

# Modélisation d'interfaces avec phase fluide

## Modeling interfaces with fluid phase

Roger Prud'homme<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Sorbonne Université, CNRS, Institut Jean Le Rond d'Alembert, Paris, roger.prud\_homme@upmc.fr

**RÉSUMÉ.** Une réflexion a semblé nécessaire sur les modèles d'interface avec au moins une phase fluide. Le concept et la modélisation thermodynamique et mécanique des interfaces sont partiellement revisités. Des équations de bilan et des lois de comportement sont rappelées. Des exemples variés sont donnés pour étayer les propos. Quelques questions et perspectives sont proposées.

**ABSTRACT.** A reflection seemed necessary on interface models with at least one fluid phase. The concept and the thermodynamic and mechanical modeling of the interfaces are partially revisited. Balance laws and constitutive relations are recalled, and various examples are given to support the remarks. Some questions and perspectives are proposed.

**MOTS-CLÉS.** interface, coordonnées curvilignes, capillarité, phénomènes de transport, irréversibilités, développements asymptotiques, changements de phase, flammes, couches de cisaillement.

**KEYWORDS.** interface, curvilinear coordinates, capillarity, transport phenomena, irreversibility, asymptotic expansions, phase changes, flames, shear layers.

### Liste des symboles

Symbole	Signification	Symbole	Signification
$A, B, C$	Tenseurs d'ordres respectifs 1,2,3	$\mathbf{x}$	Vecteur position ( $x, y, z$ ) en coordonnées cartésiennes
$C_i$	Courbe de coordonnée	$x_1, x_2, x_3$	Coordonnées curvilignes orthogonales
$F$	Énergie interne, grandeur F par unité de masse	$\mathbf{X}, \mathbf{X}_{\parallel}, \mathbf{X}_{\perp}$	Vecteur, sa partie tangentielle, normale
$f(\mathbf{x}, t)$	Fonction de la position et du temps	$\sim$	Valeur réduite
$\mathbf{f}$	Vecteur-force agissant sur l'unité de volume	$a$	Indice désignant une quantité extensive par unité d'aire, exemple : $\rho_a$ masse surfacique
$F$	Grandeur	$j$	Indice d'une espèce chimique
$F(\mathbf{x}, t) = 0$	Définition intrinsèque d'une interface	$p$	Indice pour les particules
$g$	Potentiel thermodynamique massique	$s$	Indice pour une quantité d'interface, par exemple $f_s$ avec : $\rho_a f_s = \int_{N_-}^{N_+} \rho f dN$
$h$	Enthalpie massique		
$\mathbf{I}$	Tenseur unité	$\beta$	Energie de réaction réduite $\beta \gg 1$
$\mathbf{J}_F, \mathbf{J}_{VF}$	Flux de $F$ pour $\mathbf{V}=\mathbf{0}, \mathbf{V}=\mathbf{v}, \mathbf{V}=\mathbf{V}$	$\gamma$	Coefficient isentropique $c_p/c_v$ , rapport $\gamma = (\rho^- - \rho^+)/\rho^-$
$\ell_f, \ell_s$	Épaisseur de diffusion, de réaction	$\delta$	Épaisseur d'une couche interfaciale
$L$	Longueur caractéristique	$\varepsilon$	Nombre sans dimension $\varepsilon \ll 1$
$L$	Longueur de Markstein, coefficient phénoménologique	$\varepsilon_a$	Viscosité de cisaillement de surface
$M$	Masse, nombre de Mach	$K_a$	Viscosité d'aire
$\dot{m}$	Débit masse unitaire	$\lambda$	Coefficient de capillarité interne
$n, N$	Coordonnée normale à petite, grande échelle	$\mu$	Coefficient de viscosité de cisaillement
$\mathbf{N}$	Normale unitaire	$\nu$	Viscosité cinématique $\nu = \mu/\rho$
$p, \mathbf{P}$	Pression, tenseur des pressions (= $\Sigma$ )	$\xi$	Matrice des coordonnées $x_1, x_2, x_3$
$p^*$	Pression effective	$\Pi$	Tenseur des pressions visqueuses
$p_{(i)}^*$	Densité de puissance virtuelle	$\rho$	Masse volumique
$\mathbf{q}$	Vecteur flux de chaleur	$\sigma$	Tension superficielle
$R_1, R_2$	Rayons de courbure principaux	$\Sigma$	Tenseur des contraintes
$s$	Entropie massique		
$S_L$	Vitesse de combustion laminaire		
$S, S_i$	Surface, surface de coordonnée		
$t$	Temps		
$T$			

$\mathbf{v}$	Température absolue	$\boldsymbol{\sigma} = \Sigma_a$	Tenseur des contraintes surfaciques
$\mathbf{V}$	Vecteur vitesse du fluide	$\boldsymbol{\sigma}_v$	Tenseur des tensions visqueuses
$\mathbf{V}^*$	Vitesse composite dans la couche interfaciale	$\tau$	Energie de réaction réduite
$\mathbf{w}(\mathbf{x}, t)$	Vitesse virtuelle	$\vartheta = 1/\rho$	Volume massique
$\dot{W}_F$	Vitesse des points d'une surface	$\nabla$	Opérateur gradient
$x, y, z$	Taux de production de $F$	$\nabla_{\parallel}, \nabla_s$	Gradient tangentiel
	Coordonnées cartésiennes	$\nabla_{\perp}$	Gradient normal

## 1. Le concept d'interface

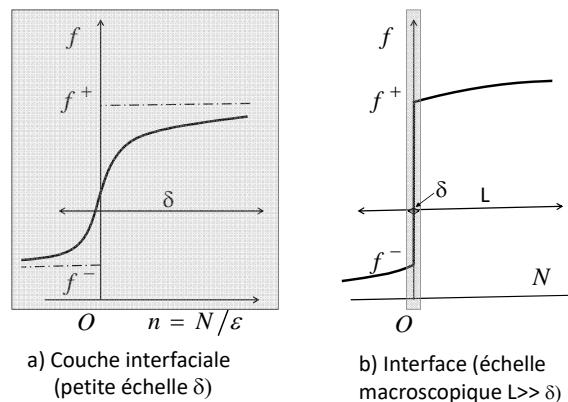
La notion générale d'interface suppose un contact ou une séparation entre des objets matériels. Si la notion d'interface en physique peut se rapporter à des situations de natures très différentes, il se dégage aussi des points communs. Parmi ceux-ci nous nous intéresserons particulièrement aux grandeurs surfaciques et aux équations de bilan, c'est-à-dire aux équations aux dérivées partielles qui relient ces grandeurs, en interaction avec celles des milieux en contact.

Il est en effet possible sous certaines conditions, moyennant des hypothèses simplificatrices, d'établir pour les interfaces des équations de bilan des grandeurs physicochimiques - masse des constituants, masse totale, quantité de mouvement, énergie, entropie - sous une forme unique comme on le fait pour les milieux continus 3D fluides ou solide. Nous verrons que cela nécessite une exploration intérieure à petite échelle de l'interface dans son épaisseur et une intégration des résultats obtenus dans la direction normale.

### 1.1. Interface en physique et surface géométrique

« Interface » évoque une surface de séparation. Mais si le terme de surface a une signification précise en mathématiques en tant que variété bidimensionnelle douée de propriétés géométriques, la définition des surfaces de discontinuité est à compléter en mécanique et plus généralement en physique ou en chimie.

Ainsi, dès que ladite interface présente des propriétés physiques internes telles que la tension de surface, ou qu'elle modifie les échanges entre les milieux qu'elle sépare, ou encore qu'elle soit le siège de productions de diverses natures, il ne s'agit plus d'une simple surface de séparation.



**Figure 1.** Couche interfaciale et interface. a) Zone rectangulaire grisée obtenue en dilatant en abscisse la partie grisée de la figure b) : la croissance brusque de  $f$  est remplacée par une croissance continue entre  $f^-$  et  $f^+$ .

D'autre part la question de l'échelle d'observation intervient. L'interface apparaît comme une surface de discontinuité à l'échelle macroscopique mais elle peut devenir un milieu continu à plus petite échelle. Et si on l'observe à une échelle encore plus petite la continuité laisse la place aux discontinuités atomique et moléculaire et à leurs constituants les particules élémentaires<sup>i, ii</sup>.

Pour le mécanicien la description macroscopique est une nécessité pour modéliser un problème. Cependant il lui faut parfois descendre à une échelle très petite à l'intérieur des objets pour en comprendre le comportement.

D'ailleurs s'il en est ainsi pour les interfaces, c'est aussi le cas pour les volumes. Le mécanicien et le thermodynamicien explorent volontiers le niveau moléculaire pour comprendre le comportement des gaz, des liquides ou des solides. L'application de lois de la mécanique aux objets à l'échelle moléculaire permet d'établir les lois de comportement macroscopiques de la mécanique des milieux continus par le biais des théories statistiques moyennant des approximations. Équation de Boltzmann, théorie de Fermi, hiérarchie de BBGKY sont d'un usage courant chez ces scientifiques, et les mesures expérimentales fournissent les données permettant d'utiliser les modélisations ainsi élaborées.

Il en sera de même à propos des interfaces. Celles-ci peuvent être considérées comme des surfaces douées de propriétés physiques à l'échelle macroscopique, mais si on les regarde à beaucoup plus petite échelle au moyen de puissants microscopes, on verra qu'il se passe bien des choses différentes de l'échelle macroscopique. Que l'on aille ou non jusqu'à l'échelle moléculaire, il y a bien une épaisseur à ce qui nous apparaît comme une simple surface géométrique. Nous conviendrons donc de parler d'épaisseur interfaciale et de *zone interfaciale* - ou de *couche interfaciale* - lorsque l'on étudie finement l'intérieur de l'interface<sup>iii</sup>. Cette exploration se fera en dilatant une seule échelle, celle de l'épaisseur, c'est-à-dire dans la direction normale à la surface. On laisse donc inchangées les échelles dans les autres directions qui sont, elles tangentielles à la surface.

La figure 1 illustre le cas classique d'une zone interfaciale d'épaisseur  $\delta$  très petite devant la longueur caractéristique  $L$  des autres phénomènes physiques observés.

Intervient alors la notion de milieu continu. Il n'est pas toujours nécessaire d'aller jusqu'à l'échelle moléculaire (par définition pas très continue) pour modéliser ce qui se passe dans une zone interfaciale. Par exemple la tension capillaire s'explique bien en considérant que la zone interfaciale est un milieu continu ayant des propriétés descriptibles en théorie du second gradient. Cela ne signifie pas qu'il ne faille pas aller à encore plus petite échelle si l'on veut déterminer les valeurs des coefficients internes, mais pas forcément si l'on ne s'intéresse qu'à la forme des lois de comportement.

