

Modèle théorique et analyse physique de la résistance thermique d'une interface liquide-vapeur

G. BRUNETTO¹, S. BLANCO¹, R. FOURNIER¹, P. LAVIEILLE¹, M. MISCEVIC^{1,*}

¹ LAPLACE, UMR CNRS-INP-UPS 5213, Université de Toulouse, France

*(auteur correspondant : marc.miscevic@laplace.univ-tlse.fr)

Résumé - Dans le contexte de la miniaturisation des dispositifs de refroidissement diphasique, le rôle de la résistance au passage d'un flux thermique à l'interface liquide-vapeur devient de plus en plus prépondérant. Cependant, les modèles proposés actuellement pour prédire cette résistance font état d'une grande variabilité dans la valeur de certains paramètres pour un même fluide, pouvant aller jusqu'à plusieurs ordres de grandeur. L'étude proposée vise à fournir une modélisation alternative des transferts de masse et d'énergie à l'interface. Les équations de transport dans un fluide présentant une phénoménologie de Van der Waals sont établies à partir d'une approche mésoscopique. En partant d'une équation de Boltzmann modifiée, de type Enskog-Vlasov, et en utilisant la procédure de passage au macroscopique dite de Chapman et Enskog, les équations de transport macroscopiques sont déduites à partir du modèle mésoscopique. Ces équations prennent la forme d'équations de Cahn-Hilliard, avec pour solution d'équilibre un profil de densité continu à la traversée de l'interface. Afin d'obtenir la résistance d'interface, le système d'équations est linéarisé par perturbation autour de cette solution d'équilibre, ce qui permet de donner le lien entre gradient de température et flux d'énergie. Cette résistance thermique est finalement comparée aux résultats de la littérature.

Nomenclature

ϕ	Potentiel intermoléculaire, $\text{m}^2.\text{s}^{-2}$	$T(\mathbf{r}, t)$	Température, K
ϕ_0	Taille du puit de potentiel, $\text{m}^2.\text{s}^{-2}$	T_0	Température d'équilibre, K
d_0	Diamètre moléculaire, m	$\tilde{T}(\mathbf{r}, t)$	Perturbation de température, K
$Y(\mathbf{r})$	Fonction de corrélation radiale	$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$	Vitesse hydrodynamique, $\text{m}.\text{s}^{-1}$
$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$	Fonction de distribution, $\text{m}^{-6}.\text{s}^{-4}$	b	Covolume massique, $\text{m}^3.\text{kg}^{-1}$
V_m	Potentiel moyen, $\text{kg}.\text{m}^2.\text{s}^{-2}$	μ	Viscosité dynamique, $\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
a	Terme de cohésion, $\text{m}^5.\text{s}^{-2}$	λ	Conductivité thermique, $\text{W}.\text{m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
κ	Second coefficient de Van Der Waals, $\text{m}^7.\text{s}^{-2}$	τ	Temps entre deux collisions, s
$\rho(\mathbf{r}, t)$	Densité massique, $\text{kg}.\text{m}^{-3}$	j_m	Densité de flux de masse, $\text{kg}.\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
ρ_0	Densité massique d'équilibre, $\text{kg}.\text{m}^{-3}$	L_v	Chaleur latente, $\text{J}.\text{kg}^{-1}$
$\tilde{\rho}(\mathbf{r}, t)$	Perturbation de densité massique, $\text{kg}.\text{m}^{-3}$		

1. Introduction

La détermination de la résistance thermique d'une interface liquide-vapeur est devenue une question prépondérante au regard des enjeux actuels liés au refroidissement. La miniaturisation de ces dispositifs poussent à modéliser des situations complexes à faible épaisseur de fluide, proche d'une ligne triple ou au pied de gouttes pendant leur croissance. Dans ces configurations, le facteur limitant le flux de chaleur est la résistance thermique de l'interface. Il est donc essentiel de comprendre les mécanismes à l'origine de cette résistance thermique afin de la modéliser au mieux, et donc de perfectionner les futures applications technologiques. Des modèles ont été développés, ils présentent des forces mais aussi des faiblesses, comme la grande variabilité de certains paramètres parfois pour un même fluide.

