

# Modélisations d'interfaces

*Roger Prud'homme*

*Institut D'Alembert - UMR 7190 – CNRS/UPMC - Paris*

## RÉSUMÉ

La modélisation analytique des interfaces consiste à établir pour celles-ci un système d'équations aux dérivées partielles complet, avec conditions de fermeture, par **passage d'une description en couche interfaciale tridimensionnelle à une description en surface (interface)**.

La donnée de conditions aux limites et de conditions initiales doit en principe permettre la résolution, analytique ou numérique, du système et d'accéder ainsi au comportement mécanique et thermodynamique des interfaces. La méthode de résolution dépend beaucoup du type d'interface considéré et les situations rencontrées sont très variées.

## GÉNÉRALITÉS

Les exemples donnés dans les figures suivantes illustrent d'une certaine façon la variété des situations pouvant laisser à penser que l'on se trouve en présence d'interfaces.

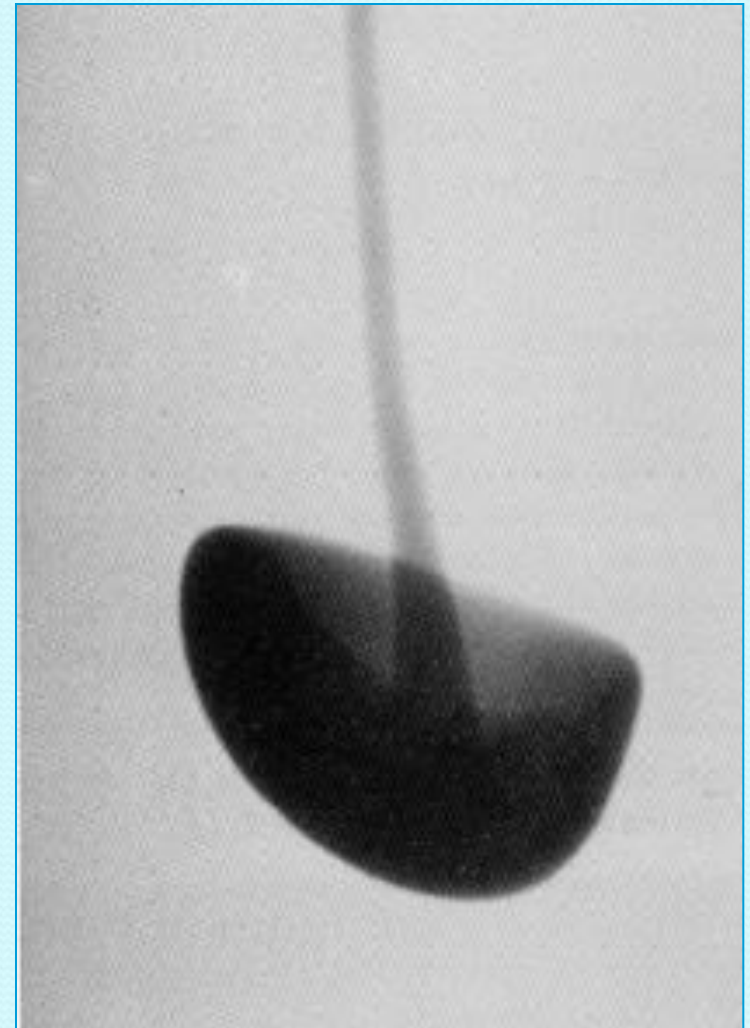
Il y a bien sûr le cas bien établi d'un liquide au repos ou en mouvement en présence d'un autre fluide ou de sa propre vapeur.

Mais il est bien d'autres cas.

# I. Goutte thermique

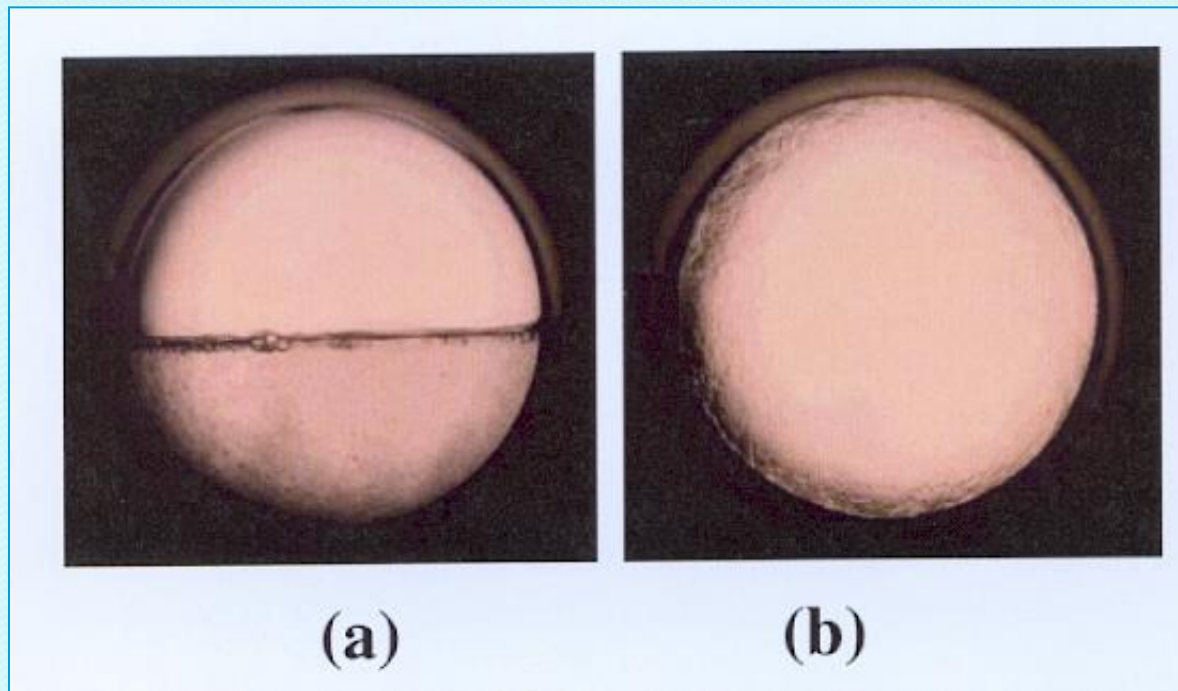
Zone plus froide qui se distingue de l'ensemble du liquide et dont la limite ressemble à une surface capillaire

Kojima M., Hinch E. J., Acrivos A., 1984, "The formation and expansion of a toroidal drop moving in a viscous fluid", *Phys. Fluids*, 27 (1), pp. 19-32.



