurs extérieurs de ces systèmes, afin d'optimiser la stratégie de réduction de perte énergétiques induites par le givrage/dégivrage des échangeurs. Plusieurs changements de stratégies ont été entrepris au cours de ces travaux, notamment une orientation plus marquée de la problématique vers le dégivrage.

Ainsi, une grande partie des études réalisées porte sur la détermination de propriétés surfaciques intéressantes pour assurer une évacuation efficace et contrôlée des volumes liquides issus du dégivrage d'une ailette (ou d'une doublette d'ailettes se faisant face). Les différents axes de cette recherche nous ont conduit à mettre en place une méthode numérique permettant de prédire des effets de mouillabilité à petite échelle, avec en entrée le moins de paramètres à fixer afin de créer un outil simple et efficace. Ce modèle est, contrairement aux autres modèles disponibles, basé sur l'unique lecture de l'angle de contact apparent statique que fait le liquide avec une surface solide plane. D'autres modèles sont pour la plupart axés sur l'imposition des angles de contact dynamiques de déplacement et donc avec un champs de validité plus restreint. Ce travail a été réalisé avec le code de calcul Thétis développé au sein du même laboratoire.

La stratégie de modélisation est basée sur un modèle de domaines fictifs. Elle s'appuie sur une modélisation fine des comportements diphasiques via une méthode de lissage contrôlée Smooth-VOF, sur laquelle vient se connecter le modèle de mouillage. La simulation s'opère via une résolution des équations de Navier-Stokes incompressible. Plusieurs cas de validation aussi bien des méthodes numériques que des résultats physiques ont été réalisés en confrontant avec expériences et théorie. Par la suite, l'utilisation de ces approches a été réalisée sur des configurations académiques classiques ou plus exotiques, comme la superhydrophobie. La transition entre les états Cassie-Baxter et Wenzel a pu être mise en évidence avec de l'eau, en fonction de paramètres comme l'écartement entre les picots constituant la surface, mais aussi a pu mettre en évidence des différences soit avec le modèle, soit avec les expériences portant sur un liquide plus visqueux, une huile de paraffine. Les confrontations concernant cette étude ont été réalisées

avec les expériences menées par l'équipe du Professeur Patrik Hoffmann, du laboratoire EMPA en Suisse, qui nous a fait part de mesures originales.

Nous avons aussi étudié la dynamique de ponts liquides dans des configurations assez exotiques, notamment sous l'influence d'écoulement d'air latéraux. Cette configuration est sensée représenter de possibles situations apparaissant dans des échangeurs de pompe à chaleur, notamment lors du dégivrage. Ainsi, nous avons pu mettre en évidence que la propriété de mouillage possède assez peu d'influence sur la manière dont les ponts liquides vont se déplacer, trajectoire fortement impactée par la compétition entre les forces de gravité et de l'écoulement latéral. Par contre, la vitesse et la forme de ces volumes liquides sont nettement influencées par les paramètres de surface, notamment pour des surfaces mouillantes qui auront tendance à provoquer une rupture par succion du volume sur les plaques. Enfin, des comportements à l'échelle locale ont été étudiés. La dynamique interne d'un pont se déplaçant entre deux plaques verticales a ainsi pu être mise en évidence.

Toutes ces informations doivent servir de base de réflexion sur l'approche à mettre en place pour assurer une bonne évacuation de l'eau liquide lors du dégivrage, afin de réduire le temps qui lui est nécessaire. D'autres configurations, non évoquées dans ce manuscrit, ont été développées, notamment basées sur le maintien d'un film liquide fin à la surface des ailettes, afin de drainer efficacement l'eau et les blocs de givre. La manière de créer ces films n'a pas été détaillée dans ce document, pour des raisons de propriétés intellectuelles et industrielles.

Le second aspect important est donc le changement de phase, notamment le dégivrage et le givrage. La problématique initiale était de réaliser un cycle complet de fonctionnement d'un échangeur concernant les échanges hydriques, à savoir l'eau se condensant et givrant et l'eau s'évacuant. Il était nécessaire de mettre en place une méthode efficace afin de réduire les coûts de calculs pour traiter des géométries industrielles complexes. Les premières approches ont pu être menées sur le code de calcul Thétis, en utilisant les méthodes déjà en place à savoir la méthode de Voller [Vol90]. Cette méthode, à la base développée pour réaliser le changement de phase d'alliages, s'est montrée inadaptée à notre problématique, du fait notamment des rapports assez élevés de masses volumiques entre les différents états. Le givre est un milieu assez complexe, du fait de son incroyable possibilité d'évolution au cours du changement de phase (densification, porosité interne...).

Nous avons voulu pour répondre à ce problème, mettre en place une méthode originale, basée sur la résolution locale (à l'échelle des volumes élémentaires de contrôle) de problèmes de Stefan à masse volumique variable, afin d'obtenir la vitesse locale du déplacement du front de changement de phase. Cette vitesse sert par la suite à advecter via une méthode de type Volume Of Fluid (PLIC ici) le front de manière adaptée aux conditions locales, avec une vision globale. Nous avons pu valider cette nouvelle méthode sur des configurations académiques simples, en 1D comme en multi dimensions. De plus, une étude portant sur l'évolution d'un bloc de glace

dans un écoulement latéral d'air chaud a été menée. Cette étude servira de base de réflexion à de futurs travaux sur la stratégie à suivre pour l'évacuation de tels objets.