Cela est vrai aussi pour le volume. En effet, les lois déduites de la théorie du premier gradient conduisent bien à l'expression du tenseur des contraintes. Mais ce premier gradient ne suffit pas à faire apparaître les comportements interfaciaux et en particulier la tension capillaire. Il faut aller jusqu'au second gradient pour cela.

Rappelons ici que la méthode des puissances virtuelles appliquée aux milieux continus postule que la puissance virtuelle des efforts intérieurs s'exerçant dans un volume de contrôle ( $\mathcal{V}$ ) est l'intégrale de volume d'une fonction  $p_{(i)}^*$  qui est une forme linéaire de la vitesse virtuelle  $\mathbf{v}^*$  et de ses dérivées<sup>iv</sup>. Dans la théorie du premier gradient on se limite à :  $p_{(i)}^* = \mathbf{A} \cdot \mathbf{v}^* + \mathbf{B} : \nabla \otimes \mathbf{v}^*$  où  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  sont des coefficients tensoriels d'ordres 1 et 2. En théorie du second gradient, on ajoute un terme avec un coefficient tensoriel d'ordre 3 de sorte que la puissance virtuelle volumique s'écrit :  $p_{(i)}^* = \mathbf{A} \cdot \mathbf{v}^* + \mathbf{B} : \nabla \otimes \mathbf{v}^* + \mathbf{C} : \nabla \otimes (\nabla \otimes \mathbf{v}^*)$ .

## 1.2. Notion d'équilibre dans le domaine des interfaces

Les séparations de phase peuvent être observées à l'équilibre thermodynamique dans des situations de repos. Par exemple une interface à l'équilibre entre un liquide et un gaz peut se présenter à

l'équilibre et l'on considère alors sa tension capillaire. On considère aussi l'équilibre du liquide en présence de sa vapeur. De même l'équilibre thermodynamique est une référence pour les systèmes solide-liquide et aussi pour les phases solides lorsqu'il y en a plusieurs. La présence de contraintes externes au système, de nature mécanique ou thermique, peut conduire à des écarts à l'équilibre plus ou moins importants. Pour étudier ces systèmes l'on fait appel aux notions d'état local et d'équilibre local. On entre dans le domaine de la thermodynamique des processus irréversibles<sup>v,vii,viii</sup>.

Mais il est des systèmes avec interfaces - que nous appellerons *interfaces généralisées* - qui ne présentent pas d'état d'équilibre de référence. C'est le cas des flammes minces ou des ondes de choc par exemple qui peuvent être localisées comme surfaces de discontinuité à l'échelle macroscopique. Cependant l'on peut toujours étudier ces interfaces hors d'équilibre thermodynamique en partant de la notion d'équilibre local. Même si le traitement de ces situations ne nécessite pas nécessairement de faire appel aux bilans d'interface, il est satisfaisant de constater une similitude d'analyse et d'écriture avec le cas des interfaces de séparation de phase hors d'équilibre.

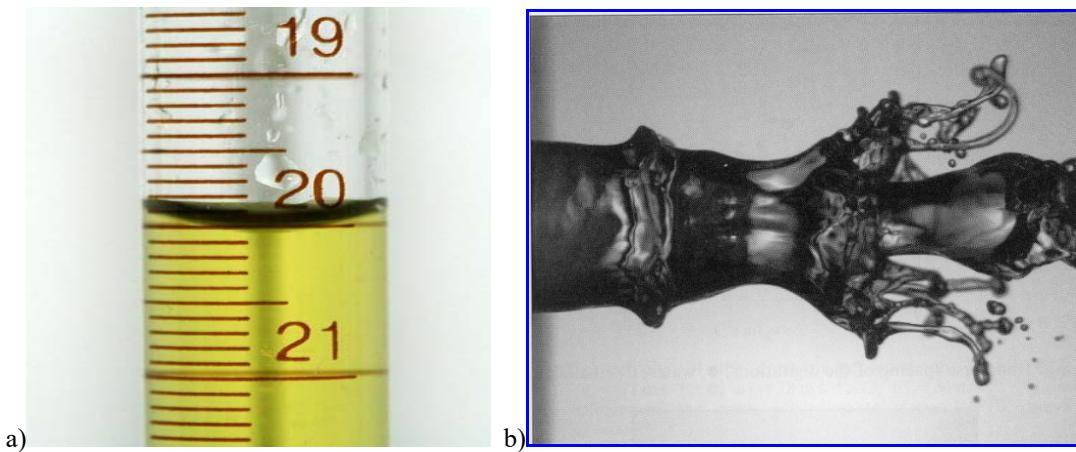
## 2. Quelques exemples d'interfaces

### 2.1. Interface de séparation et de changement de phase fluide

Il s'agit de la séparation entre un liquide et un gaz - qui peut éventuellement être ou contenir la vapeur du liquide -, ou entre deux liquides non miscibles au repos.

La figure 2a illustre bien une situation classique où la surface de séparation est incurvée à cause de la tension de surface (ou tension capillaire) en présence d'une paroi cylindrique constituant une condition limite pour l'interface. La ligne de contact constitue le ménisque.

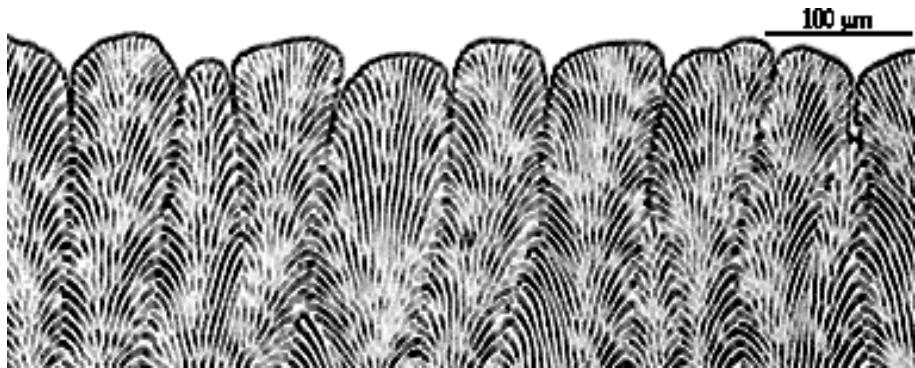
La figure 2b montre une interface en mouvement résultant de l'injection annulaire d'un liquide dans un gaz à grande vitesse. Outre l'interface capillaire on constate la présence de digitations, appelées aussi fibres, filaments ou ligaments.



**Figure 2.** Interface capillaire. a) Surface capillaire au repos entre un liquide et un gaz au-dessus, tous deux contenus dans un tube de verre gradué. b) Surface capillaire en mouvement instable en sortie d'un injecteur, laissant apparaître des filaments liquides<sup>ix</sup>.

### 2.2. Interface de solidification

Les interfaces de solidification sont le siège de tensions de surface. Pour étudier la croissance orientée des eutectiques une méthode originale et féconde est celle du champ de phase<sup>x</sup>.



**Figure 3.** Colonies eutectiques<sup>xii</sup> dans CBr<sub>4</sub>-C<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub>-Naphthalène,  $V = 31 \mu\text{m s}^{-1}$ .

Les méthodes de champ de phase utilisées facilitent la résolution de problèmes d'interface en lissant plus ou moins artificiellement la traversée des discontinuités. Dans leur forme récente elles permettent de tenir compte des anisotropies cristallines<sup>xiii</sup>.

Des méthodes de champ de phase servent également à calculer la croissance de corps purs en présence d'impuretés pouvant donner naissance à des interfaces épaisses contenant des structures dendritiques. Les échelles d'analyse considérées dépendent du problème à traiter et conduisent à utiliser des fonctions de phase spécifiques.

### 2.3. Interfaces généralisées

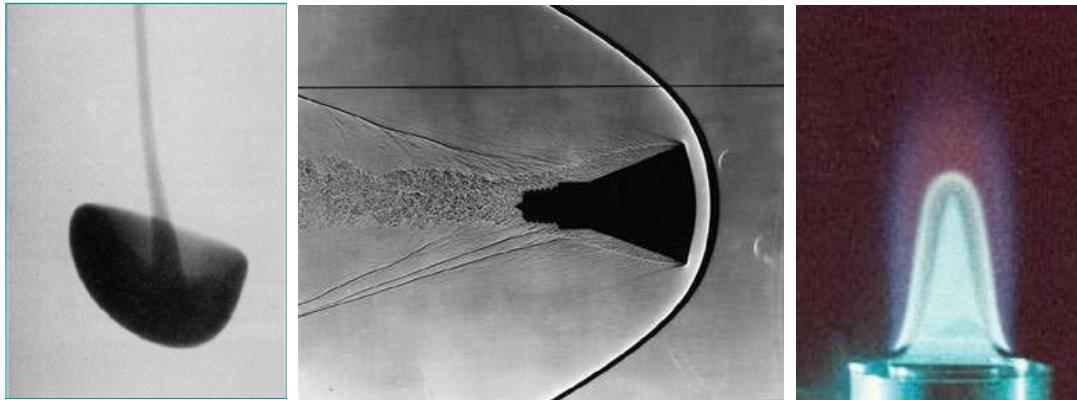
Des zones à fort gradient laissent apparaître des surfaces sans qu'il y ait de changement de phase.

La figure 4a montre une goutte thermique de même nature que le liquide qui la contient, mais à une température nettement plus basse, donc à masse volumique plus élevée, ce qui explique sa chute vers le bas.

La figure 4b montre un choc taché à l'avant d'un satellite au cours de sa rentrée dans l'atmosphère.

La figure 4c résulte de l'observation d'une flamme de pré-mélange sous basse pression, la surface au-dessus est la zone très mince de réaction, la surface du dessous est une isotherme dans le mélange non brûlé. À la pression normale, l'ensemble des deux surfaces et la zone qui les sépare se confondent en une seule interface, constituant la flamme.

Les liquides miscibles, mis en contact à partir de leur état pur, font apparaître des interfaces dont l'épaisseur croît au cours du temps avec la diffusion mutuelle des fluides. Leur étude expérimentale révèle l'existence d'une tension superficielle effective, certes moins élevée que la tension capillaire entre fluides immiscibles, mais cependant non négligeable. Une telle tension de surface existe aussi probablement en fluide pur soumis à de forts gradients thermiques. Cela explique certainement la forme de la goutte thermique de la figure 3A. Des calculs effectués sur les fluides supercritiques montrent la possibilité de phénomènes analogues durant la propagation d'un champ thermique.



**Figure 4.** Exemples d'interfaces généralisées : a) Goutte thermique dans un liquide. b) Onde de choc à l'avant d'un corps de rentrée. c) Flamme de pré-mélange sous basse pression observée en plan laser. La zone inférieure en clair est limitée par une surface isotherme (la température des gouttes d'huile d'ensemencement qui s'évaporent sous l'effet de la chaleur libérée au niveau de la surface de réaction)<sup>xiii</sup>.