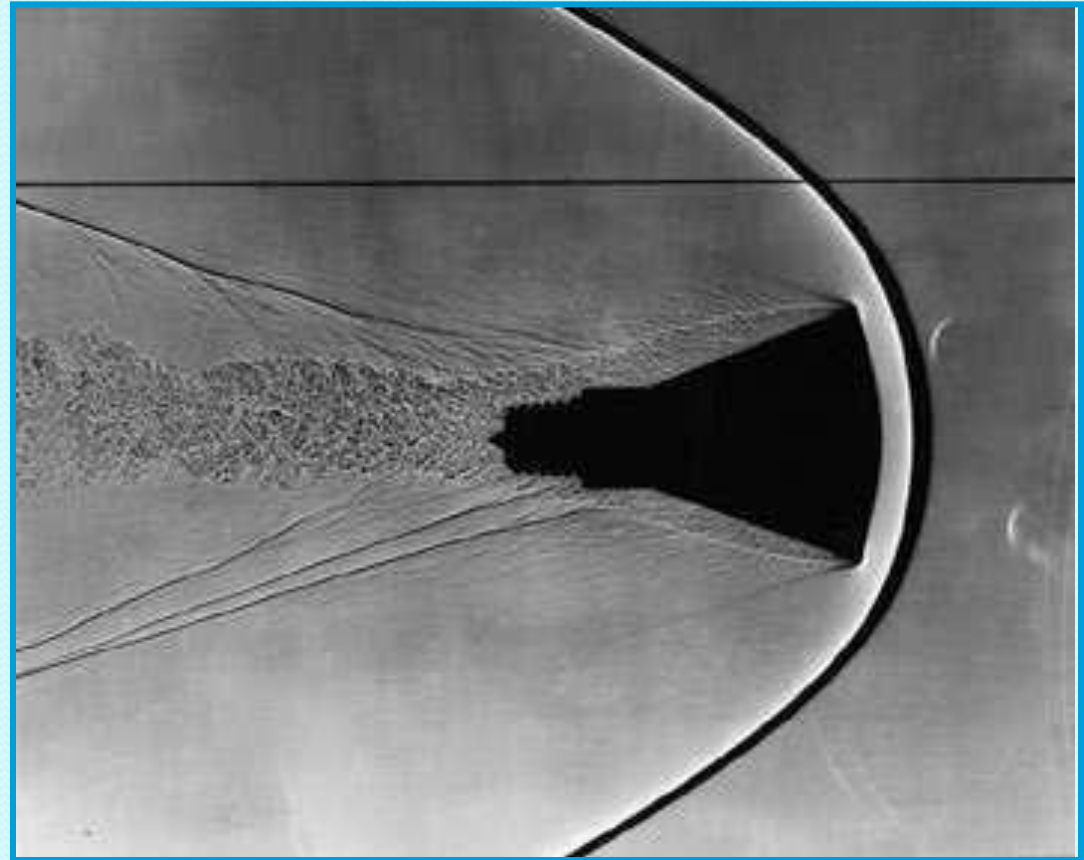
## II. De l'état subcritique à l'état supercritique

Fluide pur dans un récipient de volume constant, d'abord avec deux phases séparées par une surface capillaire. Dans un deuxième temps la surface de séparation a disparu suite à une légère augmentation de température, car on se trouve alors en régime supercritique. C.M.Rayner et al., University of Leeds, UK.



### III. Onde de choc

Une onde de choc (ici détachée devant un corps de rentrée), onde de discontinuité à l'échelle macroscopique, peut aussi être considérée comme une interface.



## IV. Flamme de prémélange

Cette flamme de prémélange méthane/air s'épaissit sous l'effet d'une diminution de la pression, laissant voir distinctement quatre zones : gaz frais, zone de diffusion, zone réactive et gaz brûlés. Visualisation par plan laser, ensemencement par gouttelettes d'huile.

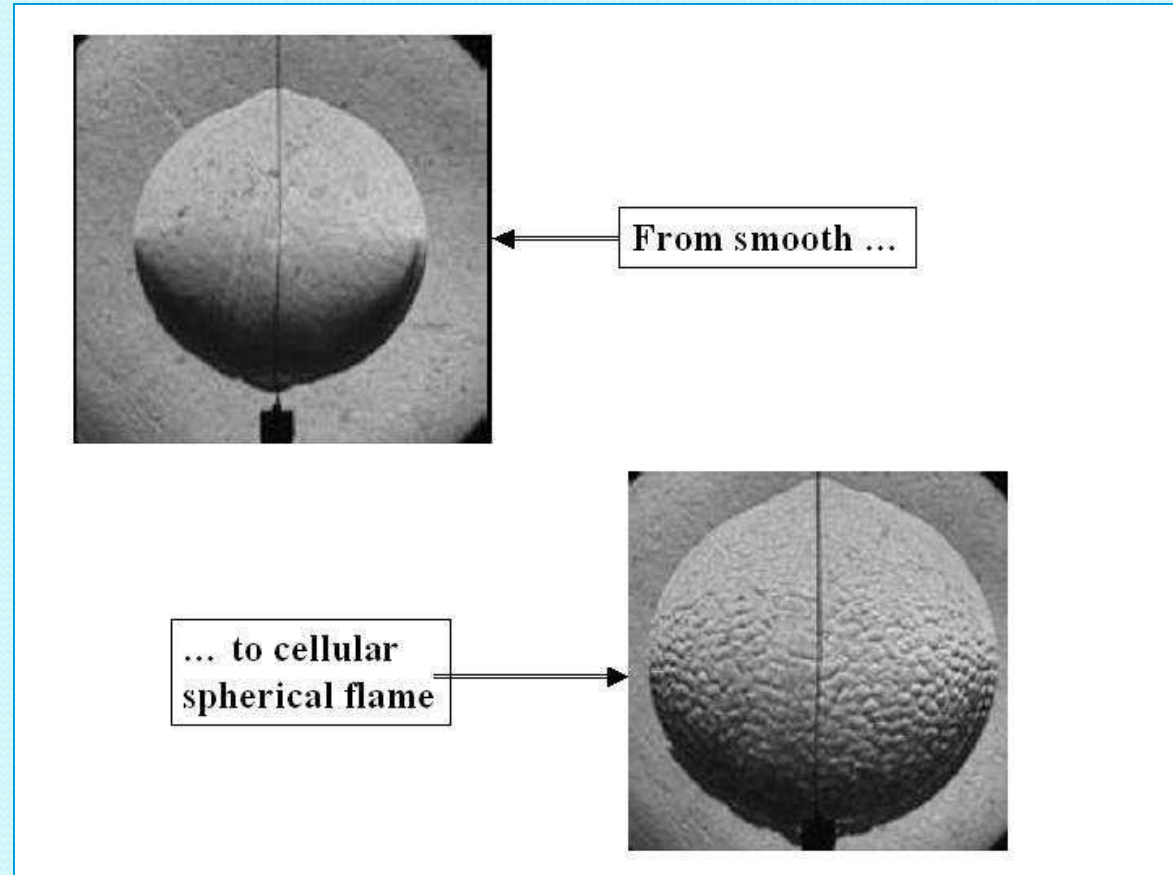
Photo Laboratoire d'Aérothermique du CNRS, 1985.