Le changement de phase, via l'approche présentée ici, est encore un enjeu majeur à poursuivre par la suite, de nombreuses ouvertures concernant les lois d'états et de comportements sont proposées tout au long de ce mémoire, afin notamment d'approcher le givre pur. L'aspect densification du givre, via les processus de fonte/resolidification, l'aspect poreux, via les écoulements de vapeur intra couche sont autant de défis qu'ils restent à mettre en place. Enfin, mettre en place une vraie approche pour la condensation solide / évaporation, en prenant en compte les phénomènes de surpression/sursaturation aux interfaces, via des méthodes de type IM (interface immergée), pourra être l'élément final pour compléter réellement cette étude.

Annexe A

Choix d'une relation entre C_∞ et l'angle de contact apparent

(Travail réalisée par Jérémy Leboi, Frédéric Sarret (thèse) et Louiza Benazzouk (thèse), février 2012)

A.1 Objectifs

L'étude réalisée permet de déterminer une relation optimale entre l'angle de contact statique qu'un utilisateur indique dans le fichier de données et la valeur qui sera pénalisée pour la fonction Smooth-VOF (SVOF) sur les limites et obstacles souhaités.

Différentes relations existent actuellement dans le code de calcul Thétis. Ces expressions montrent des comportements différents et un choix doit donc être effectué en veillant à respecter des facteurs d'erreurs raisonnables entre l'angle de contact apparent mesuré à équilibre et l'angle de contact statique souhaité.

Nous avons fait deux études complémentaires, afin d'une part de comparer les lois existantes et de choisir l'une d'entre-elles et d'autre part de déterminer une relation fiable à partir d'expériences numériques. Pour cela nous proposons de tester ces relations sur deux configurations pour un nombre de Bond égal à 10^{-1} ou 10^{-4} .

A.2 Description des cas

A.2.1 Configurations initiales

L'étude porte sur l'étalement d'une goutte soumise à son propre poids sur une paroi dans de l'air. Le liquide utilisé pour les expériences est de l'eau dont la viscosité a été augmentée afin de limiter les instabilités et accélérer la mise en équilibre.

Propriétés du liquide utilisé :

- masse volumique, $\rho = 1 \text{ kg.m}^{-3}$
-

- viscosité dynamique, $\mu = 10^{-2} Pa.s$ (cas $Bo = 10^{-1}$) et $\mu = 10 Pa.s$ (cas $Bo = 10^{-4}$)
- tension de surface eau/air, $\sigma = 0,072 N.m^{-1}$

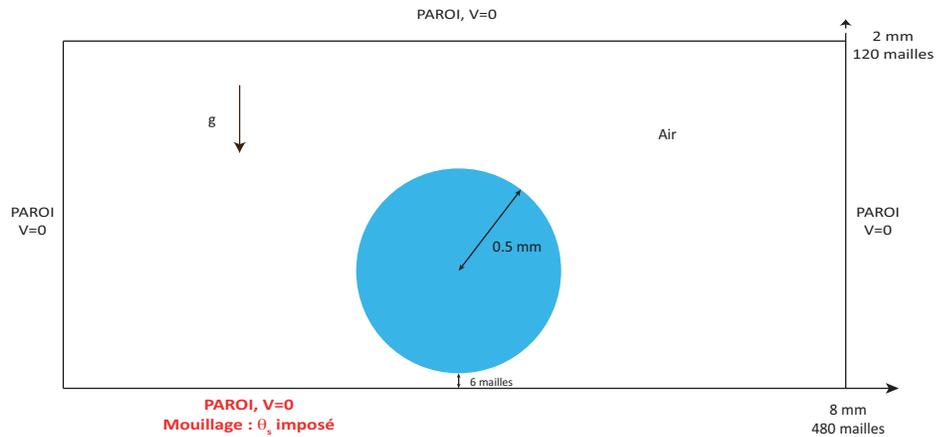


FIGURE A.1 – Configuration initiale pour l'étude des relations existantes, $Bo = 10^{-1}$.

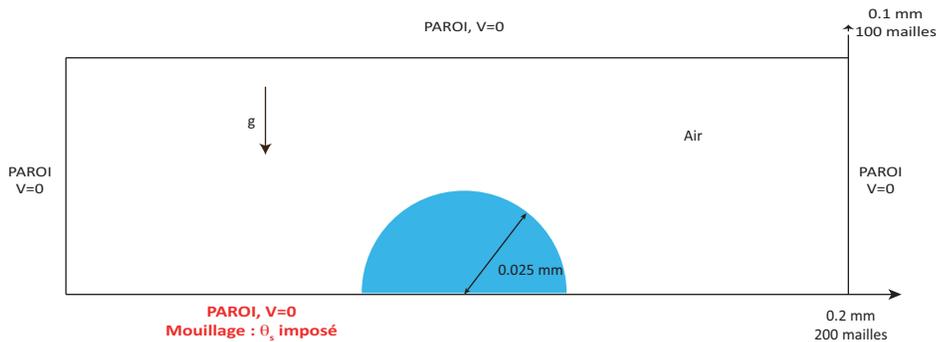


FIGURE A.2 – Configuration initiale pour l'étude des relations existantes, $Bo = 10^{-4}$.