La question que l'on adresse ici est donc la suivante : le long d'un axe vertical \mathbf{e}_z pointant vers le haut, un fluide pur présente un équilibre impliquant une phase liquide dans le demi

espace inférieur et une phase vapeur dans le demi espace supérieur. Ce système est mis hors de l'équilibre par une augmentation de la température côté gaz et l'imposition d'un flux de chaleur, entraînant la mise en place de flux de masse et de chaleur au travers de l'interface. Peut-on alors exprimer le flux de chaleur en fonction du flux de masse et de l'écart de température, et si oui, est-il possible d'en déduire une résistance thermique pour l'interface ?

Nous allons voir dans une première partie qu'il est possible de tirer d'un modèle cinétique des équations macroscopiques à la suite d'un passage méso-macro. Ces équations d'évolution vont nous permettre d'exprimer la relation recherchée. Le modèle cinétique sera décrit en détails et les idées nécessaires à l'obtention des équations de bilan dans le fluide seront énoncées. Dans un second temps, ces équations sont utilisées pour trouver une expression pour la résistance thermique de l'interface. La dépendance fonctionnelle de cette grandeur aux observables du système sera comparée à d'autres modèles existants dans la littérature, en particulier ceux de la thermodynamique des processus irréversibles (TPI) et du modèle de Hertz-Knudsen-Schrage.

2. Modélisation du fluide

La résistance thermique d'interface peut être déduite à partir de la description de la dynamique du fluide au travers des équations d'évolution de la densité, de la vitesse hydrodynamique et de la température au sein de l'interface afin de disposer d'un modèle physique continu incluant le détail des phénomènes physiques qui se produisent lorsque la densité passe continuellement de sa valeur à l'état liquide à sa valeur à l'état vapeur. Pour assurer que le fluide puisse être sujet à un changement de phase, nous contraignons le fluide à respecter une équation d'état de type Van der Waals. Une approche cinétique est privilégiée pour la modélisation du fluide et pour l'obtention des équations d'évolution. Cette méthodologie comporte plusieurs avantages. Tout d'abord, le modèle cinétique permet de justifier la forme des équations de transport qui vont être proposées. Ensuite, les coefficients présents dans ces équations seront accompagnés de leurs propres modèles, issus du modèle cinétique. Enfin, cette approche permet une diversité de méthodes de résolution. Il est en effet possible de choisir de résoudre l'équation cinétique, les équations macroscopiques, ou d'opter pour une résolution mixte.

Le paragraphe suivant présente succinctement le modèle mésoscopique dit d'Enskog-Vlasov (EV) et les raisons de son utilisation. Le passage aux équations macroscopiques est ensuite brièvement évoqué.

2.1. L'équation d'Enskog-Vlasov (EV)

Une approche cinétique basée sur l'équation de Boltzmann est limitée lorsqu'il s'agit de décrire l'interface liquide-vapeur. Cette équation est en effet construite pour traiter des gaz parfaits, pour lesquelles le libre parcours moyen est bien plus grand que la taille caractéristique des particules du fluide. Elle est donc incapable de décrire la phase liquide, rendant nécessaire une modélisation *ad hoc* de cette phase et des conditions de raccordement. L'équation d'Enskog-Vlasov permet d'étendre la portée de la modélisation cinétique au cas d'un fluide à plus forte densité, en proposant deux modifications de l'équation de Boltzmann. La première est l'inclusion des idées théoriques d'Enskog pour les fluides de sphères dures [2], qui incorpore la prise en compte de la taille non négligeable des constituants du fluide dans le terme de collision. Ce travail permet de rendre compte des répulsions intermoléculaires lorsque les constituants sont proches les uns des autres mais ne suffit pas pour décrire les forces attractives à plus longue portée, d'où le besoin d'une deuxième modification [3]. Celle-ci porte sur l'inclusion de cette partie attractive du potentiel intermoléculaire comme un terme de champ moyen sur l'exemple des travaux de Vlasov sur les plasmas [4]. Cette séparation des interactions en deux parties dis-

tinctes permet d'éviter des prédictions non physiques pour les coefficients de transport dans le fluide, typiquement des viscosités ou des conductivités thermiques négatives.