## V. Flamme sphérique

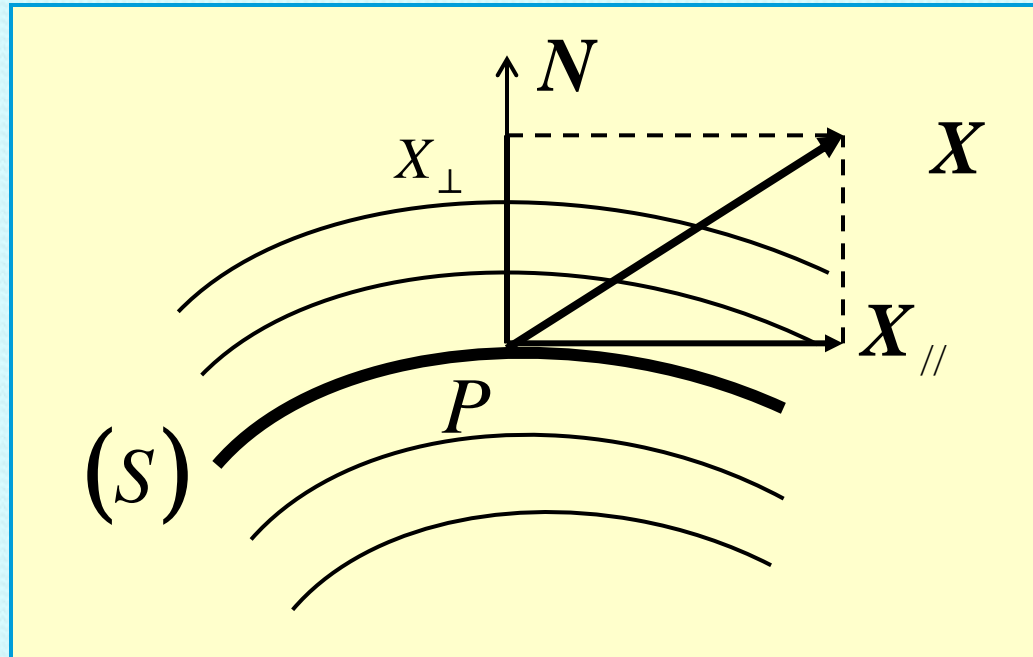
On voit apparaître des structures cellulaires au cours de l'expansion de cette flamme.

Jomaas, G., Law, C. K., Bechtold, J.K., 2007, "On transition to cellularity in expanding spherical flames, *J. Fluid Mech.*, 583, 1-26 .





# FORME GÉNÉRALE D'UNE LOI DE BILAN D'INTERFACE



$$X_{//} = (I - N \otimes N) \cdot X, \quad X_{\perp} = N \cdot X,$$

$$X_{\perp} = N \otimes N \cdot X = (N \cdot X) N = X_{\perp} N$$

## Mise en forme de l'équation de bilan 3D

$$\frac{d_v(\rho f)}{dt} + \rho f \nabla_{//} \cdot \mathbf{V} + \nabla_{//} \cdot \mathbf{J}_{VF} + \frac{\partial \mathbf{J}_{VF\perp}}{\partial N} = \dot{W}_F$$

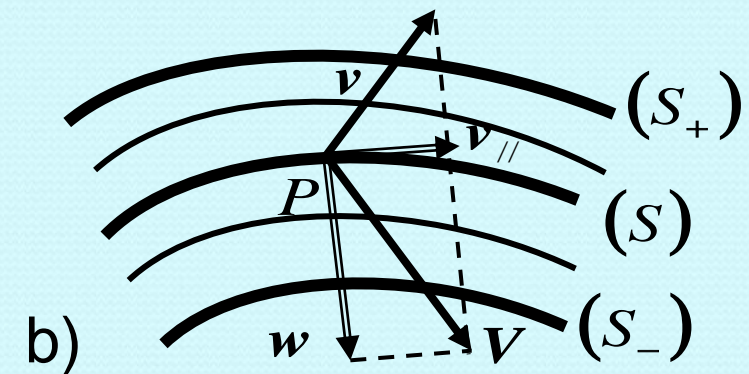
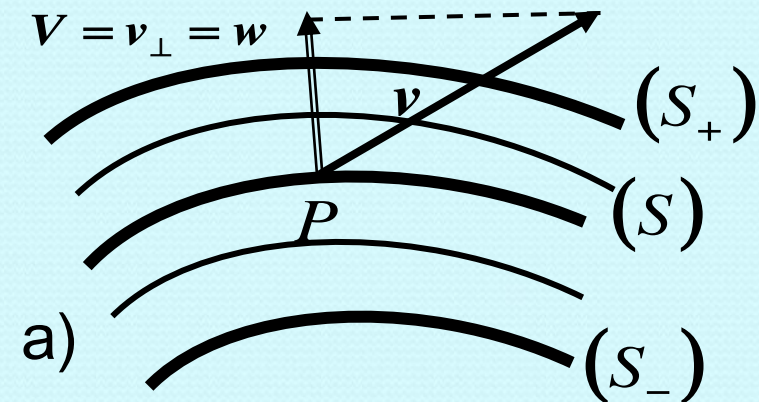
$f$  : grandeur  $F$  par unité de masse,

$$\nabla_{//} \cdot \mathbf{J}_{VF} = \nabla_{//} \cdot \mathbf{J}_{VF//} + J_{VF\perp} \nabla \cdot \mathbf{N},$$

$$\mathbf{J}_{VF} = J_{VF} + \rho f (\mathbf{v} - \mathbf{V})$$

Exemples de couches  
interfaciales :

- a) Couche de cisaillement
- b) Onde de choc



## Équation de bilan d'interface

Quantités de surface :

$$\rho_a f_S = \int_{N_-}^{N_+} \rho f dN \quad , \quad \mathbf{J}_{VF_a} = \int_{N_-}^{N_+} \mathbf{J}_{VF} dN \quad , \quad \dot{W}_{Fa} = \int_{N_-}^{N_+} \dot{W}_F dN$$

Bilan d'interface :

$$\frac{d_S(\rho_a f_S)}{dt} + \rho_a f_S \nabla_S \cdot \mathbf{V}_S + \nabla_S \cdot \mathbf{J}_{VF_a} + [\mathbf{J}_{VF \perp}]_{-}^{+} = \dot{W}_{Fa}$$

S'applique à la masse totale, aux masses des espèces, à la quantité de mouvement, à l'énergie, à l'entropie.