A.2.2 Paramètres numériques

Le domaine est discrétisé par un maillage cartésien régulier, en 2D. Le pas d'espace a été choisi de façon à respecter un rapport de 30 mailles par rayon de goutte. Les relations existantes agissent en pénalisant la variable de phase régularisée Smooth-VOF, utilisée afin d'améliorer le calcul de la courbure de l'interface, intervenant dans le terme de tension de surface issu du modèle de Brackbill [BKZ92].

Le pas de temps a été fixé à $10^{-5} s$ afin de respecter le critère de stabilité CFL de 10^{-1} .

A.3 Résultats

A.3.1 Lois existantes

Actuellement, ils existent quatre relations dans le code Thétis pour imposer le mouillage. Ces relations fonctionnent de la même façon à savoir que l'utilisateur spécifie dans le fichier de données l'angle de contact statique qu'il souhaite obtenir afin qu'un paramètre numérique soit imposé. Cette méthode permet d'obtenir une dynamique de l'angle de contact au cours de l'étalement jusqu'à obtenir à l'état stationnaire l'angle de contact statique apparent renseigné par l'utilisateur.

Relation bilinéaire :

$$C_{\infty} = \begin{cases} \frac{286 - \theta_s}{286} & \text{si } 0 \leq \theta_s < 128 \\ \frac{170 - \theta_s}{75} & \text{si } 128 \leq \theta_s < 170 \\ 0 & \text{si } 170 \leq \theta_s \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Relation cubique :

$$C_{\infty} = \begin{cases} 1 & \text{si } 0 \leq \theta_s < 15 \\ 7,79 \cdot 10^{-7} \theta_s^3 - 1,89 \cdot 10^{-4} \theta_s^2 + 4,51 \cdot 10^{-3} \theta_s + 9,49 \cdot 10^{-1} & \text{si } 15 \leq \theta_s \leq 150 \\ 0 & \text{si } 150 \leq \theta_s \leq 180 \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Relation tangente hyperbolique :

$$C_{\infty} = \begin{cases} 1 & \text{si } 0 \leq \theta_s < 10 \\ 0,5(-\tanh(0,025(\theta_s - 90)) + 1) & \text{si } 10 \leq \theta_s \leq 170 \\ 0 & \text{si } 170 \leq \theta_s \leq 180 \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Relation polynomiale par morceaux :

$$C_{\infty} = \begin{cases} -4,8 \cdot 10^{-3} \theta_s + 1 & \text{si } 0 \leq \theta_s < 45 \\ -8,2 \cdot 10^{-3} \theta_s + 1,1908 & \text{si } 45 \leq \theta_s \leq 95 \\ 8,10^{-5} \theta_s^2 - 2,65 \cdot 10^{-2} \theta_s + 2,2 & \text{si } 95 < \theta_s \leq 170 \\ 0 & \text{si } 170 \leq \theta_s \leq 180 \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Nous avons testé ces quatre relations dans une configuration où le nombre de Bond vaut 10^{-1} . La mesure de l'angle de contact a été réalisée via le logiciel *ImageJ* et du contenu additionnel (plugin) *Drop_Analysis* développé par l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne. Il permet une mesure semi-automatique des angles de contact à partir d'une photographie de goutte. Cet outil étant utilisé sur des clichés expérimentaux présentant la goutte et son reflet, il sera donc nécessaire de réaliser le reflet de la goutte obtenue par Thétis avant de soumettre l'image au format JPEG à l'analyse semi-automatique d'*ImageJ*.

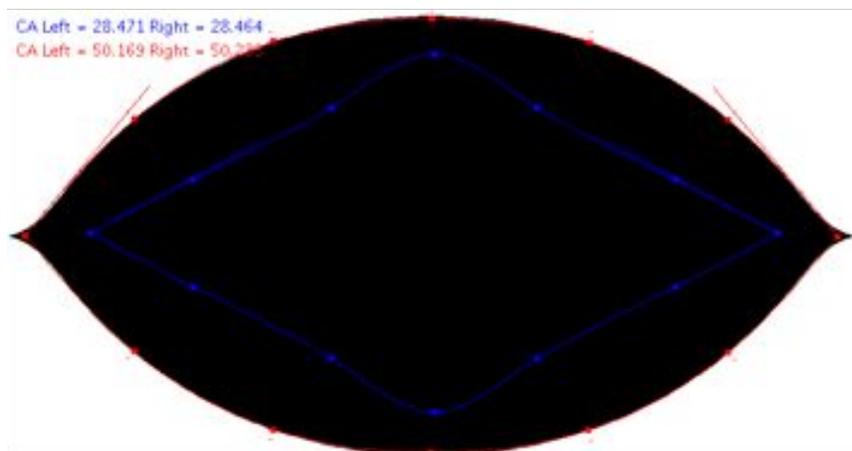


FIGURE A.3 – *ImageJ* - mesure automatique de l'angle de contact (en rouge), $Bo = 10^{-1}$, $C_\infty = 0,7$.