Dans la forme qui nous intéresse ici, l'équation d'EV modélise un fluide monoatomique de masse moléculaire m dont le potentiel intermoléculaire est celui de Sutherland

$$\phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|) = \begin{cases} \infty & \text{si } |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1| < d_0 \\ -\frac{\phi_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^6} & \text{si } |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1| > d_0 \end{cases}, \quad (1)$$

issu de la superposition de la répulsion des sphères dures et de l'attraction à longue portée présente dans la modélisation de Van der Waals. Les vecteurs \mathbf{r} et \mathbf{r}_1 sont des vecteurs positions, d_0 est le diamètre des constituants et $\phi_0 > 0$ est la profondeur du puits de potentiel en $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1| = d_0/2$. Les deux paragraphes suivants détaillent l'implémentation de cette interaction dans le terme de collision et dans le terme de transport de l'équation cinétique.

2.2. Modèle du terme de collision

La répulsion de type sphères dures conduit à un terme de collision proposé par Enskog

$$\mathcal{S}_E = d_0^2 \int \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left\{ - \frac{Y(\mathbf{r} + \frac{d_0}{2}\mathbf{k})f'(\mathbf{r}, \mathbf{c}')f'_1(\mathbf{r} + d_0\mathbf{k}, \mathbf{c}'_1)}{Y(\mathbf{r} - \frac{d_0}{2}\mathbf{k})f(\mathbf{r}, \mathbf{c})f_1(\mathbf{r} - d_0\mathbf{k}, \mathbf{c}_1)} \right\} g \cos(\theta) \sin(\theta) d\theta d\epsilon d\mathbf{c}_1, \quad (2)$$

où le vecteur \mathbf{r} est la position du point de collision entre deux particules, f la fonction de distribution des particules incidentes de vitesse \mathbf{c} , f_1 celle des partenaires de collision de vitesse \mathbf{c}_1 . Les quantités primées sont relatives aux particules après la collision. La fonction $Y(\mathbf{r})$ permet de tenir compte d'effets non locaux entre les centres de particules au moment de la collision, et des corrélations spatiales de positions au sein du fluide. Elle correspond donc à la fonction de corrélation de paire, évaluée au point de collision et qui s'exprime comme $Y = \frac{1}{1-b\rho}$ pour que l'équation d'état du fluide soit celle de Van der Waals. Le vecteur $\mathbf{k} = \{\sin(\theta)\cos(\epsilon), \sin(\theta)\sin(\epsilon), \cos(\theta)\}$ est le vecteur de collision (unitaire) et g la vitesse relative des particules. Toutes ces fonctions évoluent sur des échelles bien plus grandes que le diamètre d_0 , elles sont donc développée en série de Taylor autour du point \mathbf{r} . Notre étude porte sur des situations proches de l'équilibre, on ne retient donc de ce développement que les termes contenant un seul gradient au maximum. En suivant la prescription d'Enskog, ces termes sont calculés à l'aide de la fonction de distribution de l'équilibre. Ainsi, le terme de collision pour notre modélisation devient

$$\mathcal{S}_E = d_0^2 Y \mathcal{S}_0 - b\rho Y f_{eq} \left\{ + \frac{\mathbf{C} \cdot [\nabla \ln(\rho^2 Y T) + \frac{3}{5}(\mathbf{C}^2 - \frac{5}{2})\nabla \ln(T)]}{\frac{2}{5}[2\mathbf{C}\mathbf{C} : \nabla \mathbf{u} + (\mathbf{C}^2 - \frac{5}{2})\nabla \cdot \mathbf{u}]} \right\} \quad (3)$$

où $\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{u}$ est la vitesse microscopique dans le référentiel de l'écoulement et $b = \frac{2\pi d_0^3}{3m}$ le covolume massique. Le terme \mathcal{S}_0 est le terme de collision classique de Boltzmann, qui peut être approximé par tout modèle cinétique comme BGK [5] ou ES-BGK [6] par exemple. Pour l'exemple qui nous intéresse, nous prenons un modèle de type BGK avec une fréquence de collision indépendante de la vitesse microscopique.