Ainsi les gradients élevés de masse volumique ne sont pas les seuls à pouvoir générer des tensions capillaires. Les gradients de concentration et les gradients thermiques peuvent également être à l'origine de tensions superficielles effectives. La théorie du second gradient est certainement un moyen d'expliquer ces comportements.

En ce qui concerne les ondes de choc et de déflagration, des caractéristiques autres que la tension superficielle se manifestent. Ainsi les taux d'étirement surfaciques sont des éléments à prendre en compte. En combustion turbulente, certains modèles de flamme mettent en jeu les fractions volumiques d'aires interfaciales.

Nous avons besoin d'outils mathématiques pour étudier les interfaces et les zones interfaciales. Leurs modélisations exigent souvent des hypothèses simplificatrices.

### 3. Description mathématique d'une couche interfaciale

Il existe certainement dans la réalité de multiples structures de couches interfaciales et membranaires. Nous choisissons de nous limiter à des couches descriptibles par des familles continues de surfaces ( $s$ ) déformables au cours du temps. La couche interfaciale – dilatée – est limitée de part et d'autre par deux surfaces particulières de la famille : une surface inférieure ( $s^-$ ) qui la sépare du milieu continu situé en dessous, et une surface supérieure ( $s^+$ ) qui la sépare du milieu continu situé au-dessus<sup>1</sup>. Les lois d'état et, plus généralement, les lois de comportement du milieu de la couche interfaciale et celles des milieux volumiques adjacents peuvent être analogues ou très différentes.

La présente modélisation passe par la connaissance des équations de bilan des propriétés physiques et des lois de comportement de chaque milieu matériel. Mais l'objectif principal sera d'établir les lois d'interface en passant de la description microscopique de la couche interfaciale qui a une certaine épaisseur, à la description macroscopique de l'interface qui elle est une surface sans épaisseur.

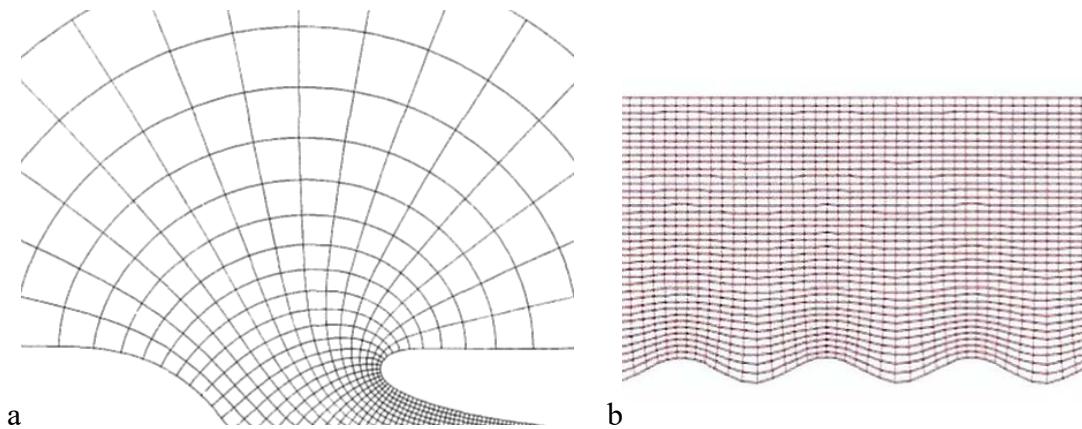
Il y a donc dans cette opération un changement d'échelle et une intégration à travers l'épaisseur de la zone interfaciale.

D'autre part l'on pourra décrire les zones interfaciales dans des systèmes de coordonnées curvilignes où les familles continues de surfaces ( $s$ ) déformables au cours du temps seront des surfaces de coordonnées. On peut considérer cela comme un véritable maillage de la zone interfaciale –

<sup>1</sup> Le choix des désignations « en dessous » et « au-dessus » est arbitraire.

rappelons le, dilatée en épaisseur - qu'il sera possible d'utiliser pour la résolution numérique, mais dont nous nous servirons ici surtout pour des considérations analytiques.

Dans le domaine de la simulation numérique de la mécanique des fluides régie par les équations de Navier-Stokes, on utilise fréquemment des maillages orthogonaux associés à des méthodes de type « différences finies ». En effet dans un grand nombre de problèmes, les parois sont représentées par des courbes constituant une donnée primordiale. Il serait alors dangereux de vouloir en rendre compte par une simple succession de « marches d'escalier », si bien que l'on est tout naturellement conduit à utiliser des maillages curvilignes orthogonaux. Ceux-ci peuvent être « fabriqués » par une transformation conforme analytique. Dans le cas général où la forme des parois est définie numériquement, un programme particulier élabore le maillage orthogonal qui sera utilisé pour le calcul de l'écoulement et définit tous les éléments de la métrique correspondante<sup>xiv</sup>. La figure 5 donne des exemples de tels maillages<sup>xv</sup>. Les maillages sont générés pour des écoulements 2D plans ou de révolution car des problèmes d'unicité subsistent dans le cas de calculs 3D.



**Figure 5.** Maillages orthogonaux : a) Exemple de système de coordonnées curvilignes défini numériquement pour le calcul d'un écoulement de confluence. Extraits de Huffenus<sup>xiv</sup>. b) Développement d'une méthode lagrangienne de simulation d'écoulements turbulents à phases séparées. Extrait de la thèse de Irène Renaud-Assemat<sup>xv</sup>.

Rappelons qu'il s'agit là de calculs extérieurs ou intérieurs à des limites fixes ou mobiles et déformables tels que des surfaces de bulles, des gouttes ou des surfaces de contact, souvent modélisées par des fonctions splines. Citons à ce propos les travaux de Ryskin et Leal<sup>xvi,xvii</sup>, Duraiswami et Prosperetti<sup>xviii</sup>, Kervella *et al.*<sup>xix</sup>.

Néanmoins les méthodes utilisées pourraient être transposées à des zones interfaciales moyennant certes des aménagements concernant la définition des limites souvent inconnues a priori et le caractère 3D déjà signalé.

### 3.1. Gradient normal et gradient tangentiel

Soit une fonction  $f(x,t)$ , continue et dérivable prenant des valeurs en tout point d'un volume ( $V$ ) et à tout instant  $t$ . On peut considérer, dans un repère cartésien donné, de coordonnées  $x, y, z$ , les dérivées partielles de  $f$  par rapport au temps et à l'espace :  $\partial f / \partial t$  et  $\partial f / \partial x, \partial f / \partial y, \partial f / \partial z$  formant le vecteur gradient de  $f$  (noté usuellement  $\text{grad}(f)$  ou encore  $\nabla f$ , ce qui se prononce nabla  $f$ ).

Le vecteur  $\mathbf{N}$  désigne la normale unitaire à une surface ( $S$ ) et  $f(x,t)$  une fonction de l'espace et du temps prenant valeurs en tout point de la surface ( $S$ ) dans le volume ( $V$ ). L'orientation de cette normale est a priori arbitraire. Elle est parfois déterminée par la physique du problème.

Admettons l'existence des dérivées partielles de  $f$  en un point quelconque de  $(s)$ . On trouve comme dans le volume les dérivées partielles  $\partial f / \partial t$  et  $\nabla f$ , mais on peut décomposer le vecteur gradient en une composante normale et une composante tangentielle.

Le gradient normal de  $f$  s'écrit  $\partial f / \partial N = \nabla_{\perp} f = (\mathbf{N} \cdot \nabla f) \mathbf{N}$  et l'on peut définir le gradient tangentiel ou gradient parallèle  $\nabla_{\parallel} f = (\mathbf{1} - \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \cdot \nabla f$  où  $\mathbf{1}$  est le tenseur unité. On trouve bien entendu :  $\nabla f \equiv \nabla_{\parallel} f + \nabla_{\perp} f$ .

Ces définitions sont valables quel que soit l'ordre tensoriel de la fonction  $f(\mathbf{x}, t)$ , en particulier si  $f$  est un scalaire, un vecteur ou un tenseur d'ordre 2.

On pourra en particulier considérer comme fonction  $f(\mathbf{x}, t)$  le champ des normales unitaires  $\mathbf{N}(\mathbf{x}, t)$  à la surface  $(s)$ , qui se définit à partir des équations de la surface.

$\mathbf{X}$  étant un vecteur et  $\mathbf{N}$  le vecteur normal unitaire à la surface, on utilisera les notations suivantes :

$$\mathbf{X}_{\parallel} = (\mathbf{1} - \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \cdot \mathbf{X}, \quad \mathbf{X}_{\perp} = (\mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \cdot \mathbf{X}, \quad X_{\perp} = \mathbf{N} \cdot \mathbf{X} \quad [1]$$

### 3.2. Structure et cinématique d'une couche interfaciale

Soit une propriété physique particulière  $\varphi$  définie en tout point du volume d'une couche interfaciale. Dans le présent modèle, on admet que la couche interfaciale peut être décrite comme un ensemble de surfaces  $(s)_{\varphi}$  à  $\varphi$  constant. Sur chaque surface  $(s)_{\varphi}$  de la famille  $\varphi$  est donc constant et  $\nabla_{\parallel} \varphi$  est nul. En revanche,  $\varphi$  varie d'une surface à l'autre et  $\nabla_{\perp} \varphi$  est donc différent de zéro<sup>2</sup>.

Il faut admettre en fait que la surface  $(s)$  en mouvement fait partie d'une famille continue de surfaces définies dans un volume contenant la couche interfaciale d'épaisseur  $\delta$ . A l'échelle  $L$  en revanche, l'interface peut bien être représentée comme une simple surface.

La couche interfaciale sera comprise entre deux surfaces de la famille notées  $(s^-)_{\varphi}$  et  $(s^+)_{\varphi}$ .

Le champ de surfaces peut être défini a) intrinsèquement en variables cartésiennes par une fonction  $F(x, y, z, t)$ , ou alors b) en coordonnées curvilignes orthogonales.