		tanh		cubique		bi-linéaire		pol. morc.	
θ_s	θ_m	err. abs.	θ_m	err. abs.	θ_m	err. abs.	θ_m	err. abs.	
10,00	4,71	5,29		10,00	7,50	2,51	6,17	3,83	
30,00	5,94	24,06	9,84	20,16	17,06	12,94	25,51	4,49	
70,00	41,97	28,03	59,81	10,19	39,02	30,98	58,33	11,67	
100,00	101,80	1,80	102,86	2,85	51,46	48,54	102,35	2,35	
140,00	140,48	0,47	144,56	4,56	93,79	46,21	136,46	3,54	
170,00	171,71	1,71	172,52	2,52	174,90	4,90	170,09	0,09	
moyenne		10,23		8,38		24,35		4,33	
écart type		12,42		6,70		20,46		3,91	

TABLE A.1 – Comparaison des relations tanh, cubique, bi-linéaire et polynomiale par morceaux pour $Bo = 10^{-1}$.

Les résultats obtenus montrent que la loi polynomiale par morceaux est la plus adaptée au cas d'une goutte d'eau avec un nombre de Bond de 10^{-1} . L'inconvénient de cette loi est sa discontinuité. Il serait préférable d'utiliser une loi continue sur tout le domaine 0° à 180° .

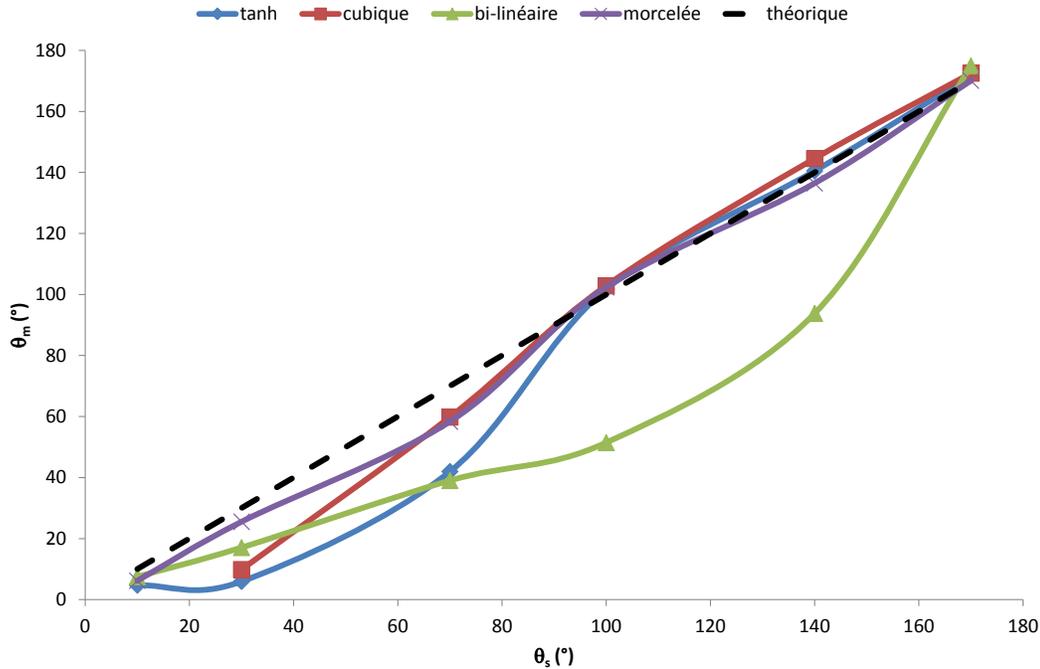


FIGURE A.4 – Angle mesuré en fonction de l’angle statique imposé, $Bo = 10^{-1}$.