2.3. Modèle du terme de transport

La partie attractive est traitée comme un champ moyen s'appliquant sur l'intégralité du fluide, elle vient donc ajouter un terme de force globale qui entre dans le terme de transport de l'équation cinétique. Elle s'exprime comme la somme de toutes les interactions attractives agissant sur une particule placée au point \mathbf{r}_1

$$V_m(\mathbf{r}_1) = \int_{\mathcal{D}_2} \rho(\mathbf{r}_2) \phi(r_{12}) d\mathbf{r}_2, \quad (4)$$

où \mathcal{D}_2 est le domaine d'intégration qui contient tout le fluide excepté l'intérieur de la particule considérée et $r_{12} = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$. Le potentiel intermoléculaire tendant très vite vers 0, il est possible de développer cette expression autour du point \mathbf{r}_1 pour obtenir

$$V_m(\mathbf{r}_1) = -2a\rho(\mathbf{r}_1) - \kappa\nabla^2\rho, \quad (5)$$

où les coefficients $a = -\frac{4\pi}{2} \int_{r_{12}>d_0} r_{12}^2 \phi(r_{12}) dr_{12}$ et $\kappa = -\frac{4\pi}{6} \int_{r_{12}>d_0} r_{12}^4 \phi(r_{12}) dr_{12}$ seront identifiés aux coefficients présents dans les théories d'interfaces diffuses dites de Van der Waals [8] après la procédure de Chapman et Enskog.

En rassemblant ces deux parties, l'équation d'EV que l'on a choisi pour décrire l'évaporation d'un fluide en négligeant les forces externes à celui-ci est

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla(f) - \nabla(V_m) \cdot \nabla(f)_\mathbf{c} = \mathcal{S}_E, \quad (6)$$

où $\nabla(f)_\mathbf{c}$ est la dérivée par rapport aux composantes de la vitesse microscopique. En se donnant des conditions appropriées, il est possible de simuler un écoulement diphasique en résolvant directement cette équation de manière numérique. Nous choisissons cependant de résoudre les équations issues de ce modèle. La démarche pour tirer ces équations d'évolution pour les cas hors de l'équilibre est appelée procédure de Chapman et Enskog. Elle consiste à prescrire la forme fonctionnelle de la fonction de distribution par rapport aux descripteurs macroscopiques puis de s'en servir pour déduire les équations recherchées. Cette procédure peut être retrouvée dans [1], elle ne sera pas détaillée ici. L'établissement de l'équation qui va nous servir de base à l'étude des flux de chaleurs au travers de l'interface fait l'objet du paragraphe suivant.

2.4. Le système macroscopique

La procédure de Chapman et Enskog est fondamentalement un développement de la solution de l'équation de Boltzmann autour d'une solution de référence. Pour ce travail la solution de référence sera celle de l'équilibre local, c'est-à-dire une distribution des vitesses de Maxwell. La procédure permet donc d'explorer les régimes proches de cet équilibre et on s'attend à ce que les équations qui en sont issues soient valables dans les cas de proche hors d'équilibre. En prenant les modifications du terme de collision de Enskog comme des termes d'ordre 1 du développement, il est possible de trouver les premières corrections hors de l'équilibre pour la fonction de distribution. Ces corrections sont ensuite utilisées pour déterminer les équations qui gouvernent la dynamique macroscopique. On restreint ces équations à une dimension pour ne garder que les termes qui nous intéressent dans notre cas d'étude. Les équations d'évolution deviennent

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\partial_z(\rho u), \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u\partial_z u &= -\frac{1}{\rho}\partial_z\left(\frac{\rho r T}{1-b\rho} - a\rho^2 + \kappa\rho\partial_z^2\rho + \frac{\kappa}{2}(\partial_z\rho)^2 - \frac{4}{3}\mu\partial_z u\right), \\ \frac{\partial T}{\partial t} + u\partial_z T &= -\frac{2T}{3(1-b\rho)}\partial_z u + \frac{2}{3r\rho}\partial_z(\lambda\partial_z T) - \frac{8}{9r\rho}\mu(\partial_z u)^2. \end{cases} \quad (7)$$

Le coefficient μ est la viscosité dynamique du fluide, calculée à partir du modèle cinétique comme $\mu = \rho r T \tau (1 - \frac{3}{5}b\rho)$ et $\lambda = \frac{5}{2}\rho r^2 T \tau (1 - \frac{2}{5}b\rho)$ est sa conductivité thermique. Le facteur τ est le temps de libre parcours moyen dans le fluide. Il est calculé à partir de la viscosité du fluide sur l'exemple de [11].