# INTERFACES À VARIABLES VÉRIFIANT DIRECTEMENT DES RELATIONS CLASSIQUES DE LA THERMOSTATIQUE ET DE LA TPI-2D

## Thermostatique

Il n'est pas automatique que les interfaces 2D vérifient les lois de comportement des milieux 3D. Cela signifie généralement que la couche interfaciale n'est pas un milieu ordinaire. Ainsi, on ne peut obtenir une variable intensive telle que la tension superficielle qu'en considérant la couche interfaciale comme un **fluide capillaire**, avec un coefficient capillaire.

La **théorie du second gradient** permet d'étudier de tels milieux pour lesquels l'intégration à travers la couche interfaciale conduit à la tension capillaire. Il serait intéressant de disposer une théorie générale des milieux non classiques 3D permettant de déduire ainsi l'ensemble des lois classiques 2D, et pas seulement la tension superficielle.

Les grandeurs considérées sont supposées vérifier les relations classiques de la thermostatique (Euler, Gibbs, Gibbs-Duhem) :

$$e_S = T_S s_S + \sigma / \rho_a + \sum_{j=1}^N g_S^j Y_S^j, \quad de_S = T_S ds_S + \sigma d(1/\rho_a) + \sum_{j=1}^N g_S^j dY_S^j,$$

$$0 = s_S dT_S + (1/\rho_a) d\sigma + \sum_{j=1}^N Y_S^j dg_S^j$$

**Phénomènes hors d'équilibre** : exemple de la viscosité de surface (Slattery, 1990)

$$\boldsymbol{\sigma}_v = \boldsymbol{\sigma}_{v//} = \boldsymbol{\sigma} - \sigma \mathbf{1}_{//} = [(\kappa_a - \varepsilon_a) \nabla_S \cdot \mathbf{v}_S] \mathbf{1}_{//} + 2 \varepsilon_a \mathbf{D}_S$$

*Application* : théorie de Scriven et Sternling (1964) pour l'instabilité de Bénard-Marangoni avec surface libre.

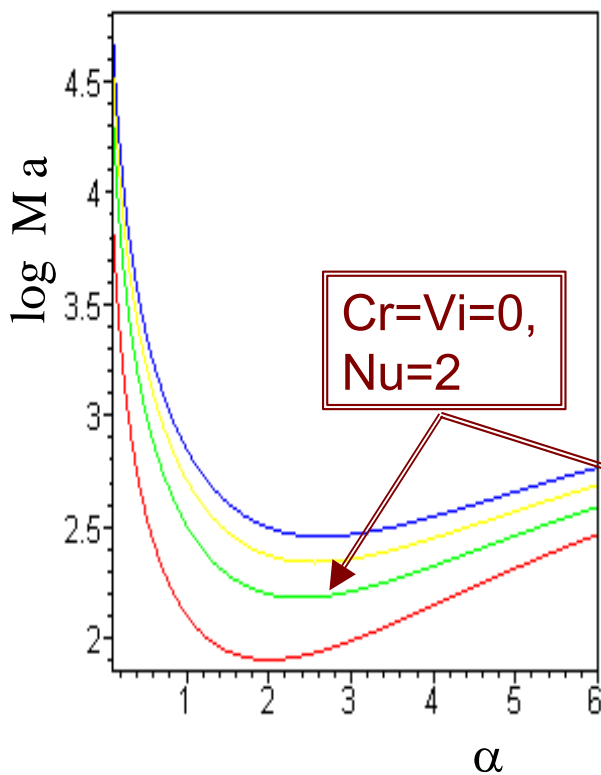
On introduit le nombre de crispation et le nombre de viscosité:

$$Cr = \mu \kappa / \sigma d, \quad Vi = (\kappa_a + \varepsilon_a) / \mu d$$

Une analyse linéaire conduit à l'expression du nombre de Marangoni de la stabilité neutre :

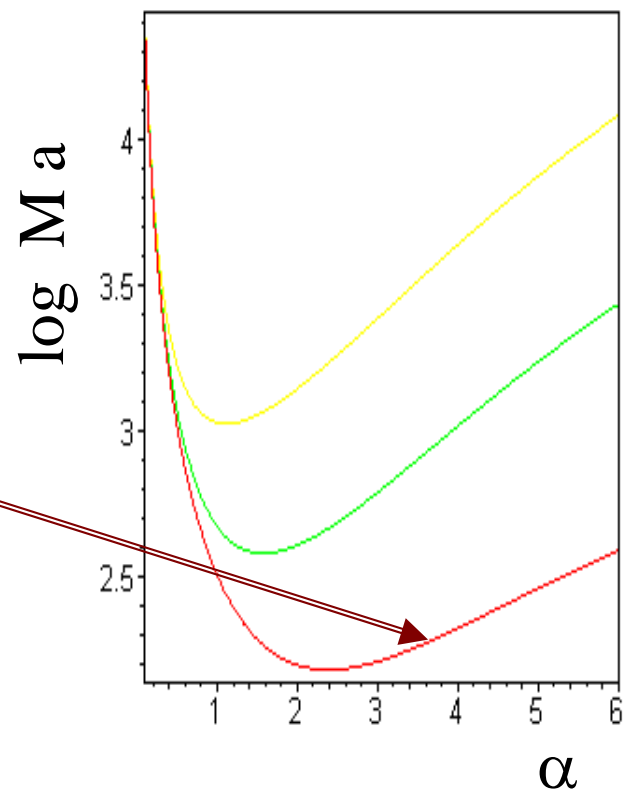
$$Ma = \frac{8\alpha(\alpha \operatorname{ch}\alpha + Nu \operatorname{sh}\alpha) [\alpha - \operatorname{sh}\alpha \operatorname{ch}\alpha + (Vi/2)\alpha(\alpha^2 - \operatorname{sh}^2\alpha)]}{\alpha^3 \operatorname{ch}\alpha - \operatorname{sh}^3\alpha - 8Cr\alpha^3 \operatorname{sh}\alpha}$$

$Cr=0$  correspond au cas de l'interface plane traitée par Pearson (1958).