A.3.2 Détermination d’une loi continue

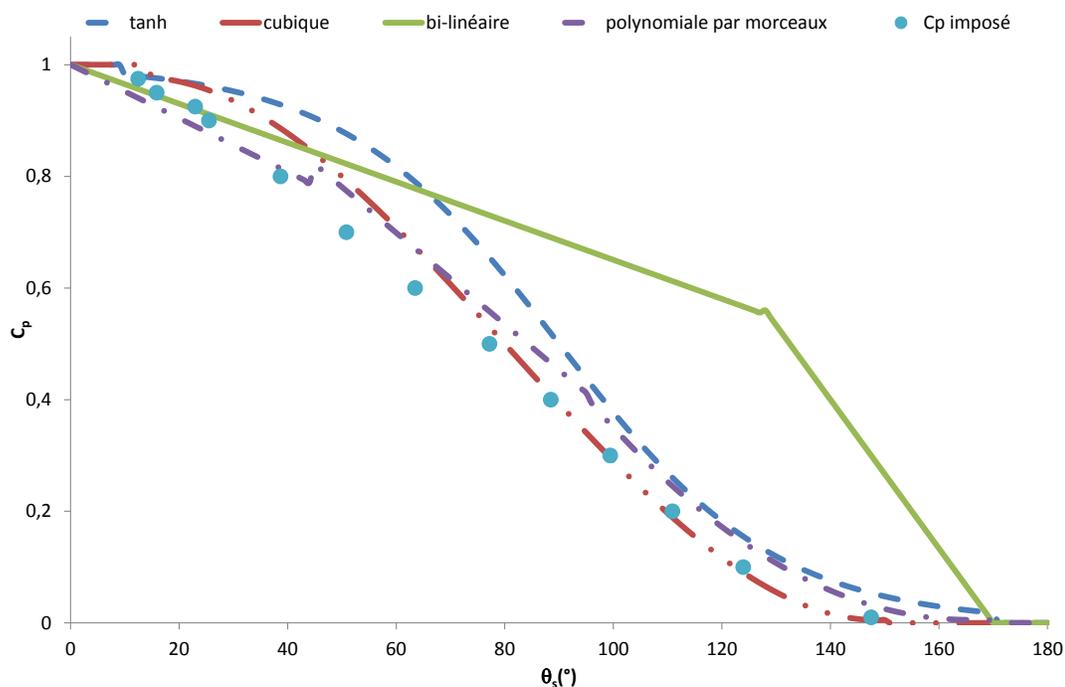
En reprenant le cas précédent, nous avons choisi de déterminer une nouvelle relation en faisant varier C_∞ de 0 à 1. Nous avons ensuite mesuré l’angle statique apparent θ_m avec la méthode *ImageJ* décrite précédemment.

Nous constatons, sur la figure (A.5), l’écart parfois assez marqué entre les points de mesure et les relations existantes. De ces mesures une somme de fonctions gaussiennes a été déduite, équation A.5.

$$C_\infty = 0,9944 \exp\left(-\left(\frac{(\theta_s - 1,237)}{68,47}\right)^2\right) + 0,2122 \exp\left(-\left(\frac{(\theta_s - 81,81)}{38,11}\right)^2\right) \quad (\text{A.5})$$

Pour un nombre de Bond de 10^{-4} et des angles de contact imposés à $\{10,30,50,70,100,140,170\}$ la comparaison entre la relation gaussienne et polynomiale par morceaux a été réalisée. La mesure des angles statiques montre que la relation gaussienne présente une erreur absolue moyenne plus faible de 32% ainsi qu’un écart type plus faible de 71%.

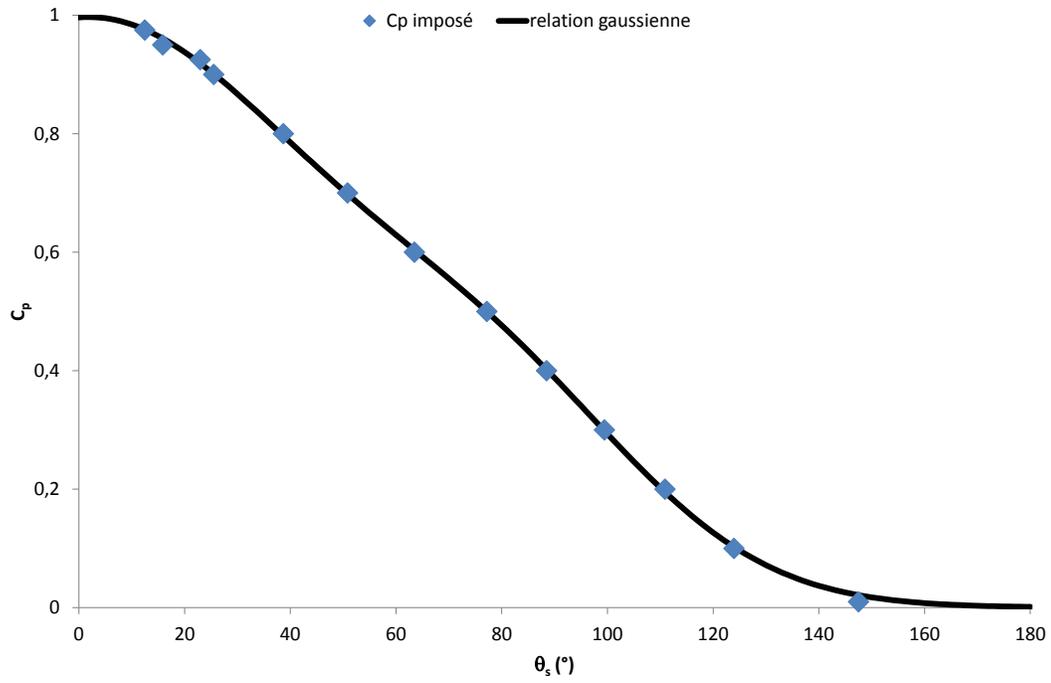
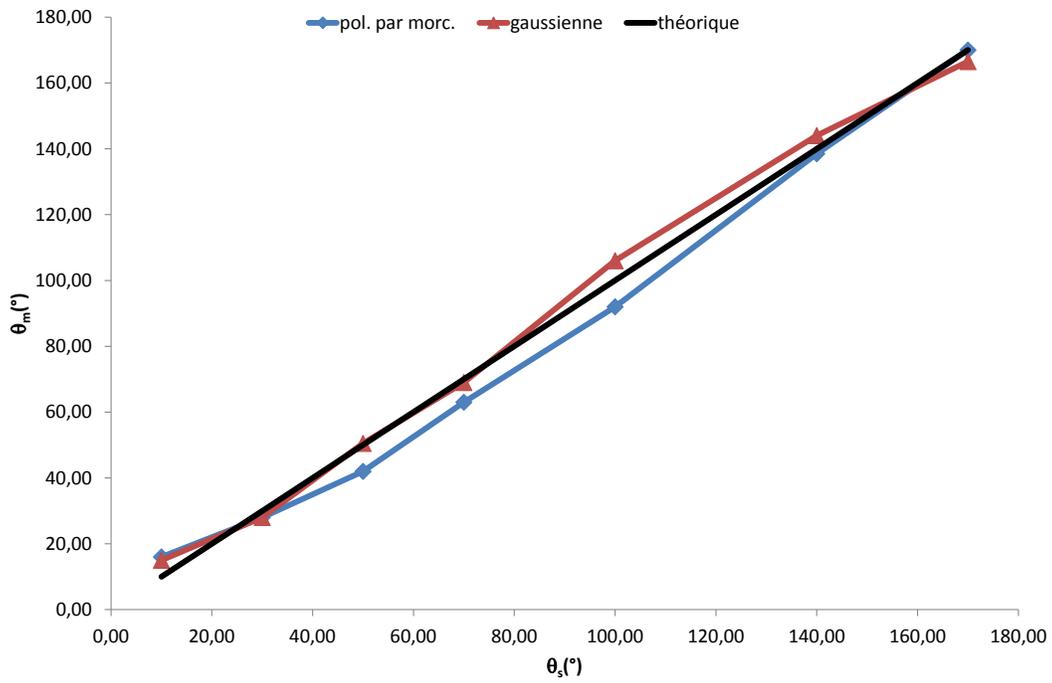
NB : les remarques précédentes ne remettent pas en cause les résultats précédemment évoqués dans ce manuscrit, réalisés via la relation "cubique". Il convient toutefois de les mettre en relief vis-à-vis du choix de la relation liant le paramètre de pénalisation de la fonction SVOF et l’angle de contact statique désiré. Le choix de la relation, ainsi que sa régression à partir des points issus d’expériences numériques, sont toujours empiriques. Le contrôle de la diffusion de la régularisation