Ces équations sont des équations de conservation. La première est relative à la conservation de la masse, la deuxième à la conservation de l'impulsion et la dernière à la conservation de

l'énergie. En regardant attentivement la deuxième, on remarque que c'est une équation de type Cahn-Hilliard, pour laquelle les effets des gradients de densité ont été pris en compte par une modification de la pression [7]. En effet, à la pression issue de l'équation d'état $p = \frac{\rho r T}{1-b\rho} - a\rho^2$, se sont ajoutés les termes $\kappa\rho\partial_z^2\rho + \frac{\kappa}{2}(\partial_z\rho)^2$ rendant compte de l'existence de gradients de densité. Ce sont ces termes qui permettent d'obtenir un modèle d'interface diffuse et donc un passage continu de la phase gazeuse à la phase liquide.

Si on se place à l'équilibre, la température est homogène à T_0 et la vitesse macroscopique est nulle. La densité n'est quant à elle pas homogène car la présence de deux phases dans le système est possible. La deuxième équation impose une condition sur le profil de densité $\rho_0(z)$

$$\partial_z \left(\frac{\rho_0 r T_0}{1-b\rho_0} - a\rho_0^2 + \kappa\rho_0\partial_z^2\rho_0 + \frac{\kappa}{2}(\partial_z\rho_0)^2 \right) = 0. \quad (8)$$

La résolution de cette équation permet d'obtenir le profil d'équilibre de la densité du fluide tel que représenté sur la figure 1 pour différentes températures. Dans la suite du document, nous appellerons de façon arbitraire centre de l'interface le point d'inflexion de cette courbe. Pour aller vers un modèle de résistance thermique d'interface, il faut sortir de l'équilibre. La notion de résistance thermique étant définie pour des cas proches de l'équilibre, au cours desquels une relation de proportionnalité entre l'écart de température et le flux de chaleur peut être supposée, nous nous intéressons à des perturbations autour des champs à l'équilibre

$$\begin{cases} \rho(z, t) &= \rho_0(z) + \tilde{\rho}(z, t) \\ u(z, t) &= \tilde{u}(z, t) \\ T(z, t) &= T_0 + \tilde{T}(z, t) \end{cases}, \quad (9)$$

où on suppose $\rho_0 \gg |\tilde{\rho}|$ et $T_0 \gg |\tilde{T}|$. Ce développement est injecté dans le système d'équations (7), et seuls les termes linéaires en perturbation sont retenus. Notre question portant sur la résistance d'interface, nous restreignons pour le moment cette étude au régime stationnaire, avec une vitesse imposée à un bord et une température et un flux de chaleur q_V imposés côté vapeur. Dans ces conditions l'équation de conservation de la masse au premier ordre en perturbation prend la forme simple

$$\rho_0(z) \tilde{u}(z, t) = j_m, \quad (10)$$

où j_m est une constante qui représente le flux de masse dans le système. Seul le profil de densité de l'équilibre est transporté dans les conditions dans lesquelles nous nous sommes placés. Par ailleurs, si on injecte cette dernière équation (10) dans l'équation de conservation de l'énergie, celle-ci se découple des évolutions de $\tilde{\rho}$ et \tilde{u} pour devenir

$$\partial_z \left(\lambda_0 \partial_z \tilde{T} \right) = - \frac{j_m r T_0}{\rho_0 (1-b\rho_0)} \partial_z(\rho_0), \quad (11)$$

où λ_0 est la conductivité thermique calculée avec les grandeurs à l'équilibre. C'est cette équation qui va permettre de déterminer une résistance thermique pour l'interface. Dans la partie qui suit, plusieurs résultats issus de cette équation sont comparés aux approches existantes pour l'étude de notre situation. En particulier, la dépendance fonctionnelle de la résistance thermique de l'interface va pouvoir être discutée.