– Dans le cas a) on considère une surface de base  $(s_0)$  d'équation  $F(\mathbf{x}, t) = 0$  et sur une certaine épaisseur de part et d'autre une famille de surfaces parallèles  $(s_{\lambda})$  définies par :

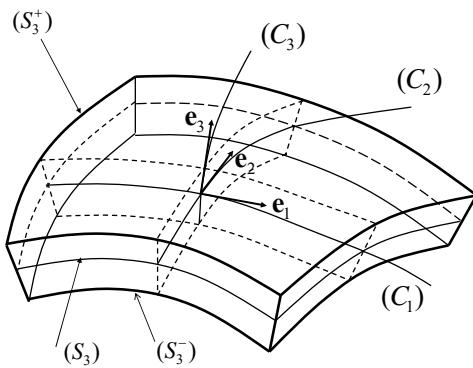
$$F_{\lambda}(\mathbf{x}, t) = F_0(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{N}, t); \quad F_{\lambda}(\mathbf{x}, t) = 0, \text{ avec } \mathbf{N} = \nabla F_0 / |\nabla F_0| \text{ et } \lambda \text{ constante comprise entre } -\varepsilon \text{ et } +\varepsilon.$$

– Dans le cas b) il s'agit de la famille de surfaces de coordonnée  $(s_3)$  à  $x_3 = Cte$  (voir Figure 6) du système définissant les coordonnées curvilignes orthogonales :

$$\begin{cases} x = x(x_1, x_2, x_3, t) \\ y = y(x_1, x_2, x_3, t) \\ z = z(x_1, x_2, x_3, t) \end{cases} \quad [2]$$

ou encore  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(x_1, x_2, x_3, t) = \mathbf{x}(\xi, t)$ . On pose :  $\mathbf{h}_i = \frac{\partial \vec{\mathbf{x}}}{\partial x_i}, |\mathbf{h}_i| = h_i, \mathbf{h}_i = h_i \mathbf{e}_i$  et l'on a :  $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}$ .

<sup>2</sup> Prenons par exemple une interface capillaire : à l'échelle  $L$  c'est une surface capillaire, alors qu'à l'échelle microscopique  $\delta$  on peut considérer la masse volumique locale  $\rho$  et les surfaces  $S_{\rho}$  à  $\rho$  constant.



**Figure 6.** Surfaces de coordonnées et couche interfaciale. Les  $(C_i)$  sont les courbes de coordonnées.

La famille ainsi définie dépend du temps. L'ensemble de surfaces qu'elle constitue se meut en se déformant. Dans le second cas b), les surfaces de la famille ne sont pas obligatoirement parallèles. Elles ne le sont et le restent que si la condition  $\partial \mathbf{e}_3 / \partial x_3 = 0$ , où  $\mathbf{e}_3$  est le vecteur unitaire de la coordonnée curviligne  $x_3$  (voir la figure 6), est vérifiée à tout instant. Dans le premier cas a), il faut prendre  $\lambda$  fonction de la position si l'on ne veut pas que les surfaces soient parallèles.

Appliquons maintenant les opérateurs de dérivation définis à la section 3.1. Avec  $f = N$ , on montre que  $|\nabla \cdot N|$  est égal à la courbure moyenne  $(1/R_1 + 1/R_2)$  de la surface au point et à l'instant considérés.

Portons maintenant notre attention sur le temps  $t$ . On peut supposer que tout point d'une surface  $(S)$  est animé d'une vitesse  $\mathbf{w}(\mathbf{x}, t)$ . Il est possible alors d'accéder aux taux de déformation de cette surface, supposée constituée des points de vitesse  $\mathbf{w}$ . On définit des vitesses normale  $\mathbf{w}_{\perp} = w_{\perp} \mathbf{N}$  (avec :  $w_{\perp} = \mathbf{w} \cdot \mathbf{N}$ ) et tangentielle  $\mathbf{w}_{\parallel} = (\mathbf{I} - \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \cdot \mathbf{w}$ . Cela conduit en particulier au taux d'étirement  $\nabla_{\parallel} \cdot \mathbf{w}$  de la surface  $(S)$  ainsi définie. Cette définition de la vitesse de surface relève de la mécanique et repose sur celle de point matériel.

En ce qui concerne l'aspect géométrique, seule la vitesse normale  $\mathbf{w}_{\perp}$  est définie connaissant  $F(\mathbf{x}, t)$ . Avec la définition intrinsèque on trouve  $w_{\perp} = -\frac{\partial F(x, y, z, t) / \partial t}{|\nabla F|}$ .

En revanche si les points de la surface sont définis par  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi, t)$  avec  $\xi = (x_1, x_2, x_3)$ , la vitesse de ces points ainsi est, à l'instant  $t$  :  $\mathbf{w} = \partial \mathbf{x}(\xi, t) / \partial t$ . Comme précédemment on pourra considérer  $\mathbf{w}_{\perp}$  qui est la vitesse d'avancement de la surface géométrique qui est à distinguer du mouvement de glissement tangentiel de l'interface sur elle-même, caractérisé par  $\mathbf{w}_{\parallel}$ .

Etudier l'intérieur de la couche interfaciale implique de connaître sa structure. Elle peut être plus ou moins courbée et d'épaisseur non homogène. Elle sera choisie en fonction de la connaissance de la physicochimie interfaciale, qui n'est pas toujours connue précisément.

### 3.3. Grandeurs volumiques et grandeurs surfaciques.

Il s'agit ici de rappeler les grandeurs extensives – et leurs valeurs massiques et volumiques – utilisées dans le volume (y compris dans celui de la couche interfaciale) et de définir les quantités surfaciques correspondantes.

Les principales grandeurs extensives de volume  $F$  sont la masse totale  $M$ , les masses  $M_j$  des constituants (s'il s'agit d'un mélange), le volume  $\mathcal{V}$ , la quantité de mouvement  $M \mathbf{v}$ , l'énergie interne  $E$ ,

l'énergie cinétique  $K$ , l'entropie  $S$ . On utilise la masse volumique du mélange  $\rho$  (symboliquement  $M/V$ ), les masses volumiques des espèces  $\rho_j = M_j/V$ . Les grandeurs massiques  $f = F/M$  sont  $v, e, k, s$  (respectivement le vecteur vitesse barycentrique, l'énergie interne, l'énergie cinétique et l'entropie massiques). On définit aussi le vecteur flux  $\mathbf{J}_{VF}$  et le taux de production  $\dot{W}_F$ .

La masse surfacique  $\rho_a$  est définie par :  $\rho_a = \int_{N_-}^{N_+} \rho dN$ . Cela permet de définir la quantité surfacique  $f_s$  correspondant à la grandeur  $F$  :  $\rho_a f_s = \int_{N_-}^{N_+} \rho f dN$ , ainsi que les flux et productions de surface :  $\mathbf{J}_{VFa} = \int_{N_-}^{N_+} \mathbf{J}_{VF} dN$ ,  $\dot{W}_{Fa} = \int_{N_-}^{N_+} \dot{W}_F dN$ . Remarquons qu'il faut bien distinguer les indices  $a$  et  $s$ . En effet le premier s'adresse aux quantités par unité d'aire alors que le second signifie simplement que la quantité considérée est une moyenne pondérée locale à l'interface, c'est-à-dire en traversant la zone interfaciale.

### 3.4. Bilans d'interface.

On considère une grandeur extensive  $F$  telle que la masse  $M_j$  d'espèce  $j$  dans le mélange, la masse totale  $M = \sum_j M_j$ , la quantité de mouvement - partielle  $M_j \mathbf{v}_j$  ou totale  $M \mathbf{v} = \sum_j M_j \mathbf{v}_j$ , l'énergie interne  $E$  ou l'entropie  $S$ .

On part de l'équation de bilan en volume de la grandeur  $F$  :

$$\frac{d(\rho f)}{dt} + \rho f \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{J}_F = \dot{W}_F \quad [3]$$

où  $f = F/M$  est la quantité locale par unité de masse,  $\mathbf{J}_F$  le flux unitaire barycentrique et  $\dot{W}_F$  le taux de production volumique.

En introduisant le flux unitaire à travers une surface fixe :  $\mathbf{J}_F = \mathbf{J}_F + \rho f \mathbf{v}$ , une autre forme de l'équation du bilan local est obtenue :

$$\frac{\partial(\rho f)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_F = \dot{W}_F \quad [4]$$

Si l'on introduit maintenant le flux unitaire à travers une surface qui suit un mouvement de vitesse  $\mathbf{V}$  :

$\mathbf{J}_{VF} = \mathbf{J}_F + \rho f (\mathbf{v} - \mathbf{V})$ , on obtient la forme suivante :

$$\frac{d_v(\rho f)}{dt} + \rho f \nabla \cdot \mathbf{V} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{VF} = \dot{W}_F \quad [5]$$

L'établissement des lois de bilan d'interface passe par une mise en forme de l'équation de bilan 3D (couche interfaciale, Figure 6) qui peut s'écrire :

$$\frac{d_v(\rho f)}{dt} + \rho f \nabla_{//} \cdot \mathbf{V} + \nabla_{//} \cdot \mathbf{J}_{VF} + \frac{\partial J_{VF\perp}}{\partial N} = \dot{W}_F \quad [6]$$

avec :  $\mathbf{J}_{VF} = \mathbf{J}_F + \rho f (\mathbf{v} - \mathbf{V})$ ,  $\mathbf{J}_{VF} = \mathbf{J}_{VF//} + \mathbf{J}_{VF\perp}$ , et aussi  $\mathbf{J}_{VF//} = (\mathbf{1} - \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \cdot \mathbf{J}_{VF}$  et  $\mathbf{J}_{VF\perp} = J_{VF\perp} \mathbf{N}$ ,

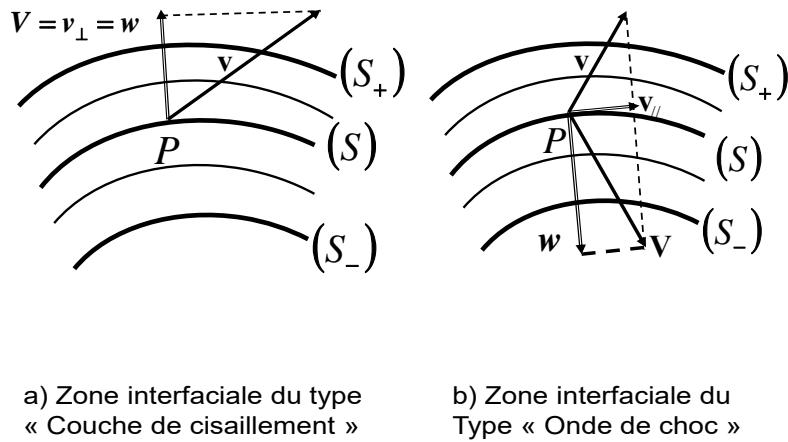
ce qui donne :  $\nabla_{//} \cdot \mathbf{J}_{VF} = \nabla_{//} \cdot \mathbf{J}_{VF//} + J_{VF\perp} \nabla \cdot \mathbf{N}$ ,  $\nabla_{\perp} J_{VF\perp} = \partial J_{VF\perp} / \partial N$

L'étape suivante consiste à intégrer les deux membres de l'équation de bilan en volume précédente sur l'épaisseur de la couche interfaciale. Notons que l'on suppose que certaines quantités se conservent

le long de la courbe normale aux surfaces ( $S$ ) issue du point  $P$  considéréxx. On suppose aussi que ces surfaces sont parallèles entre-elles. Ces hypothèses sont vérifiées - en particulier en ce qui concerne le vecteur vitesse  $\mathbf{V}$  - pour les deux types de zone interfaciale de la figure 7. L'équation de bilan d'interface obtenue est la suivante :

$$\frac{d_s(\rho_a f_s)}{dt} + \rho_a f_s \nabla_s \cdot \mathbf{V}_s + \nabla_s \cdot \mathbf{J}_{VFa} + [J_{VF\perp}]^+ = \dot{W}_{Fa} \quad [7]$$

avec les définitions données plus haut (§ 3.3) pour les quantités interfaciales indicées  $a$  et  $S$ .