FIGURE A.5 – Courbes des relations disponibles et points mesurés avec C_∞ imposé, $Bo = 10^{-1}$.

gaussienne			polynomiale par morceaux	
θ_s	θ_m	err. abs.	θ_m	err. abs.
10,00	15,00	5,00	16,00	6,00
30,00	28,00	2,00	28,00	2,00
50,00	50,50	0,50	42,00	8,00
70,00	69,00	1,00	63,00	7,00
100,00	106,00	6,00	92,00	8,00
140,00	144,00	4,00	138,50	1,50
170,00	166,50	3,50	170,00	0,00
écart type		1,06		3,64
erreur moyenne		3,14		4,64

TABLE A.2 – Comparaison des relations gaussienne et polynomiale par morceaux, pour $Bo = 10^{-4}$.

SVOF peut entraîner un décalage entre les mesures présentées ici et celles que l'utilisateur pourrait être amené à faire.

FIGURE A.6 – Angle mesuré et courbe équation (A.5), $Bo = 10^{-1}$.FIGURE A.7 – Comparaison lois gaussienne et polynomiale par morceaux, $Bo = 10^{-1}$.

Bibliographie

- [Ame00] P. Amestoy. Multifrontal parallel distributed symmetric and unsymmetric solvers. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 184(2-4) :501–520, April 2000.
- [Bar06] L. Barbieri. *Wetting properties of flat-top periodically structured superhydrophobic surfaces*. PhD thesis, Ecole Polytechnique fédérale de Lausanne, EPFL, November 2006.
- [BC01] J. Breil and J.-P. Caltagirone. Three dimensional computer simulation of mould filling with n fluids by vof plic and projection methods. *ICCFD*, pages 743–748, 2001.
- [Ber99] O. Bertrand. *Phénomènes de ségrégation et contraintes thermo-mécaniques associés au processus de changement de phase liquide-solide*. PhD thesis, Bordeaux I, 1999.
- [BKZ92] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2) :335–354, 1992.
- [Bla06] T.D. Blake. The physics of moving wetting lines. *Journal of Colloid and Interface Science*, (299) :1–13, 2006.
- [BM07] T. Bonometti and J. Magnaudet. An interface-capturing method for incompressible two-phase flows. validation and application to bubble dynamics. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(2) :109–133, 2007.
- [BQ01] J. Bico and D. Quéré. Falling slugs. *Journal of Colloid and Interface Science*, 243 :262–264, 2001.
- [BTQ02] J. Bico, U. Thiele, and D. Quéré. Wetting of textured surfaces. *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects*, 206(1-3) :41–46, 2002.
- [Cal10] J.-P. Caltagirone. Physique des écoulements continus, septembre 2010.
- [Car11] C. Caruyer. *Modélisation de nanomatériaux injectés par voie liquide dans un jet de plasma pour la fabrication de nanostructures*. PhD thesis, Université de Bordeaux - EDSPI spécialité mécanique, octobre 2011.
-