3. Analyse physique du modèle

3.1. Compatibilité avec les modèles macroscopiques

La question posée dans ce papier porte sur la résistance thermique de l'interface. La grandeur que l'on veut tirer de l'équation (11) est donc un écart de température entre deux points

quelconque du fluide. Pour ce faire, une première intégration de l'équation est faite entre un point z_V de la phase vapeur éloigné de l'interface et une altitude z arbitraire. Cette intégration permet d'obtenir la relation

$$\left(\lambda_0 \partial_z \tilde{T}\right)(z) - \left(\lambda_0 \partial_z \tilde{T}\right)(z_V) = -j_m r T_0 \ln \left(\frac{\rho_0(z)(1 - b\rho_0(z_V))}{\rho_0(z_V)(1 - b\rho_0(z))} \right), \quad (12)$$

où on définit le flux de chaleur à une altitude quelconque comme $q(z) = -\left(\lambda_0 \partial_z \tilde{T}\right)(z)$. Cette relation est intéressante en elle-même pour le lien qu'elle établit avec une approche de l'interface basée sur la thermodynamique classique. En effet, si on se place dans un cadre où la région de l'interface est traitée comme un système ouvert, alors le premier principe impose que la somme des flux de chaleur arrivant sur l'interface par les deux phases est égale au produit du flux de masse par la chaleur latente de vaporisation (lorsque l'énergie cinétique est négligée). En prenant notre altitude arbitraire à z_L , dans la phase liquide loin de l'interface, les termes en facteur de j_m sont alors identifiés à la chaleur latente de vaporisation L_v . Celle-ci ne fait intervenir que des grandeurs issues de l'équilibre, en accord sa définition thermodynamique. L'évaluation de la valeur numérique de cette chaleur latente pour un jeu de paramètres donné montre un excellent accord avec la valeur évaluée également numériquement par la formule de Clapeyron.

En divisant l'équation (12) par $\lambda_0(z)$ et en intégrant une nouvelle fois entre les altitudes z_V et z_L , il vient finalement l'expression de l'écart de température entre les deux altitudes arbitraires $\Delta \tilde{T}$. Cet écart n'est cependant pas celui associé au saut de température à l'interface. Cette notion de saut provient d'une vision où l'interface est une discontinuité sans épaisseur. Ainsi, pour retrouver cette grandeur, nous soustrayons à l'écart de température précédant les écarts associés au prolongement linéaire des profils de température des deux phases, comme présenté sur la figure 2 pour obtenir $\Delta \tilde{T}_i$. L'écart de température recherché s'exprime finalement comme

$$\Delta \tilde{T}_i = \left\{ \begin{array}{l} q_V \left[\int_{z_V}^{z_i} \left(\frac{1}{\lambda_0(z_V)} - \frac{1}{\lambda_0(z)} \right) dz + \int_{z_i}^{z_L} \left(\frac{1}{\lambda_0(z_L)} - \frac{1}{\lambda_0(z)} \right) dz \right] \\ + j_m r T_0 \int_{z_V}^{z_i} \left[\frac{1}{\lambda_0(z)} \ln \left(\frac{\rho_0(z_V)(1 - b\rho_0(z))}{\rho_0(z)(1 - b\rho_0(z_V))} \right) dz \right] \\ + j_m r T_0 \int_{z_i}^{z_L} \left[\frac{1}{\lambda_0(z)} \ln \left(\frac{\rho_0(z_V)(1 - b\rho_0(z))}{\rho_0(z)(1 - b\rho_0(z_V))} \right) dz \right] + \frac{1}{\lambda_0(z_L)} \ln \left(\frac{\rho_0(z_L)(1 - b\rho_0(z_V))}{\rho_0(z_V)(1 - b\rho_0(z_L))} \right) dz \end{array} \right. \quad (13)$$

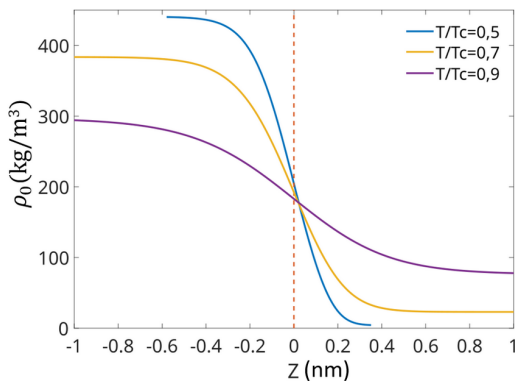


Figure 1 : Profils de ρ_0 pour différentes valeurs de température réduite. La ligne verticale en pointillés est le centre de l'interface.