**Figure 7.** Définition du vecteur vitesse  $\mathbf{V}$  pour deux types courants de couche interfaciale (représentation plane).

On remarquera l'analogie avec l'équation de bilan volumique [5], au terme de saut près. Ce terme égal à :

$[J_{VF\perp}]^+ = [\mathbf{J}_{VF}^+ - \mathbf{J}_{VF}^-] \cdot \mathbf{N}$  , caractérise l'accroissement algébrique des flux normaux de la grandeur  $F$  lors de la traversée de l'interface en suivant le mouvement de vitesse  $\mathbf{V}$  .

L'équation générale de bilan d'interface s'applique aux diverses grandeurs envisagées et l'on en déduit des tableaux d'équations de bilan<sup>iii, xiii, xxii</sup> que nous reproduisons ci-dessous pour un mélange classique.

<b>Equation de continuité des espèces</b>	$\frac{d_s(\rho_a Y_{js})}{dt} + \rho_a Y_{js} \nabla_s \cdot \mathbf{v}_s + \nabla_s \cdot \mathbf{J}_{Dja} + [J_{Dj\perp} + \rho_j u_\perp]^+ = \dot{W}_{ja}$
<b>Equation de continuité</b>	$\frac{d_s \rho_a}{dt} + \rho_a \nabla_s \cdot \mathbf{v}_s + [\rho u_\perp]^+ = 0$
<b>Equation de la quantité de mouvement</b>	$\frac{d_s(\rho_a \mathbf{v}_s)}{dt} + \rho_a \mathbf{v}_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}_s - \nabla_s \cdot \boldsymbol{\sigma} + [\mathbf{P} \cdot \mathbf{N} + \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) u_\perp]^+ = \sum_j \rho_a Y_{js} \mathbf{f}_{js}$
<b>Equation de l'énergie</b>	$\frac{d_s(\rho_a e_s)}{dt} + \rho_a e_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}_s + \nabla_s \cdot \mathbf{q}_a + [q_\perp + \rho e u_\perp]^+ = \sum_j \mathbf{J}_{Dja} \cdot \mathbf{f}_{js} + \boldsymbol{\sigma} : \nabla_s \otimes \mathbf{v}_s - \left[ \frac{1}{2} \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)^2 u_\perp + (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{N} \right]^+$
<b>Equation de l'entropie</b>	$\frac{d_s(\rho_a s_s)}{dt} + \rho_a s_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}_s + \nabla_s \cdot \mathbf{J}_{sa} + [J_{S\perp} + \rho s u_\perp]^+ = \dot{W}_{sa}$

**Tableau 1.** Equations du bilan des interfaces dont les variables de surface obéissent à des relations thermodynamiques classiques, avec :  $\mathbf{V}_s = \mathbf{v}_s$ ,  $u_\perp = v_\perp - v_{s\perp}$ , et  $J_{Dj}$  étant le flux de diffusion de l'espèce  $j$ .

### 3.5. Lois de comportement

Les diverses grandeurs intervenant dans les équations du tableau 1 ne sont pas indépendantes les unes des autres.

Tout d'abord, il y a l'ensemble des lois de comportement des milieux en contact avec l'interface : les équations d'état d'abord, puis les lois de comportement complémentaires. Les quantités thermodynamiques obéissent aux équations d'état des mélanges fluides et sont supposées vérifier les relations de Gibbs et de Gibbs-Duhem. L'énergie interne massique  $e$  est une fonction de l'entropie massique  $s$  et de la masse volumique  $\rho$  et l'on a :  $e = e(s, \rho)$  vérifiant la relation de Gibbs :  $de = T ds - p d(1/\rho)$ .

Les autres milieux en contact - éventuellement des solides comme dans la solidification des alliages - vérifient des relations thermodynamiques qui leur sont spécifiques. Les lois de comportement complémentaires régissent les processus dissipatifs : viscosité, conduction thermique, diffusion des espèces et réactions chimiques. Nous supposons connues les lois de comportement des milieux continus en contact avec l'interface.

Les grandeurs d'interface indiquées  $_a$  ou  $_s$  posent d'autres problèmes et leurs relations restent souvent à déterminer. Plusieurs situations se présentent suivant que l'on connaît ou non les propriétés locales, thermodynamiques et mécaniques, de la couche interfaciale :

- Si l'on connaît les propriétés locales internes de la couche interfaciale, on peut calculer ce qui se passe par intégration suivant la normale, comme on l'a fait formellement dans les sections 1.1 et 3.3 pour obtenir les équations du tableau 1. On étudie ainsi des interfaces généralisées telles que les ondes de discontinuité, les couches limites ou les couches de mélange. Des astuces permettent souvent d'éviter les calculs complexes en analysant les évolutions à l'échelle  $L$  sans avoir besoin de recourir à l'analyse à l'échelle  $\delta$ . Ou bien on se contente de faire des raccordements asymptotiques entre les échelles.

- Si on ne connaît pas les propriétés locales à la petite échelle  $\delta \ll L$ , on est conduit à faire des hypothèses qu'il faudra vérifier a posteriori par le calcul ou l'expérimentation.

Il faut remarquer ici que les couches interfaciales capillaires ne sont pas des fluides classiques, mais des fluides doués de capillarité interne. On peut montrer qu'une couche interfaciale de fluide classique ne conduit pas à une interface avec tension capillaire. La tension capillaire entre fluides non miscibles n'apparaît qu'à cette condition. On doit alors écrire que l'énergie interne est  $e = e(s, \rho, |\nabla \rho|^2)$ . La nouvelle relation de Gibbs devient :  $de = T ds - p d(1/\rho) + \lambda(\nabla \rho) \cdot d(\nabla \rho)$  où  $\lambda$  est le coefficient de capillarité interne. Seppecher a mis en évidence cela<sup>xxi</sup> et a déterminé la relation entre le coefficient de capillarité interne et la tension superficielle :

$$\sigma = - \int_{N^-}^{N^+} p^*(\xi) d\xi \approx \int_{N^-}^{N^+} \lambda |\nabla \rho|^2 d\xi \quad [8]$$

La méthode utilisée est celle du second gradient<sup>iii</sup>.

Une interface capillaire en mouvement peut présenter en plus d'une tension capillaire thermodynamique scalaire  $\sigma$ , un tenseur de tensions superficielles mécanique de composantes tangentes à la surface :  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{//}$ .

Slattery<sup>xxii</sup> donne l'expression suivante, reportée dans le tableau 2, de la partie visqueuse de la tension superficielle d'une interface en mouvement possédant un tenseur de tensions capillaires :

$$\boldsymbol{\sigma}_v = \boldsymbol{\sigma} - \sigma \mathbf{1}_{//} = [(\kappa_a - \varepsilon_a) \nabla_s \cdot \mathbf{v}_s] \mathbf{1}_{//} + 2 \varepsilon_a \mathbf{D}_s \quad [9]$$

avec  $\mathbf{D}_s = \frac{1}{2} (\nabla_s \cdot \mathbf{v}_s) \mathbf{1}_{//} + \Delta_s$ , où  $\Delta_s$  est un tenseur 2D de trace nulle et où les coefficients de viscosité respectifs de cisaillement  $\varepsilon_a$  et d'aire  $\kappa_a$  sont des nombres réels non négatifs d'après le second principe de la thermodynamique. Ces viscosités superficielles sont fonction notamment du taux d'étirement  $\nabla_s \cdot \mathbf{v}_s$ .

Dans d'autres cas on tentera d'établir directement les lois de comportement en analysant l'expression de la production d'entropie interfaciale. Rappelons l'expression du taux de production d'entropie interfacial obtenu pour des mélanges fluides réactifs classiques<sup>xiii</sup> à partir des équations du tableau 1 et de la relation de Gibbs :

$$\begin{aligned} \dot{W}_{sa} = & - \sum_j \left( g_{js}/T_s \right) \dot{W}_{ja} + \left( 1/T_s \right) \boldsymbol{\sigma}_v : \nabla_s \otimes \mathbf{v}_s + \mathbf{q}_a \cdot \nabla \left( 1/T_s \right) - \sum_j \mathbf{J}_{ja} \left[ \nabla_s \left( g_{js}/T_s \right) - \mathbf{f}_j/T_s \right] \\ & + \left[ (q_\perp + \rho h u_\perp) (1/T - 1/T_s) \right] - \sum_j \left( J_{Dj\perp} + \rho (Y_j - Y_{js}) u_\perp \right) \left( g_j/T - g_{js}/T_s \right) \\ & - \left( 1/T_s \right) (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s) \cdot \boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{N} + \left( 1/2T_s \right) \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)^2 u_\perp \end{aligned} \quad [10]$$

Il faut parvenir à mettre en forme cette expression du taux de production d'entropie pour faire apparaître une suite de produits de forces généralisées par des flux généralisés. On repère ensuite les ordres tensoriels identiques 0, 1 et 2. Et, suivant les principes de la thermodynamique linéaire des processus irréversibles classique, on propose des relations linéaires de couplage entre les forces généralisées et les flux généralisés, supposés suffisamment petits. Apparaissent alors des matrices de coefficients phénoménologiques avec des relations de symétrie. C'est cette méthode qui a été tentée par Bertrand et Prud'homme<sup>xxiii</sup> avec un succès limité.

Mais il est des cas où les relations entre les flux et les forces généralisées qui en sont la cause ne sont pas linéaires. C'est en général le cas des taux de productions chimiques. On le constate aussi à propos des ondes de choc.

## 4. Quelques compléments et des exemples d'application

Les considérations qui suivent ont pour but de montrer l'intérêt de la notion d'interface en élargissant son champ d'application tout en relativisant sa pertinence. Nous donnerons en particulier des exemples d'interfaces généralisées.

### 4.1. Tension superficielle effective entre deux liquides miscibles

La théorie du second gradient vaut pour des couches fluides superposées ne diffusant pas l'une dans l'autre.