-
- [Cas58] A.B.D Cassie. Contact angles. *Discussions of the Faraday Society*, 3 :11–15, 1958.
- [Del90] D. Delaunay. *transferts de chaleur par conduction associés à un changement de phase*. 1990.
- [dG85] P. G. de Gennes. Wetting : statics and dynamics. *Reviews of Modern Physics*, 57 :827–863, Jul 1985.
- [DL10] J.-B. Dupont and D. Legendre. Numerical simulation of static and sliding drop with contact angle hysteresis. *Journal of Computational Physics*, (229) :2453–2478, 2010.
- [Dus79] E.-B. Dussan. On the spreading of liquids on solid surfaces : Static and dynamic contact lines. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 11(1) :371–400, 1979.
- [Gar80] D.K. Gartling. Finite elements analysis of convective heat transfer problems with phase change. *Computer Methods and Fluids*, 1980.
- [GF05] F. Gibou and R. Fedkiw. A fourth order accurate discretization for the laplace and heat equations on arbitrary domains, with applications to the stefan problem. *Journal of Computational Physics*, 202(2) :577–601, 2005.
- [GGJ97] R. Le Gall, J. M. Grillot, and C. Jallut. Modelling of frost growth and densification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(13) :3177–3187, September 1997.
- [GHP91] E. Guyon, J-P. Hulin, and L. Petit. *Hydrodynamique physique*. Savoirs Actuels, 1991.
- [Gui10] R. Guillaument. *Modélisation des problèmes de lubrification et d’écoulements polyphasiques dans un procédé de laminage*. PhD thesis, Université de Bordeaux - spécialité mécanique, 2010.
- [Gus78] I. Gustafsson. On first and second order symmetric factorization methods for the solution of elliptic difference equations. *Research report, Department of Computer Sciences, Chalmers University of Technology and the University of Gøteborg*, 1978.
- [HAAH77] Y. Hayashi, A. Aoki, S. Adachi, and K. Hori. Study of frost properties correlating with frost formation types. *Journal of Heat Transfer*, 99(2) :239–245, 1977.
- [Hen] Broch Henri. Mécanique des fluides - cours de physique.
- [HF07] A.Y. Tong H. Fujimoto, Y. Shiotani. Three dimensional numerical analysis of the deformation behavior of droplets impinging a solid substrate. *International Journal of Multiphase Flow*, 33 :317–332, 2007.
- [Hof75] R. Hoffman. *Journal of Colloid and Interface Science*, 50 :228, 1975.
-

-
- [HS71] C. Huh and L.E. Scriven. Hydrodynamic model of steady movement of a solid/fluid contact line. *Journal of Colloid and Interface Science*, (35) :85, 1971.
- [JdG84] J. F. Joanny and P. G. de Gennes. A model for contact angle hysteresis. *The Journal of Chemical Physics*, 81(1) :552–562, 1984.
- [KAPC00] K. Khadra, P. Angot, S. Parneix, and J.-P. Caltagirone. Fictitious domain approach for numerical modelling of Navier-Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 34(8) :651–684, 2000.
- [Kat86] I. Kataoka. Local instant formulation of two-phase flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(5) :745–758, 1986.
- [KF86] W. Kurz and D.J. Fisher. *Fondamental of Solidification*. Trans. Tech. Publications, 1986.
- [Koz27] J. Kozeny. Ueber kapillare leitung des wassers im boden. *Sizunsber Akad. Wiss., Wien*, 136(2a) :271–306, 1927.
- [LB00] A. Lüer and H. Beer. Frost deposition in a parallel plate channel under laminar flow conditions. *International Journal of Thermal Sciences*, 39(1) :85–95, 2000.
- [LBH07] E. Wagner L. Barbieri and P. Hoffmann. Water wetting transition parameters of perfluorinated substrates with periodically distributed flat-top microscale obstacles. *Langmuir*, 23(23) :1723–1734, March 2007.
- [LJBM07] D. Legendre, J.-B. Dupont, and A.-M. Morgante. Simulation numérique de l’hystéresis du mouillage d’une goutte sur une paroi. 18ème Congrès Français de Mécanique (Grenoble 2007), AFM, 2007.
- [LL94] L. Landau and E. Lifchitz. *Mécanique des fluides*. Ellipses, 1994.
- [LNS⁺94] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modeling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. *Journal of Computational Physics*, 113 :134–147, 1994.
- [LTF08] K. Lenic, A. Trp, and B. Frankovic. Transient two-dimensional model of frost formation on a fin-and-tube heat exchanger. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, In Press, Corrected Proof, 2008.
- [Mau08] A. Maunoury. *Simulations numériques de l’ascension d’une particule évolutive sous l’effet du changement d’état liquide-solide*. PhD thesis, Université de Bordeaux - EDSPI spécialité mécanique, 2008.
- [MS09] S. Manservigi and R. Scardovelli. A variational approach to the contact angle dynamics of spreading droplets. *Computers & Fluids*, 38(2) :406–424, February 2009.
-