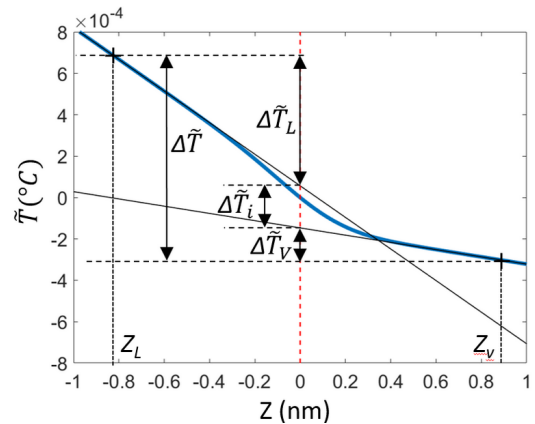


Figure 2 : Exemple de profil de température et prolongement des profils linéaires mono-phasique à l'interface pour faire apparaître le $\Delta \tilde{T}_i$ dans le cas d'une épaisseur nulle.

Pour des altitudes éloignées de la région de l'interface, les fonctions sous les intégrales s'annulent. Ainsi, pour des bornes z_V et z_L assez loin dans les phases limites, les intégrales convergent vers des valeurs constantes et indépendantes de ces bornes. La relation du saut de température de l'interface avec le flux de masse et le flux de chaleur provenant de la vapeur se résume à

$$\Delta\tilde{T}_i = R_1 j_m L_v + R_2 q_V, \quad (14)$$

où R_1 et R_2 sont des résistivités constantes. L'écart de température est, par cette relation, une fonction doublement linéaire du flux de masse et du flux de chaleur du côté vapeur. Cette proportionnalité entre le déséquilibre (l'écart de température) et les flux qui lui sont associés est un trait caractéristique des approches de thermodynamique du proche hors d'équilibre, en particulier de la thermodynamique des processus irréversibles (TIP) de Onsager [12]. Cette identification ancre un peu plus notre modèle dans les approches macroscopiques, en permettant de vérifier qu'il convient aux cas de proche hors d'équilibre, comme supposé lors du passage méso-macro.

3.2. Différence avec le modèle de Hertz-Knudsen-Schrage

Le modèle le plus utilisé pour donner la résistance thermique de l'interface est celui de HKS. Il est lui aussi construit à partir d'une approche cinétique, différente de l'approche menée dans le présent travail. Dans son livre, Schrage [9] détermine le flux de masse traversant l'interface en décrivant la phase vapeur au niveau de deux plans parallèles à celle-ci. Un de ces plans juste au dessus de l'interface, où le gaz est considéré à l'équilibre avec le liquide au dessous à la température et la pression de saturation, et un plus haut, où le gaz est à un autre équilibre et donc à une autre température. Ces équilibres permettent d'utiliser la fonction de distribution de Maxwell pour décrire l'état du fluide à ces deux plans. En ajoutant les contributions montante (issue du plan proche de l'interface) et descendante (issue du plan plus lointain), Schrage calcule le flux de masse à l'interface comme

$$j_{m_s} = \frac{2\alpha}{2 - 2\alpha} \left(\frac{p_{sat}}{\sqrt{2\pi k_B T_{sat}}} - \frac{p_V}{\sqrt{2\pi k_B T_V}} \right) \approx \frac{2\alpha}{2 - 2\alpha} \frac{1}{\sqrt{2\pi k_B T_{sat}}} \left(\Delta p + p_{sat} \frac{\Delta T}{2T_{sat}} \right), \quad (15)$$

où \tilde{p}_s est la pression à l'interface côté gaz et p_V est la pression dans le gaz à une distance assez grande pour que l'influence de l'interface soit négligeable. Pour passer à la dernière relation, on prend la température de la vapeur comme $T_V = T_{sat} + \Delta T$ avec $\frac{|\Delta T|}{T_{sat}} \ll 1$. Le paramètre σ est le coefficient d'accommodation tel que $\sigma = 1$ a priori pour un corps pur. La valeur de ce coefficient est cependant très variable en pratique, rendant son interprétation assez difficile [10]. La plupart du temps, cette expression est encore simplifiée en négligeant le terme en ΔT et en considérant que la pression reste proche de la pression de saturation et suit courbe de saturation, la résistance thermique de l'interface est alors exprimée comme

$$R_{th} = \frac{2 - \alpha}{2\alpha} \sqrt{2\pi k_B T_{sat}} \frac{T_{sat}}{\rho_V L_v^2}. \quad (16)$$