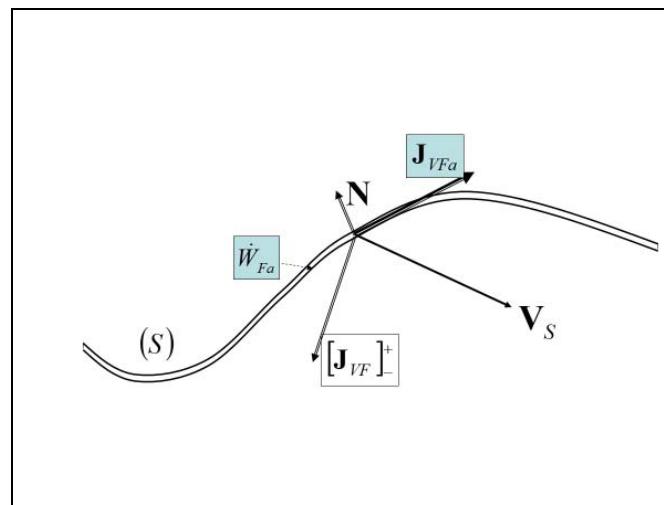
Mais on montre expérimentalement qu'une tension superficielle peut exister y compris en présence de diffusion mutuelle<sup>xxiv, xxv</sup>.

Par exemple, R. Defay et A. Sanfeld<sup>xxvi</sup> proposent une expression de la tension de surface en fonction des gradients de concentration des fluides a et b :  $\sigma = e^3 \int_{N^-}^{N^+} \sum_a \sum_b k_{ab} c'_a c'_b dz$ , où z est la direction perpendiculaire à l'interface d'épaisseur caractéristique  $e$ . La constante  $k_{ab}$ , qui reste à déterminer, ne dépend que de la nature des fluides.

Nous suggérons d'examiner l'applicabilité de la méthode du second gradient au cas des fluides miscibles. Dans ce cas nous proposons de remplacer la variable  $\nabla \rho$  par le gradient de fraction massique  $\nabla Y$  dans les équations de la couche interfaciale et d'appliquer la méthode du second gradient<sup>iii</sup> comme à la section 3.5.

### 4.2. Termes intervenant dans les bilans d'interface

Nous avons abordé des interfaces de types variés. Certaines n'existent qu'hors d'équilibre, en présence de fortes dissipations. Dissipations visqueuses et thermo-conductives pour l'onde de choc. Dissipations thermo-conductives, de diffusion de masse et de cinétique chimique hors d'équilibre pour les ondes de déflagration.



**Figure 8.** Les différents termes intervenant dans l'équation générale des interfaces [7], représentés ici pour une grandeur scalaire  $F$  :  $V_s$  vitesse composite locale d'interface,  $J_{VF_a}$  flux tangentiel d'interface,  $\dot{W}_{Fa}$  taux de production surfacique,  $[J_{VF}]_+ - [J_{VF}]_- = [J_{VF}]_+ \cdot N$  saut de flux volumique de  $F$  à la traversée de l'interface.

Chaque cas vérifie l'équation générale de bilan d'interface [7] :

$$\frac{d_s(\rho_a f_s)}{dt} + \rho_a f_s \nabla_s \cdot V_s + \nabla_s \cdot J_{VF_a} + [J_{VF}]_+ = \dot{W}_{Fa}$$

Cette équation a été établie au moyen de la démarche expliquée à la section 3.4. Certaines couches interfaciales sont constituées de fluides capillaires. Mais parfois les équations volumiques sont celles des fluides simples ou celles des mélanges classiques de fluides avec des équations d'état et des lois de comportement complémentaires dont les formes linéarisées sont en partie déductibles de la thermodynamique des processus irréversibles (T.P.I.) via l'examen de l'expression du taux de production d'entropie. Les coefficients phénoménologiques de ces irréversibilités interviendront lors de l'intégration à travers l'interface et l'on peut espérer que les calculs conduisent à de nouveaux coefficients phénoménologiques d'interface caractérisant les viscosités, la conduction thermique et les processus de diffusion de masse. Les taux de production chimique, généralement non linéaires nécessiteront des traitements particuliers comme on le fait par exemple pour les flammes minces de pré-mélange avec lesquelles des méthodes de développements asymptotiques raccordés à plusieurs échelles s'imposent.

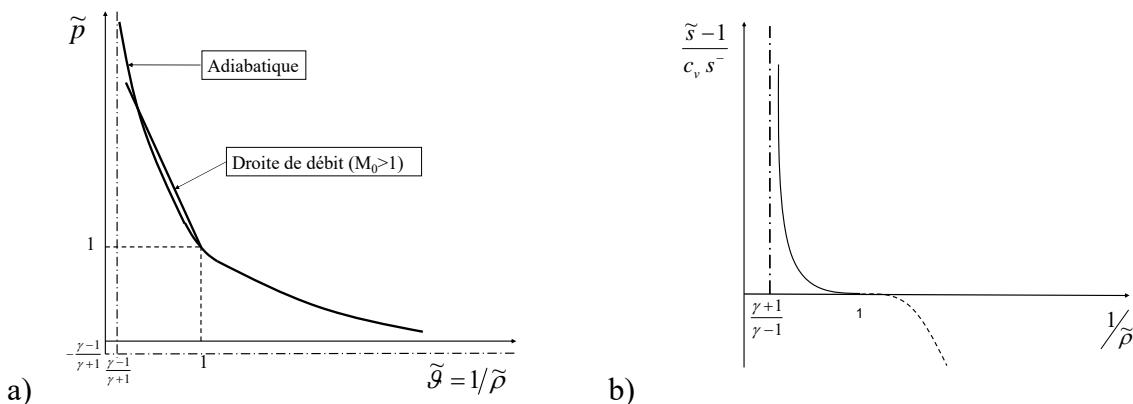
La figure 8 met en évidence les types de termes intervenant dans les bilans d'interface.

#### 4.3. L'onde de choc droite

Parmi les exemples les plus simples d'interfaces généralisées, il y a les ondes de choc droites. Ce problème est déjà abondamment traité sans avoir recours aux notions exposées ci-dessus. On connaît bien toutes les formules des ondes de choc droites stationnaires dans un gaz parfait. Nous ne cherchons pas de nouveautés à leur sujet, mais à nous servir de cet exemple pour voir si notre théorie s'applique. En particulier quelles lois de comportement pour ce type de surface de discontinuité. Par exemple que nous apprennent les relations d'Hugoniot ? Quelles relations entre forces et flux généralisés ?

Les équations de bilan d'une onde de choc droite sont les suivantes :

$$[\rho u]_+^+ = [\dot{m}]_+^+ = 0 \text{ (masse)}, \quad \dot{m}[u]_+^+ + [p]_+^+ = 0 \text{ (quantité de mouvement)}, \quad \dot{m}[h + u^2/2]_+^+ = 0 \text{ (énergie)} \quad [11]$$



**Figure 9.** L'adiabatique d'Hugoniot dans les plans a)  $\tilde{\rho}, \tilde{p}$  et b)  $\tilde{\rho}, \tilde{s}$ . Le nombre de Mach de l'écoulement amont par rapport à l'onde est :  $M^- = M_0 = u_0/c_0$ . Il n'y a de choc que pour  $M^- > 1$ . La droite de débit a pour équation :  $(\tilde{p}-1)/(\tilde{\rho}-1) = -\gamma M_0^2$ .

et le taux de production d'entropie se réduit à :  $\dot{W}_{sa} = \dot{m}[s]_+^+ = \dot{m}c_v \ln \tilde{p}/\tilde{\rho}^\gamma$  en désignant par  $\tilde{p}$  et  $\tilde{\rho}$  la pression et la masse volumique rapportées à leurs valeurs amont.

On voit sur la figure 9 que la courbe de variation d'entropie présente un point d'inflexion à tangente horizontale au point  $\tilde{\rho} = 1$ , et le calcul montre<sup>3</sup> que  $\dot{W}_{sa} = -\dot{m}c_v(\gamma^2 - 1)(\tilde{\rho} - 1)^3/12$ . Si l'on cherche la relation

<sup>3</sup> Le choc droit n'existe que pour des nombres de Mach  $M_0$  plus grands que l'unité. Au point  $\tilde{\rho} = 1$  de la figure 9 il n'y a pas encore de choc. Pour un nombre de Mach légèrement supérieur à 1, on a un choc faible.

entre le saut de pression (la cause de la discontinuité) et le saut de volume massique (le flux généralisé qui en résulte), on ne trouvera pas une relation linéaire comme c'est le cas en TPI, mais une expression du second degré :  $1 - \tilde{\vartheta} \propto (\tilde{p} - 1)^2$ . Ce résultat résumé dans le tableau 2 est obtenu pour des chocs faibles.

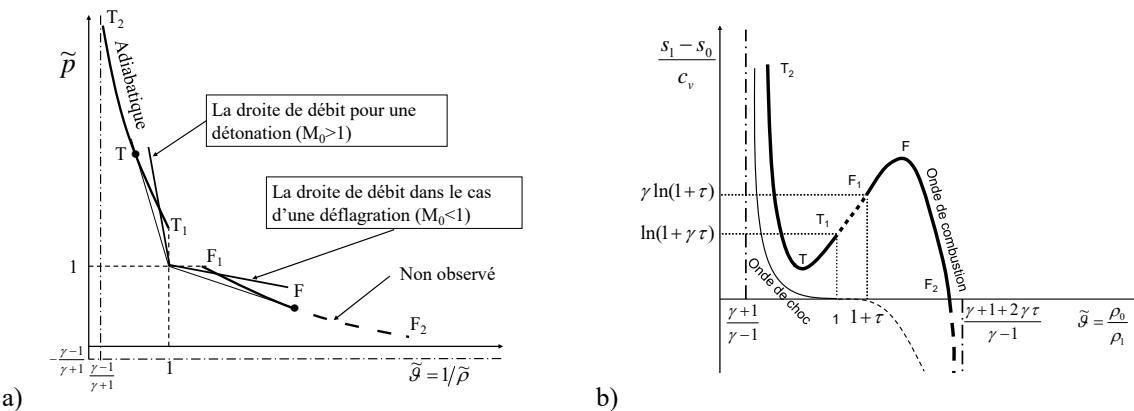
Que se passe-t-il si l'on étudie la zone interfaciale constituant l'intérieur du choc ?

Dans cette zone on peut, comme l'a fait Smolderen<sup>xxvii</sup>, écrire les équations d'un fluide visqueux et conducteur de la chaleur avec des lois de comportement linéaires. Mais l'intégration suivant la normale à l'interface conduit à une loi de comportement non linéaire.

On retrouve ce comportement pour les chocs en milieu diphasique, car le choc concerne la phase gazeuse. Mais le mélange gaz-particules quant à lui fera apparaître des relations phénoménologiques linéaires (voir le tableau 2) exprimant les échanges thermiques et visqueux entre gaz et particules<sup>xxviii</sup>,  
<sup>xxix</sup>.

