



**HAL**  
open science

## Modélisation de l'évaporation et de la condensation à micro-échelle

Moritz Wolf, Eric Valério, Irina Graur Martin

► **To cite this version:**

Moritz Wolf, Eric Valério, Irina Graur Martin. Modélisation de l'évaporation et de la condensation à micro-échelle. CNRIUT 2023 Saint Pierre - La Réunion, Jun 2023, Saint Pierre (La Réunion), France. hal-04364133

**HAL Id: hal-04364133**

**<https://hal.science/hal-04364133>**

Submitted on 26 Dec 2023

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

---

## Modélisation de l'évaporation et de la condensation à micro-échelle

---

Moritz Wolf<sup>1</sup>

Eric Valério<sup>2</sup>

Irina Graur Martin<sup>3</sup>

M.C.W.Wolf@tue.nl eric.valerio@univ-amu.fr irina.martin@univ-amu.fr

<sup>1</sup>Eindhoven University of Technology

<sup>2</sup> IUT, Aix-Marseille Université  
Laboratoire IUSTI, UMR CNRS 7343

**Thèmes** – *Énergie - Mathématiques - Mécanique*

**Résumé** – *Un test de référence (benchmark) cinétique est proposé pour l'évaporation de l'argon à partir de sa phase liquide. Nous avons simulé l'évaporation et condensation par trois méthodes différentes. Ces méthodes sont : la méthode des moments appliquée à l'équation de Boltzmann, la méthode de vitesses discrètes appliquée à l'équation cinétique S- modèle et celle de la dynamique moléculaire. Les résultats obtenus sont comparés avec l'approche classique de Hertz-Knudsen et de Schrage en termes du taux d'évaporation, des sauts de pression et de température.*

**Mots-Clés** – *changement de phases, évaporation, cinétique approche, saut de pression et de température*

## 1 Introduction

L'évaporation et la condensation sont les processus les plus efficaces pour améliorer le transfert de chaleur dans les espaces confinés. Cependant, le développement d'outils performants pour la modélisation de ces processus nécessite une compréhension claire de l'applicabilité des approches existantes.

On sait depuis longtemps [1], [2] qu'au voisinage d'une surface de liquide en évaporation existe une couche, où la vapeur est dans l'état de non-équilibre. Cette couche, dont l'épaisseur est de l'ordre de quelques libres parcours moyens moléculaires, est trop fine à l'échelle macroscopique et les comportements des paramètres macroscopiques à l'intérieur de cette couche ne peuvent pas être décrits dans le cadre d'une approche continue. A l'intérieur de cette couche, appelée habituellement la couche de Knudsen, les paramètres macroscopiques ont de forts gradients, surtout lorsque la vitesse d'évaporation n'est pas faible par rapport à la vitesse de gaz la plus probable. Par conséquent, la température de l'interface liquide et la pression de saturation de vapeur correspondante pourrait être différente de la température et de la pression du côté supérieur de la couche de Knudsen. Par conséquent, lors de l'utilisation de l'approche continue pour simuler les phénomènes d'évaporation-condensation, il est important de relier les paramètres sur l'interface liquide, comme la température et la pression de saturation correspondante, avec les paramètres à la limite supérieure de la couche de Knudsen où la modélisation basée sur l'approche continue commence à être pertinente. Ces expressions, qui permettent de relier les paramètres macroscopiques des deux côtés de la couche de Knudsen sont souvent appelées conditions de sauts de pression et de température. Néanmoins, les deux paramètres, la pression et la température, varient continument à travers cette couche, seule sa très faible épaisseur pourrait donner l'impression à l'échelle macroscopique que les deux paramètres subissent un saut.

## 2 L'approche cinétique

Pour simuler le phénomène d'évaporation en utilisant l'approche continue de Navier-Stokes-Fourier les relations entre les paramètres à l'interface d'évaporation, à savoir, la température du liquide,  $T_L$ , et la pression de saturation correspondante,  $p_{sat}(T_L)$  et les paramètres sur la limite extérieure de la couche de Knudsen, à savoir la vitesse d'évaporation,  $u_{inf}$ , la pression,  $p_{inf}$ , et la température,  $T_{inf}$ , doivent être connus.

Toutes les expressions largement utilisées pour relayer les paramètres mentionnés ci-dessus proviennent de la théorie cinétique des gaz [1], [2], [3], [4], [5], [6], [7]. Les expressions de Hertz-Knudsen [1], [2] et de Schrage [3]

très largement utilisées, ont été dérivées en supposant uniquement la conservation de la masse à travers la couche de Knudsen et en ignorant les collisions intermoléculaires à l'intérieur de cette couche. La méthode des moments de l'équation de Boltzmann (MM) [4], [5] est basé sur trois lois de conservation (masse, quantité de mouvement et énergie) et permet de considérer la collision intermoléculaire en introduisant un paramètre supplémentaire. Cette approche représente donc une technique plus fiable.