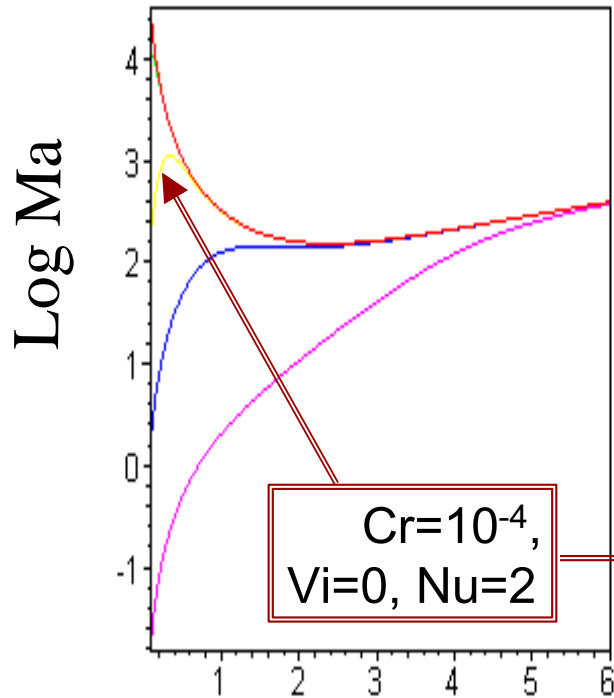
- $Nu=0$
- $Nu=2$
- $Nu=4$
- $Nu=6$

a)  $Cr=Vi=0$



- $Vi=0$
- $Vi=2$
- $Vi=10$

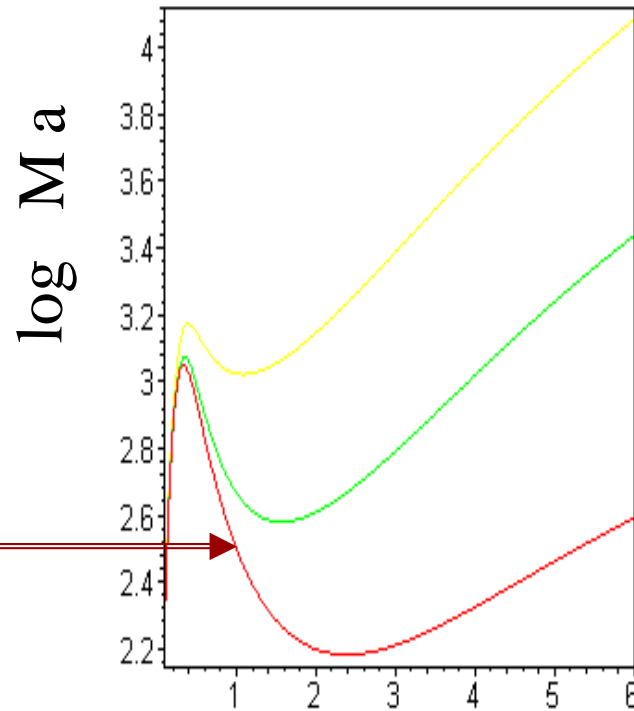
b)  $Cr=0, Nu=2$



$Cr=10^{-4},$   
 $Vi=0, Nu=2$

- $Cr=0$
- $\log Cr=6$
- $\log Cr=4$
- $\log Cr=2$
- $Cr=1$

c)  $Nu=2, Vi=0$



- $Vi=0$
- $Vi=2$
- $Vi=10$

d)  $Nu=2, Cr=10^{-4}$



*Autres exemples* : réactions de surface, adsorption et désorption, évaporation.

Formule de Bond et al. (2004) donnant le débit d'évaporation hors d'équilibre :

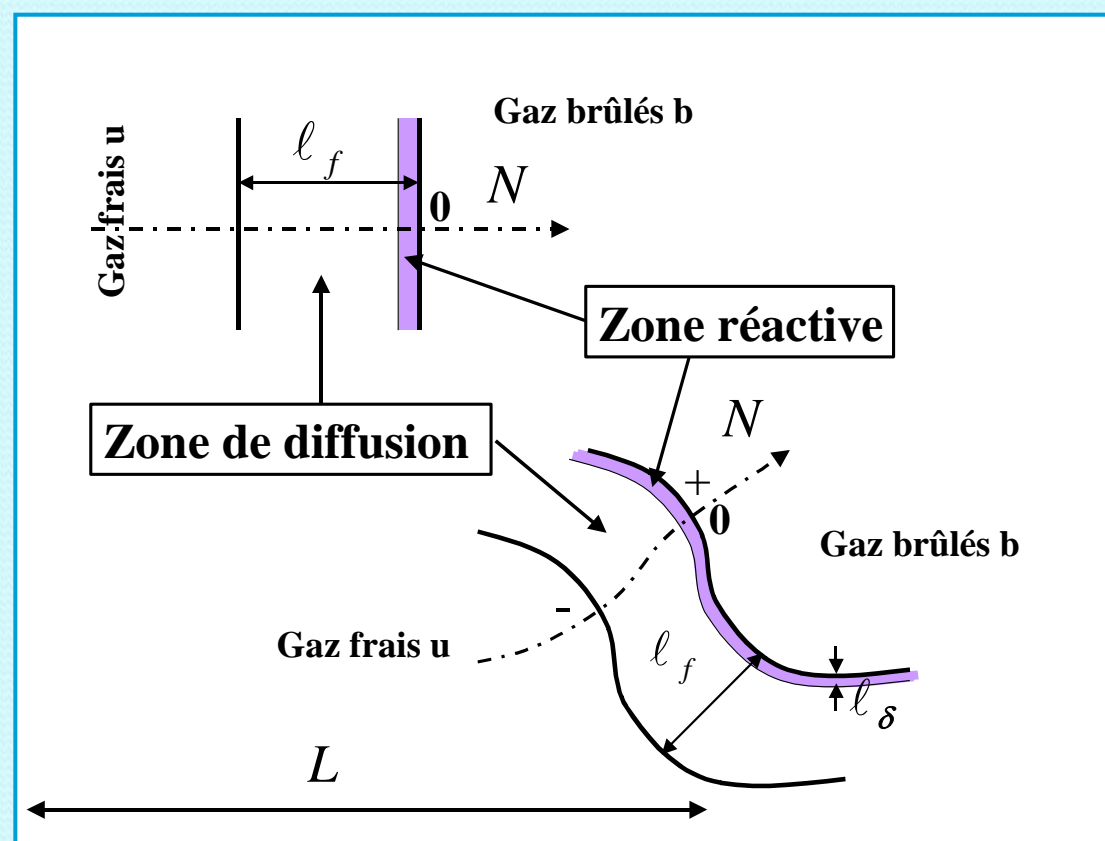
$$\dot{m} = \left( \frac{M}{2 \pi R} \right)^{1/2} \left( \alpha_v \frac{P_{sat}}{(T_s)^{1/2}} - \alpha_c \frac{p^+}{(T^+)^{1/2}} \right)$$