#### 4.4. Ondes de combustion

Les équations de Rankine-Hugoniot<sup>xxx</sup> caractérisent une onde de discontinuité plane en présence d'une réaction chimique de combustion. Les équations de base sont analogues à celles de l'onde de choc :



**Figure 10.** a) La droite de débit (dans deux cas) et l'adiabatique d'Hugoniot. b) Taux de production d'entropie, à la traversée de l'onde de combustion, le long de l'adiabatique d'Hugoniot. L'arc  $F_1 F F_2$  est dans la zone de variation d'entropie positive et rend possible une onde de discontinuité d'expansion. Le choc représenté en trait fin, ne présente pas une telle onde.

$[\rho u]^+ = [\dot{m}]^+ = 0$ ,  $\dot{m}[u]^+ + [p]^+ = 0$ ,  $\dot{m}[h + u^2/2]^+ = 0$ , mais il faut y ajouter les équations d'état du mélange. On suppose une chaleur spécifique constante et uniforme, et une énergie  $\Delta h$  mise en jeu par la réaction chimique, de sorte que :  $[h]^+ = c_p(T_1 - T_0) - \Delta h$ .

Tous calculs faits, et en posant  $\tilde{\vartheta} = \rho_0/\rho_1$ ,  $\tilde{p} = p_1/p_0$ ,  $\tau = \Delta h/c_p T_0$ , il reste deux équations sans dimensions :

$$\frac{\tilde{p}-1}{\tilde{\vartheta}-1} = -\gamma M_0^2, \quad \tilde{p} = \frac{(1-\gamma)\tilde{\vartheta}+1+\gamma+2\gamma\tau}{(1+\gamma)\tilde{\vartheta}+1-\gamma} \quad [12]$$

décrivant respectivement la droite des débits et l'adiabatique d'Hugoniot.

Deux régimes apparaissent<sup>4</sup> :

- L'onde de déflagration ou flamme de prémélange qui est subsonique et pour laquelle la chute de pression est relativement faible ; la flamme mince laminaire plane et adiabatique a une vitesse de combustion  $s_L^0$ .
- L'onde de détonation, supersonique et stable au point de Chapman-Jouguet  $T$ , est de forte amplitude.

Nature de l'interface	Bilans et lois de comportement	Méthode
Onde de choc droite	$[\rho u]^+ = [\dot{m}]^+ = 0, \dot{m}[u]^+ + [p]^+ = 0, \dot{m}[h + u^2/2]^+ = 0$ $\dot{W}_{sa} = \dot{m}[s]^+ = \dot{m} c_v \ln \tilde{p}/\tilde{\rho}^r \propto (M_0^2 - 1)^3$	Théorie classique des ondes de choc stationnaires
Choc diphasique stationnaire	$\dot{W}_{sa} \cong Q_a \left( \frac{1}{T_{ps}} - \frac{1}{T_s} \right) + \frac{F_a}{T_s} (u_s - u_{ps}), u_s = \frac{u_1 + u_2}{2}, u_{ps} = \frac{u_0 + u_2}{2}$ $Q_a = \mathcal{L}_{TS}(T_s - T_{ps}), F_a = \mathcal{L}_{vs}(u_s - u_{ps})$	TPI linéaire appliquée à la zone de relaxation qui suit l'onde de choc gazeuse
Flamme mince de prémélange	$s_L / s_L^0 \cong 1 - \mathcal{L}(\kappa + S / s_L^0)$	Analyse asymptotique à deux petits paramètres
Couche limite stationnaire incompressible au-dessus d'une plaque plane	$\nabla_S \cdot \mathbf{J}_{ua} + [J_{u\perp}]_-^+ = 0$ $J_{ua} = -K_u \rho U_\infty x \psi \left( \frac{\mu}{\rho U_\infty x} \right) [u]_-^+$	Analyse dimensionnelle
Couche limite instationnaire incompressible au-dessus d'une plaque plane	$\frac{\partial \rho_a \Delta u_s}{\partial t} - [\tau]_-^+ = 0$ $\rho_a \Delta u_s = L_u \rho d u [u]_-^+$	Analyse dimensionnelle
Couche limite diffusive au-dessus d'une plaque plane	$\frac{\partial J_{ya}}{\partial x} + [J_{y\perp}]_-^+ = 0$ $J_{ya} = -K_Y \rho U_\infty x \text{Re}_x^2 Sc^b [Y]_-^+$	Analyse dimensionnelle
Surface capillaire	$[\mathbf{P} \cdot \mathbf{N}]_-^+ - \nabla_S \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0$ $\boldsymbol{\sigma}_v = \boldsymbol{\sigma} - \sigma \mathbf{1}_{  } = [(\kappa_a - \varepsilon_a) \nabla_S \cdot \mathbf{v}_S] \mathbf{1}_{  } + 2 \varepsilon_a \mathbf{D}_S$	TPI directe

Tableau 2. Exemples de loi de comportement d'interfaces.

#### 4.5. La flamme mince de prémélange

Considérons maintenant la flamme mince de prémélange de la figure 11, qui n'est plus plane ni adiabatique.

Lorsque l'énergie d'activation de la réaction chimique est très grande, la zone de réaction est très mince et la structure de la flamme est bien définie<sup>xxi</sup> (voir aussi les pages 180 à 182 de la réf. <sup>xiii</sup>, ainsi que les réf. <sup>iii</sup> et <sup>xx</sup> pour les détails) et comprend quatre zones :

- Les gaz frais.
- La zone de préchauffage d'épaisseur  $\ell_f$  dominée par la convection, la diffusion des espèces et la conduction thermique.

<sup>4</sup> Contrairement au cas de l'onde de choc, une onde de combustion existe cette fois pour des nombres de Mach  $M_0$  plus petits que 1 du fait de la présence de la réaction exothermique.

- La zone réactive d'épaisseur  $\ell_\delta$  où la diffusion, la conduction et la réaction chimique sont prédominants et qui peut être représentée par un saut caractérisé - par un delta de Dirac - donnant la vitesse de réaction sans dimensions  $W = \delta(N) \exp \beta(\tilde{T}^+ - 1)$ .

- Les gaz brûlés.

La couche interfaciale est constituée de l'ensemble « seconde et troisième zone ». La vitesse de combustion de référence  $s_L^0$  correspond à la flamme plane laminaire adiabatique ; c'est la vitesse de l'onde de combustion par rapport aux gaz frais. La théorie 3D donne la vitesse  $s_L$  de la flamme incurvée et étirée<sup>xxxii</sup> rapportée à  $s_L^0$  :

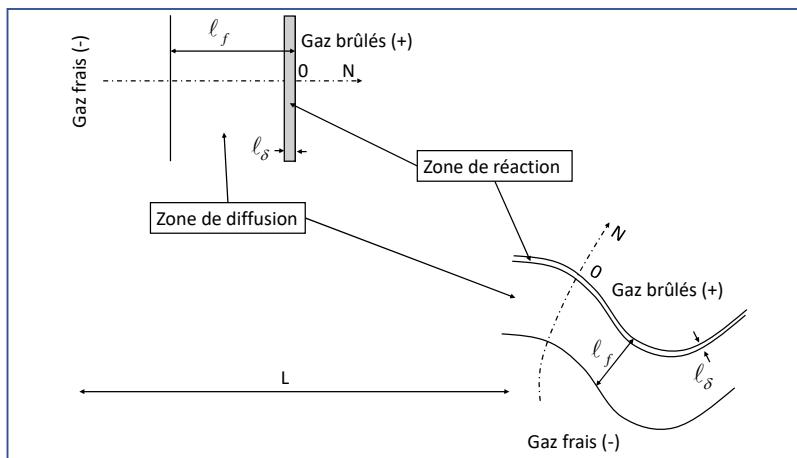
$$s_L / s_L^0 \cong 1 - \mathcal{L} \left( \kappa + S / s_L^0 \right) \quad [13]$$

en fonction du taux d'étirement de l'interface  $\nabla_{\parallel} \cdot \mathbf{V}_S$  décomposé en deux parties, la courbure du front de flamme  $\kappa$  et le taux de déformation local de l'écoulement fluide  $S = -\mathbf{N} \cdot \nabla \otimes \mathbf{v} \cdot \mathbf{N}$  divisé par  $s_L^0$ .

La longueur de Markstein  $\mathcal{L}$  est définie par :

$$\frac{\mathcal{L}}{\ell_f} = \frac{1}{\gamma} \ln \frac{1}{1-\gamma} + \frac{Ze(Le-1)}{2} \frac{1-\gamma}{\gamma} \int_0^{\gamma} \frac{\ln(1+x)}{x} dx \quad [14]$$

avec  $\gamma = (\rho^- - \rho^+) / \rho^-$ ,  $Ze = E_a (T^+ - T^-) / R (T^+)^2$ .



**Figure 11.** Structures comparées de la flamme plane et de la flamme incurvée

Les côtés – et + désignant respectivement les gaz frais et les gaz brûlés,  $Le$  étant le nombre de Lewis - supposé voisin de l'unité - et  $Ze$  étant le nombre de Zeldovich.

Les équations d'interfaces peuvent être utilisées dans l'analyse asymptotique elle-même. Ainsi il est à remarquer que les calculs sur les développements asymptotiques portant sur les équations de bilan 3D peuvent être tout aussi bien être faits sur l'ensemble des équations de bilan d'interface. Les résultats sont les mêmes comme cela a été démontré dans la réf.<sup>xxxiii</sup>.

#### 4.6. Les couches limites

Dans les problèmes d'onde de discontinuité, la vitesse d'interface est celle du cas b) de la figure 7, alors que les couches limites correspondent à la figure 7a.

Dans le tableau 2 les cas présentés ont été analysés par l'analyse dimensionnelle, ce qui a permis d'obtenir des lois de comportement. Mais il s'agit de configurations géométriques simples et d'écoulements 2D au-dessus de plaques planes fixes ou mobiles.

D'autres configurations peuvent réclamer d'autres traitements.

## Conclusion

Cet article a permis de présenter une méthode d'établissement des équations de bilan aux interfaces en présence d'au moins une phase fluide<sup>5</sup>. Cette méthode se fonde sur l'hypothèse qu'il existe au moins deux échelles spatiales d'analyse et qu'à petite échelle l'interface devient une couche fluide pouvant avoir des propriétés originales. Les équations de bilan ainsi élaborées ont l'avantage de faire apparaître des échanges et des taux de productions internes aux interfaces et des échanges entre ces dernières et les milieux volumiques en contact.

Les équations établies contiennent de quantités nouvelles qui ne sont généralement pas indépendantes les unes des autres, mais obéissent à de lois de comportement. Nous avons vu que ces lois peuvent être établies de diverses manières suivant les configurations d'interfaces considérées.