Toutes les approches mentionnées ci-dessus sont valable pour les gaz monoatomiques. C'est ainsi que l'évaporation de l'argon monoatomique de sa phase liquide a été simulée à l'aide de l'équation cinétique du S-modèle [8], par la méthode de vitesse discrète [9]. Les données d'évaporation d'argon issues de la dynamique moléculaire (MD) [10] sont choisies pour avoir la possibilité de comparer les approches analytiques et numériques issue de la théorie cinétique avec celle de la technique MD.

Nous avons constaté que la solution numérique de l'équation cinétique du S-modèle [8] fournit des résultats en bon accord avec les résultats de dynamique moléculaire de Réf. [10], voir Tableau 1. Les résultats de la méthode des moments concordent très bien avec les deux approches mentionnées précédemment, tandis que les expressions analytiques de Hertz-Knudsen et de Schrage, largement utilisées, surestiment le taux d'évaporation et ne permettent pas d'obtenir tous les paramètres macroscopiques au limite supérieure de la couche de Knudsen.

Table 1 – Le taux d'évaporation J

$T_L$ K	$u_\infty$ $m \cdot s^{-1}$	J		
		MM	S-mod	[10]
		$kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$		
86.8	14.7	105.24	105.27	105.46
87.8	26.3	185.11	185.04	184.45
89.4	38.3	276.43	276.33	278.44
90.6	49.2	351.05	350.99	365.52
94.1	73.0	541.25	541.90	583.24

Les profils de la distribution de température à l'intérieur de la couche de Knudsen sont présentés sur la Fig. 1, où les résultats MD sont tracés avec les résultats du modèle S. Il est clair que la composante normale de la température de vapeur subit un saut essentiel sur l'interface.

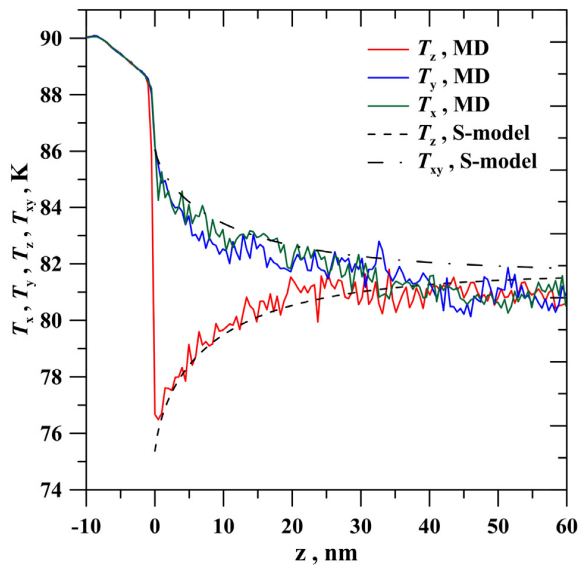


Figure 1 – Comparaison des résultats de la dynamique moléculaire avec les résultats du modèle S pour  $Ma = 0.2$  températures parallèles  $T_{x,y}$  et normales  $T_z$ .

### 3 Conclusions

Les hypothèses faites pour la dérivation des expressions les plus utilisées de Hertz-Knudsen et de Schrage ainsi que celles pour les expressions analytiques de la méthode du moment ont été comparées et les recommandations de leur utilisation sont fournies. Les résultats obtenus à partir de la solution numérique de l'équation cinétique du S-modèle ont été comparés à l'expression citée précédemment et l'excellent accord entre les résultats de la méthode des moments et de l'équation du S-modèle a été montré. Les données de dynamique moléculaire sont également très proches des résultats cinétiques du S-modèle. Les données proposées pour l'évaporation de l'argon pourraient être utiles pour le développement ultérieur des approches numériques pour simuler le processus de l'évaporation.

### Références

- [1] H. Hertz, Über die verdunstung der flüssigkeiten, insbesondere des quecksilbers, im luftleeren raume, Ann. Phys. Chem. 17 (1882)177-200.
- [2] M. Knudsen, Die maximale verdampfungsgeschwindigkeit des quecksilbers, Ann. Phys.Chem. 47 (1915) 697{708.
- [3] A. Schrage, A Theoretical Study of Interphase Mass Transfer, Columbia University Press, New York, 1953.
- [4] S. I. Anisimov, Vaporization of metal absorbing laser radiation, Journal of Experimental and Theoretical Physics 54 (1) (1968) 339{342.
- [5] T. Ytrehus, Molecular flow effects in evaporation and condensation at interfaces, Multiphase Sci. Technol. 9 (205).
- [6] C. Cercignani, Rare ed gas dynamics. From basic concepts to actual calculations, 1st Edition, Cambridge University Press, 2000.

[7] Y. Sone, Kinetic Theory and Fluid Mechanics, Birkhauser, Boston, 2002.

[8] E. M. Shakhov, Generalization of the Krook kinetic relaxation equation, Fluid Dyn. 3 (5) (1968) 95-96.

[9] A. P. Polikarpov, I. Graur, E. Y. Gatapova, O. A. Kabov, Kinetic simulation of the nonequilibrium effects at the liquid-vapor interface, International Journal of Heat and Mass Transfer 136 (2019) 449-456.

[10] Z. Liang, T. Biben, P. Keblinski, Molecular simulation of steady-state evaporation and condensation: Validity of the Schrage relationships, International Journal of Heat and Mass