Cette résistance ne présente pas les mêmes dépendances fonctionnelles que celles que l'on a pu trouver auparavant. En particulier, l'écart de température est ici fonction uniquement du flux de masse, là où nous avons une dépendance en plus à l'un des flux de chaleur. Une analyse plus poussée est nécessaire pour comprendre l'origine et les conséquences de ces différences.

4. Conclusion

Dans ce document, nous avons développé une approche cinétique pour modéliser les flux de masse et de chaleur au travers d'une interface liquide-vapeur. À l'aide d'une équation de

type EV, permettant l'implémentation d'un potentiel d'interaction intermoléculaire de Sutherland, nous avons pu tirer les équations de bilan macroscopiques par la procédure de Chapman et Enskog. Le fluide obtenu est soumis à l'équation d'état de Van der Waals. Pour étudier la résistance thermique de l'interface, ce système a été linéarisé autour de l'équilibre ce qui a permis de découpler l'équation donnant le profil de température du reste du système. Finalement, cette équation a permis de trouver une expression pour le saut de température à l'interface faisant intervenir à la fois les flux de chaleur et de masse. Cette double dépendance, compatible avec une approche basée sur la TPI, est différent du résultat usuel donné par le modèle de HKS qui ne fait intervenir qu'une dépendance au flux de masse. Pour la suite, nous développons un code capable de résoudre le système linéarisé instationnaire dans le but d'obtenir le profil des perturbations de densité. Nous serons alors en capacité de connaître exactement la dynamique des perturbations à l'interface. Dans un second temps, nous souhaitons revenir sur la modélisation cinétique, afin d'être en capacité d'étudier des fluides réels. Cela passera par la modification de l'équation d'état et une gestion différente des interactions attractives. À plus long terme, la résolution numérique du système macroscopiques non linéarisé, l'inclusion de complexité géométrique en courbant l'interface, ou la présence d'une paroi solide et d'incondensables pourront aussi être envisagés.

Références

- [1] Chapman S. & Cowling T., *The mathematical theory of non-uniform gases*, Cambridge University Press (1990).
- [2] Enskog D., The numerical calculation of phenomena in fairly dense gases, *Arxiv Mat. Astr. Fys.*, 16-1 (1921) 1-60
- [3] Su W. & al., Kinetic modeling of nonequilibrium flow of hard-sphere dense gases, *Phys. Rev. Fluids*, 8-1 (2023)
- [4] Vlasov A., Many-particle theory and its application to plasma, *Teoriya mnogikh chastits*, (1950)
- [5] Bhatnager P. & Gross E. & Krook M., A model for collision processes in Gases., *Phys. Rev.*, 94-3 (1954) 511-525
- [6] Holway Jr & Lowell H., Kinetic theory of shock structure using an ellipsoidal distribution function, *Rarefied Gas Dynamics*, 1 (1965) 193
- [7] Cahn J. & Hilliard J., Free energy of a nonuniform system, *The journal of chemical physics*, 28-2 (1958) 258-267
- [8] Anderson D., McFadden, G., Diffuse interface methods in fluid mechanics, *Ann. Rev. of Fluids Mech.*, 30 (1998) 139-165
- [9] Schrage R., *A theoretical study of interphase mass transfer*, Columbia University Press (1953).
- [10] Alty T. & al., The accommodation coefficient and the evaporation coefficient of water, *Royal Society Publishing*, 866-149 (1997) 104-116
- [11] Wang P. & al., The kinetic Shakhov-Enskog model for non-equilibrium flow of dense gases, *Journal of fluid mechanics*, 883 (2020)
- [12] De Groot S. & Mazur P., *Non-equilibrium thermodynamics*, Courier Corporation (1984).