-
- [MYO98] Munson, Young, and Okiishi. *Fundamentals of Fluid Mechanics*. John Wiley and Sons, 1998.
- [NW04a] B. Na and R.-L. Webb. Mass transfer on and within a frost layer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(5) :899–911, February 2004.
- [NW04b] B. Na and R.-L. Webb. New model for frost growth rate. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(5) :925–936, February 2004.
- [OS88] S. Osher and J.-A. Sethian. Front propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on hmlton-jacobi fomulations. *Journal of Computational Physics*, 79 :12–49, 1988.
- [Pat80] S. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Pub. Corp., 1980.
- [Pop09] S. Popinet. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *Journal of Computational Physics*, 228 :5838–5866, 2009.
- [PVL⁺10] G. Pianet, S. Vincent, J. Leboi, J.-P. Caltagirone, and M. Anderhuber. Simulating compressible gas bubbles with a smooth volume tracking 1-fluid method. *Journal of Multiphase Flow*, (36) :273–283, 2010.
- [Qué02] D. Quéré. Rough ideas on wetting. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 313(1-2) :32–46, October 2002.
- [Qué03] D. Quéré. Lois du mouillage et de l'imprégnation. Techniques de l'Ingénieur J2140, CNRS, Physique de la matière condensée - Collège de France, 2003.
- [ROT⁺08] I.V. Roisman, L. Opfer, C. Tropea, M. Raessi, J. Mostaghimi, and S. Chandra. Drop impact onto a dry surface : Role of the dynamic contact angle. *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects*, 322(1-3) :183–191, 2008.
- [Sau63] V.K. Saul'ev. On the solution of some boundary value problems on high performance computers by fictitious domain method. *Siberian Math. Journal*, 4 :912–925, 1963.
- [SH09] F. Schonfeld and S. Hardt. Dynamic contact angles in CFD simulations. *Computers & Fluids*, 38(4) :757–764, April 2009.
- [SJ02] S. Shin and D. Juric. Modeling Three-Dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics*, 180(2) :427–470, August 2002.
- [Spe05] P.D.M. Spelt. A level-set approach for simulations of flows with multiple moving contact lines with hysteresis. *Journal of Computational Physics*, (207) :385–404, 2005.
-

-
- [SZ99] R. Scardovelli and S. Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31(1) :567–603, 1999.
- [TBE⁺01] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.-J. Jan. A Front-Tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2) :708–759, May 2001.
- [Til91] W.A. Tiller. *Microscopic interfacial phenomena, The Science of Crystallization*. Cambridge University Press, 1991.
- [TVEC08] P. Trontin, S. Vincent, J.-L. Estivalezes, and J.-P. Caltagirone. Detailed comparisons of front-capturing methods for turbulent two-phase flow simulations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56 :1543–1549, 2008.
- [UT92] S.O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100(1) :25–37, 1992.
- [VC99] S. Vincent and J.-P. Caltagirone. Efficient solving method for unsteady incompressible interfacial flow problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30(6) :795–811, 1999.
- [VC00] S. Vincent and J.-P. Caltagirone. One cell local multigrid method for solving unsteady incompressible multi-phase flows. *Journal of Computational Physics*, (163) :172–215, 2000.
- [VCLR04] S. Vincent, J.-P. Caltagirone, P. Lubin, and T.N. Randrianarivelo. An adaptive augmented lagrangian method for three-dimensional multimaterial flows. *Computers & Fluids*, 33(10) :1273–1289, 2004.
- [VLL⁺07] S. Vincent, J. Larocque, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, and P. Sagaut. Numerical simulation of phase separation and a priori two-phase les filtering. *Computers & Fluids*, 2007.
- [Vol87] V. R. Voller. An implicit enthalpy solution for phase change problems : with application to a binary alloy solidification. *Applied Mathematical Modelling*, 11(2) :110–116, April 1987.
- [Vol90] V. R Voller. Fast implicit finite-difference method for the analysis of phase change problems. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals : An International Journal of Computation and Methodology*, 17(2) :155 – 169, 1990.
- [VS95] V. R. Voller and Suresh Sundarraaj. A model of inverse segregation : the role of microporosity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(6) :1009–1018, April 1995.
-

- [VSC⁺10] S. Vincent, A. Sarthou, J.-P. Caltagirone, F. Sonilhac, P. Février, C. Mignot, and G. Pianet. Augmented lagrangian and penalty methods for the simulation of two phase flows interacting with moving solids. application to hydroplaning flows interacting with real tire tread patterns. *Journal of Computational Physics*, 2010.
- [Wen36] R.N. Wenzel. Resistance of solid surfaces to wetting by water. *Industrial Engineer Chemistry*, 28 :988, 1936.
- [WR09] G. Wang and A.P. Rothmayer. Thin water films driven by air shear stress through roughness. *Computers & Fluids*, 38(2) :235–246, February 2009.
- [YMB82] D.L. Youngs, K.W. Morton, and M.J. Baines. Time-dependent multimaterial flow with large fluid distortion. *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Academic Press, New-York, 1982.
-