$P_{sat}$  : pression de vapeur saturante à la température de surface  $T_s = T^-$

$p^+$ ,  $T^+$  : pression, resp. température, de la vapeur au dessus du liquide

# INTERFACES DÉDUITES DE LA THERMOSTATIQUE ET DE LA TPI - 3D CLASSIQUES

*L'exemple de flammes étirées :*



$$s_L / s_L^0 \cong 1 - \mathcal{L}(\kappa + S / s_L^0)$$

$s_L^0$  : vitesse de combustion de flamme plane laminaire

$\kappa$  : courbure normale moyenne,  $S = -\mathbf{N} \cdot (\nabla \otimes \mathbf{v}) \cdot \mathbf{N}$

taux de déformation de l'écoulement frais au niveau de la flamme

$\mathcal{L}$  : longueur de Markstein ;  $\ell_f$  étant l'épaisseur de flamme :

$$\frac{\mathcal{L}}{\ell_f} = \frac{1}{\gamma} \ln\left(\frac{1}{1-\gamma}\right) + \frac{Ze(Le-1)}{2} \frac{1-\gamma}{\gamma} \int_0^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} \frac{\ln(1+x)}{x} dx$$

$$\gamma = (\rho_u - \rho_b) / \rho_u, \quad Ze = E_a(T_b - T_u) / RT_b^2$$

La notion de taux d'étirement de flamme est utilisée dans certains *modèles de combustion turbulente*, avec la notion de densité de surface de flamme.

Bilan de la densité de surface :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{v}} \Sigma) = \nabla \cdot (D_t \nabla \Sigma) + C_1 \frac{\varepsilon}{k} \Sigma - C_2 s_L^0 \frac{\Sigma^2}{1 - \bar{c}}$$

$\Sigma$  est l'aire de flamme par unité de volume,  $\tilde{\mathbf{v}}$  la moyenne de Favre du vecteur vitesse,  $D_t$  le coefficient de diffusion turbulente,  $C_1$  et  $C_2$  des constantes,  $\bar{c}$  une quantité scalaire moyenne réduite,  $\varepsilon$  et  $k$  le taux de dissipation et l'énergie cinétique turbulente respectivement.

## INTERFACES MANIFESTANT UNE RÉSISTANCE AU PLISSEMENT

$$\begin{aligned} \nabla_{//} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \nabla_{//} \cdot (\mathbf{N} \otimes \mathbf{g}) + \mathbf{p} &= \rho_a dv_a / dt, \\ \nabla_{//} \cdot \mathbf{M} + \nabla_{//} \cdot (\mathbf{N} \otimes \mathbf{m}) - \mathbf{N} \times \mathbf{g} + \boldsymbol{\varphi} &= \mathbf{0}, \\ (\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{N} \otimes \mathbf{g}) \cdot \boldsymbol{\eta} = \mathbf{T}, \quad \mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\eta} &= \boldsymbol{\Phi} \end{aligned}$$

$\boldsymbol{\sigma}$  : tenseur des tensions de membrane

$\mathbf{g}$  : vecteur force de cisaillement

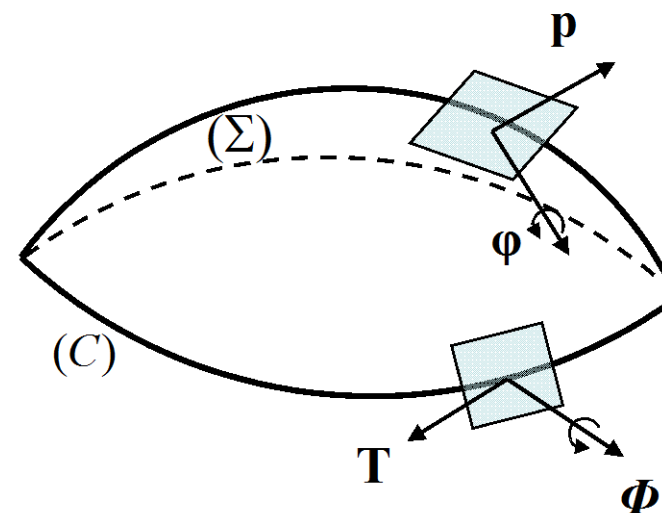
$\mathbf{M}, \mathbf{m}$  : caractérisent les moments de flexion

$\mathbf{p}$  : densité de forces de surface

$\boldsymbol{\varphi}$  : densité de moments de surface ,  
 $\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{N} = 0$

$\mathbf{T}$  : densité de forces par unité de longueur

$\boldsymbol{\Phi}$  : densité de moments par unité de longueur,  
 $\boldsymbol{\Phi} \cdot \mathbf{N} = 0$



## Commentaires

Nous avons écrit des équations pour la quantité de mouvement pour des interfaces manifestant une résistance au plissement. Il s'agit d'équations de coques minces.

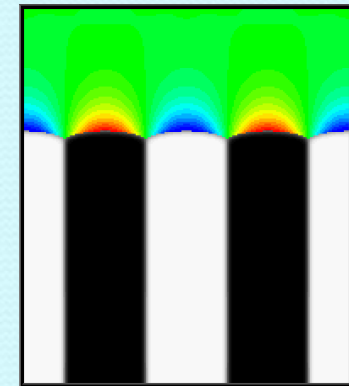
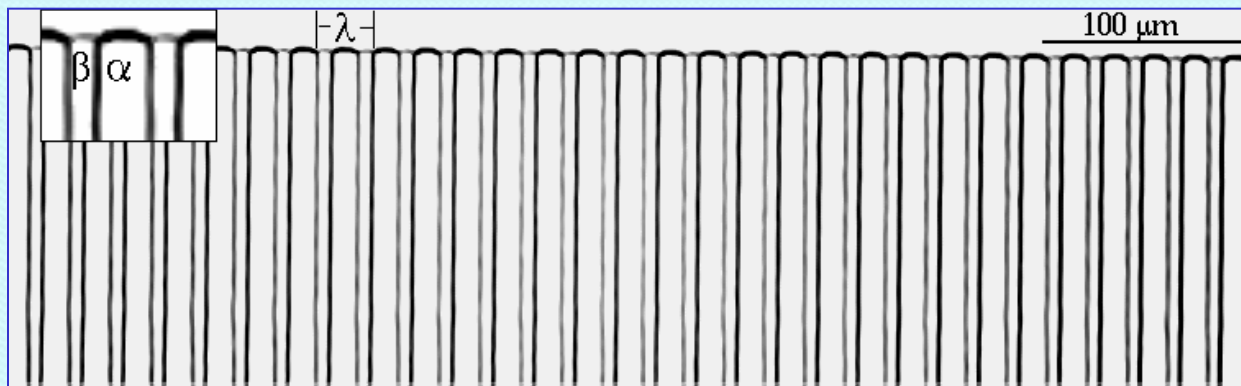
Si tous les moments s'annulent, on retrouve l'équation de la quantité de mouvement d'une interface souple.

Pour aller plus loin, il faut aussi établir les autres équations de bilan : masse, espèces chimiques, énergie, entropie, comme on sait le faire pour les interfaces souples.

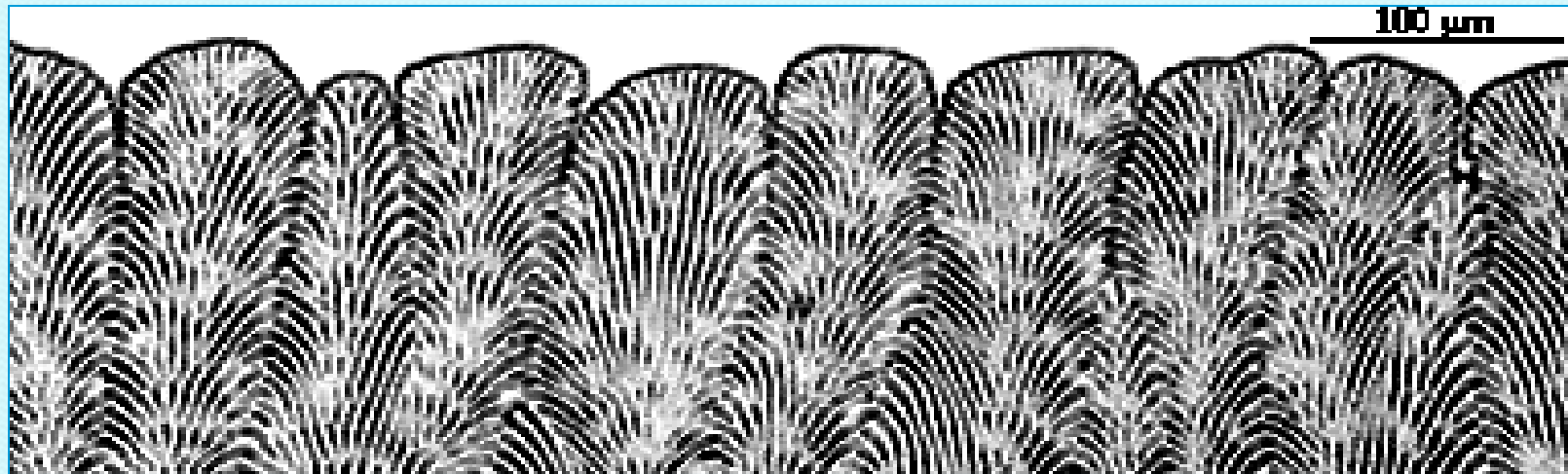
On a aussi besoin des lois d'état et des lois de comportement complémentaires. Un cas bien connu est celui des coques élastiques. En élasticité linéaire, on obtient des relations entre tensions et taux de déformation. Mais il reste à établir les autres lois de comportement.

## MODÉLISATION NUMÉRIQUE. L'exemple de la solidification.

**La méthode du champ de phase** : Cette méthode est utilisée lorsque l'on a à faire à des microstructures, comme c'est le cas en solidification eutectique directionnelle.



Simulation 2D par champ de phase. A gauche : expérience de croissance eutectique (S. Akamatsu, G. Faivre, 2000. *Phys. Rev. E*, 61, 3357). A droite: Simulation par la « méthode du champ de phase » (R. Folch, M. Plapp, 2001)



Colonies eutectiques dans CBr<sub>4</sub>-C<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub>-Naphtalène,

$V = 31 \mu\text{m s}^{-1}$ . Akamatsu, S.; Faivre, G. 2000 *Physical Review E* **61**, 3757-3769.

On part de la fonctionnelle d'énergie libre de Helmholtz adimensionnée:

$$F = \int_{\vec{v}} \left[ \frac{W^2}{2} (\vec{\nabla} u)^2 + \frac{W^2}{2} (\vec{\nabla} \phi)^2 + f(\phi, u, \tilde{c}, T) \right] dV$$



On déduit les équations de Plapp et Karma:

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = W_\phi \vec{\nabla}^2 \phi + \frac{\phi}{2} - \frac{\phi^3}{2} + h'(\phi) \left( f_{liq} - f_{sol} \right),$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \left[ M \left( \frac{\partial^2 f_{liq}}{\partial u^2} \vec{\nabla} u + W_u^2 \vec{\nabla} (\vec{\nabla}^2 u) \right) \right], \quad \frac{\partial \tilde{C}}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \left( \tilde{M} \frac{\partial^2 f_{liq}}{\partial \tilde{C}^2} \vec{\nabla} \tilde{C} \right).$$

$C_E$ ,  $C_\alpha$  et  $C_\beta$  : compositions du liquide et des deux phases solides dans l'eutectique binaire pur à la température eutectique  $T_E$ ,  $\phi$  : champ de phase,

$u(x, z, t) = \frac{C(x, z, t) - C_E}{(C_\beta - C_\alpha)/2}$  : concentration réduite,  $\tilde{C}(x, z, t)$  : concentration

en impuretés,  $h(\phi) = (3/2)(\phi - \phi^3/3)$  : fonction d'interpolation,

$f_{sol}(u, \tilde{C}, T)$ ,  $f_{liq}(u, \tilde{C}, T)$  : énergies libres,  $W_u$ ,  $W_\phi$  : épaisseurs caractéristiques des interfaces,  $M(\phi, u, \tilde{C})$ ,  $\tilde{M}(\phi, u, \tilde{C})$  : mobilités.

## Une description de zone pâteuse (Goyeau et al. 1999)

Méthode macroscopique appliquée à des *structures dendritiques assimilables à des matériaux poreux*. Un terme de source de Darcy apparaît dans le second membre de l'équation de la quantité de mouvement où  $K$  dénote la perméabilité isotrope et représente le lien direct entre la morphologie microscopique et les équations de conservation macroscopiques.

$$\frac{\mu_1 \rho}{K \rho_1} (\vec{v} - \vec{v}_s)$$

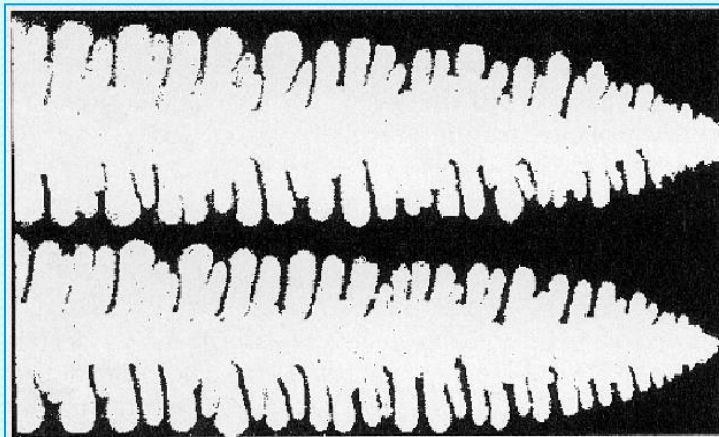
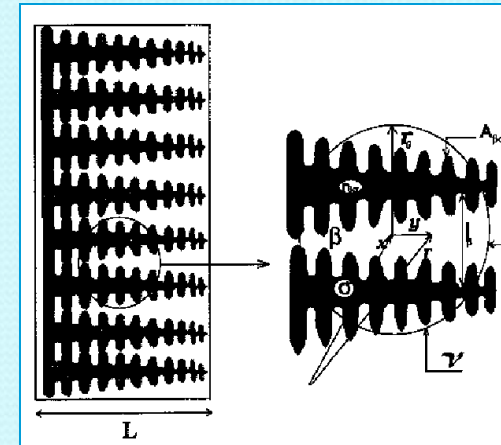


Image digitalisée d'une structure dendritique de succinonitrile-acétone



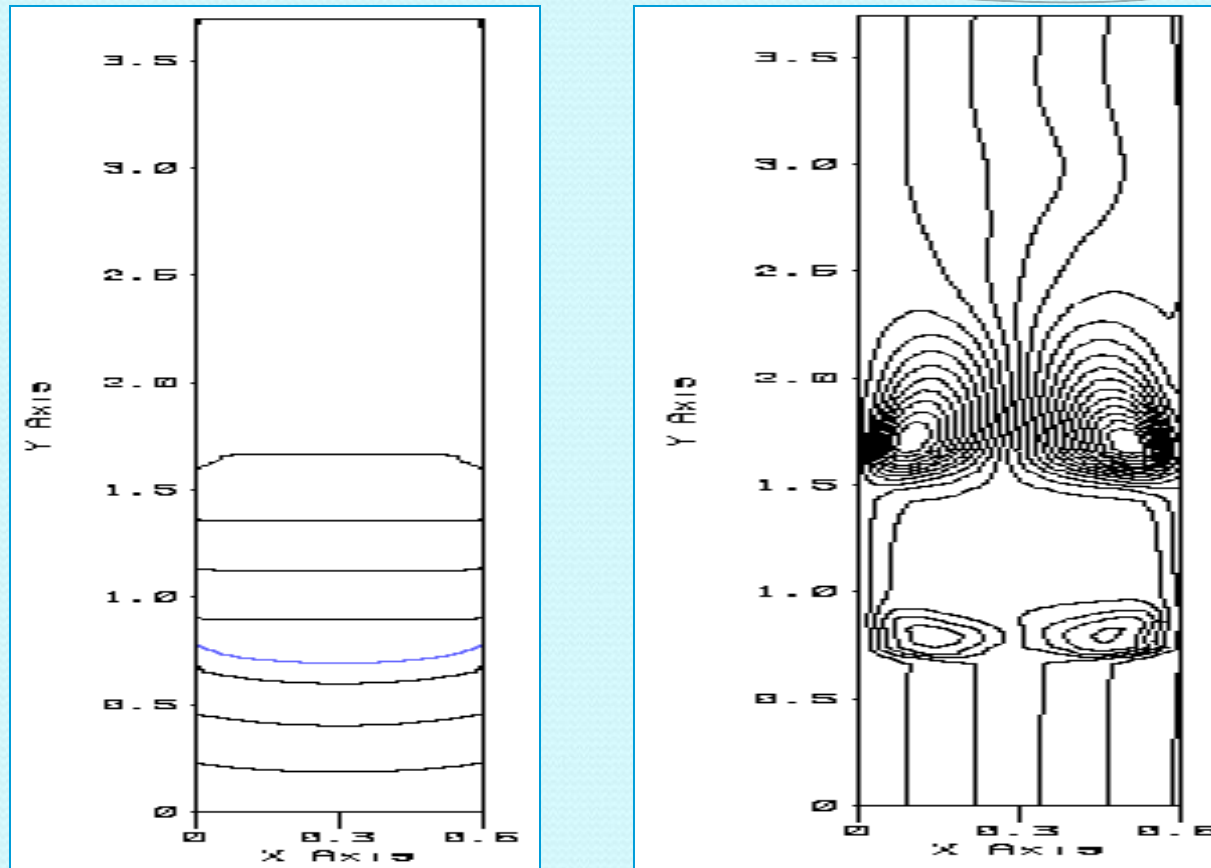
Zone pâteuse dendritique macroscopique et volume moyenné associé

## Méthode enthalpique

Benielli et al., El Ganaoui et Guérin et al. considèrent un système unique d'équations de bilan adaptée au problème du changement de phase en configuration 2D. Ils introduisent une densité moyenne  $\rho$  pondérée par les fractions massiques de liquide et de solide, les vitesses  $\mathbf{V}$  et  $\mathbf{V}_s$ ,  $C$  et  $h$  qui sont des *quantités locales moyennées* par les fractions volumiques de liquide et de solide. Par exemple:

$$C = f_l C_l + (1 - f_l) C_s$$

Avec ce modèle, en incluant des relations de fermeture appropriées ainsi que des conditions initiales et aux limites, il est possible d'obtenir des isothermes et des lignes de courant qui montrent en particulier la présence d'une interface lisse et courbe.



**Fig. 3 : Isotherm and streamline** plots obtained with SNC for pulling velocity  $V_t = 10 \mu\text{ms}^{-1}$ , and thermal gradient  $G \approx 30 \text{K/cm}$ . Interface position around  $y=0.75$ , corresponds to the gray line [Benielli, D., El Ganaoui, M., Semma, E., Bergeon, N., Jamgotchian, H., Vogé, P., Billia, B. & Bontoux, P. (2001) *J. Phys. IV France*, **11**, Pr6-135-142.]