Des questions fondamentales subsistent. Nous avons évoqué les interfaces de diffusion pour lesquelles il reste à établir l'apparition d'une tension superficielle effective. Mais il y a aussi à résoudre certains problèmes mathématiques posés par l'unicité des maillages orthogonaux en 3D, par les surfaces présentant des singularités, etc.

On sait résoudre de nombreuses évolutions avec les équations des milieux continus, parfois analytiquement et plus souvent numériquement. Les interfaces posent un nouveau problème de taille, car on ne connaît pas à l'avance ni les formes des surfaces, ni leurs équations.

Les équations des systèmes contenant des interfaces sont généralement résolues numériquement. La question du suivi du mouvement et des interfaces capillaires en déformation a fait l'objet de nombreuses recherches et des codes numériques se sont développés (tels [gerris](#) et [basilisk](#))<sup>xxxiii</sup>. Pour des problèmes à interfaces épaisses on a plutôt effectué des résolutions en volume en affinant le maillage des zones interfaciales considérées comme des milieux continus<sup>6</sup>. Dans certains cas on est amené à épaissir artificiellement les couches interfaciales pour faciliter la résolution et l'on introduit alors des méthodes de champ de phase à une échelle adéquate pour éviter la raideur des sauts d'interface.

L'objectif de notre démarche était de présenter la notion d'interface avec ses modélisations thermodynamiques et mécaniques. Nous espérons y avoir contribué dans le cadre d'un article court, sachant qu'une étude plus exhaustive reste à faire. Des mises au point sont effectuées plus ou moins régulièrement par les revues spécialisées qui couvrent également le thème des membranes. Les fibres et ligaments n'ont pas été évoqués dans cet article qui n'a pas non plus traité du rayonnement et des effets des champs électromagnétiques.

Pour compléter sur les sujets traités, le lecteur pourra consulter utilement la documentation complémentaire fournie<sup>xxxiv</sup>.

<sup>5</sup> Les fluides présentant des gradients de densité subissent l'action des forces volumiques à distance telles que la pesanteur. Ces forces et celles de micropesanteur sont prises en compte dans cette modélisation des interfaces qui présente ainsi un intérêt particulier pour les études menées dans le cadre du GDR MFA (Micropesanteur Fondamentale et Appliquée) portant sur les systèmes présentant une phase fluide.

<sup>6</sup> Cela est difficile à mettre en œuvre pour les surfaces capillaires dont les épaisseurs sont trop faibles.

## Références

- i Roussel J., Cours de Mécanique des fluides – Tension superficielle, Cours ENSCR, 2016. [http://femto-physique.fr/mecanique\\_des\\_fluides/mecaflu\\_C4.php](http://femto-physique.fr/mecanique_des_fluides/mecaflu_C4.php)
- ii Rocard Y., Equations hydrodynamiques avec termes capillaires. Théorie de la tension superficielle. *Le Journal de Physique et Le Radium*, Série VII, Tome IV, N°10, oct. 1933.
- iii Gatignol R., Prud'homme R., Mechanical and thermodynamical modeling of fluid interfaces - Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences, Vol 58, World Scientific, 2001. ISBN : 978-981-02-4305-0, ISBN : 978-981-4493-09-3 (ebook).
- iv Germain P., Mécanique, Ellipses, Ecole Polytechnique, Palaiseau, 1987. ISBN t. I : 2729886532, ISBN t. II : 2729886540
- v Defay R., Prigogine I., Théorie thermodynamique de la tension superficielle dynamique, *J. Chim. Phys.*, Vol. 43, pp. 217–234, 1946.
- vi Prigogine I., Defay R., Tension superficielle dynamique des solutions régulières, *J. Chim. Phys.*, Vol. 46, pp. 367–372, 1949.
- vii Defay R., Essai d'une thermodynamique des couches minces, *J. Chim. Phys.*, Vol. 46, pp. 375–387, 1949.
- viii Defay R., Sanfeld A., Steinchen A., La couche interfaciale traitée comme une collection de plans moléculaires -II. Comparaison avec le modèle continu, *J. Chim. Phys.*, Vol. 69, pp. 1380–1385, 1972.
- ix Marmottant P.H., Villermaux E., On spray formation, *J. Fluid Mech.*, vol. 498, p. 73-111, 2004. Print ISSN 1386-6184.
- x A. Karma et A. Sarkissian, *Met. Trans. A* 27, 635, 1996
- xi Akamatsu S., Faivre G., Traveling waves, two-phase fingers, and eutectic colonies in thin sample directional solidification of a ternary eutectic alloy, *Physical Review E*, vol. 61, p.3757-3769, 2000.
- xii Akamatsu S., Bottin-Rousseau S., Faivre G., Ghosh S., Plapp M., Lamellar eutectic growth with anisotropic interphase boundaries. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, IOP Publishing, 84, pp.012083, 2015. <10.1088/1757-899X/84/1/012083>. <hal-01469035>
- xiii Prud'homme R., Ecoulements et réactions chimiques 1- collection Mécanique des fluides, Hermès-Lavoisier, Cachan, 2012. ISBN 978-2-7462-3893-0, ISSN 1952-286 X
- xiv Huffenus J.-P. - Calculs d'écoulements en fluide réel, *La Houille Blanche* / N° 6- p. 597-602, 1969.
- xv Renaud-Assemat I., Développement d'une méthode lagrangienne de simulation d'écoulements turbulents à phases séparées, Thèse de doctorat, Inst. Nat. Polytech. de Toulouse, 2011.
- xvi Ryskin G., Leal L.G., Orthogonal Mapping, *Journal of Computational Physics*, vol. 50, p. 71-100, 1983.
- xvii Ryskin G., Leal L.G., Numerical solution of free boundary problem in fluid mechanics, part 1: the finite difference technique, *J. Fluid Mech.*, vol. 148, pp. 1-18, 1984.
- xviii Duraiswami R., Prosperetti A., Orthogonal Mapping in Two Dimensions, *Journal of Computational Physics*, vol. 98, p. 254-268, 1992.
- xix Kervella Y., Khojasteh Pour Fard I., Le Hir P., Renault E., Lemoine J-P, Modélisation hydrodynamique tridimensionnelle en coordonnées curvilignes non-orthogonales de l'estuaire de la Seine. XIIèmes Journées Nationales Génie Côtier – Génie Civil Cherbourg, 12-14 juin 2012.
- xx Prud'homme R., Flows of reactive fluids - FMIA Series Vol. 94, Springer, New York Dordrecht Heidelberg London, 2010. ISSN 0926-5112, ISBN 978-0-8176-4518-2, DOI 10.1007/978-0-8176-4659-2
- xxi Seppecher, P. Etude d'une modélisation des zones capillaires fluides : interfaces et zones de contact, Thèse de doctorat, Université Paris VI, Paris, avril 1987.
- xxii Slattery, J.C. Interfacial transport phenomena, Springer, Berlin, 1990.
- xxiii Bertrand G., Prud'homme R., Possibilities of surface reaction coupling with transport phenomena" *Int. J. Quantum Chemistry*, **12**, suppl. 2, pp. 159-168, 1977.
- xxiv Petitjeans P., Kurowski P., Fernandez J. et Hoyos M. Instabilités à "l'interface" entre deux fluides miscibles. Émergence d'une tension de surface effective. *J. Chim. Phys.* 96, 991-996, 1999.

- <sup>xxv</sup> Pojman J.A., Whitmore C., Turco Liveri M. L., Lombardo R., Marszalek J., Parker R. and Zoltowski B., Evidence for the existence of an effective interfacial tension between miscible fluids: isobutyric acid –water and 1-butanol-water in a spinning-drop tensiometer. *Langmuir*, 22, 2569-2577.
- <sup>xxvi</sup> Defay R., Sanfeld A., *J. de Chimie Physique*, 70, pp.895-899, 1973
- <sup>xxvii</sup> Smolderen, J., Structure des chocs et théorie cinétique des gaz, in *Chocs et ondes de choc*. L. Jaumotte Ed., Masson, 1971.
- <sup>xxviii</sup> Jamet, N., *Modélisation des discontinuités dans les écoulements diphasiques compressibles*, PhD thesis of Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1998.
- <sup>xxix</sup> Jamet, N., Prud'homme, R. et Gottesdiener, L., Coefficients phénoménologiques au travers de discontinuités en milieu diphasiques, 13ème Congrès Français de Mécanique, Poitiers-Futuroscope, 1997.
- <sup>xxx</sup> Jaumotte, A. L., Chocs et ondes de choc. Masson, 1971.
- <sup>xxxi</sup> Prud'homme R., Fluides hétérogènes et réactifs : écoulements et transferts », Springer-Verlag, Lecture Notes in Physics n°304, 1988.
- <sup>xxxii</sup> Clavin P., Joulin G., “Premixed flames in large and high intensity turbulent flow”, *Le J. de Phys Lett.*, vol.44, n° 1, p. L1-L12, 1983.
- <sup>xxxiii</sup> [Stéphane Popinet. Numerical Models of Surface Tension. Annual Review of Fluid Mechanics, Annual Reviews, 2018, 50, pp.49 - 75. <10.1146/annurev-fluid-122316-045034> . <hal-01528255>](#)
- <sup>xxxiv</sup> Documentation complémentaire :
- *Maillages*
  - ✓ Blanco A. Quelques aspects de l’écoulement d’un fluide visqueux autour d’une bulle déformable : une analyse par simulation directe. Thèse de doctorat Inst. Polytechnique de Toulouse, 1995.
  - ✓ Blanco A. Génération de maillages orthogonaux. Mémoire de D.E.A. Inst. Polytechnique de Toulouse, 1992
  - ✓ Blanco A., Magnaudet J. The Structure of the axisymmetric high-Reynolds number flow around an ellipsoidal bubble of fixed shape. *Phys. Fluid* 7 (6), 1995.
  - ✓ Caramero R. Génération de maillages, Département de génie mécanique, Ecole Polytechnique de Montréal, janvier 2009.
  - *Tension superficielle*
  - ✓ P-G. de Gennes, F. Brochard Wyart and D. Quéré. Gouttes, bulles, perles et ondes. Belin, 2002.
  - ✓ P. Fleury and J.P. Mathieu. Mécanique Physique. 1961.
  - ✓ L. Léger. L’étalement d’une goutte sur un solide. Rôle des forces à longue portée. Images de la physique - CNRS, pages 74--79, 1989.
  - ✓ D. Langevin. La coalescence. *Bulletin de la SFP*, 115, 1998.
  - ✓ D. Quéré *et al.* Les surfaces superhydrophobes. Images de la physique - CNRS, pages 239-244, 2005.
  - ✓ Legendre M., Petitjeans Ph., Kurowski P., Instabilités à l’interface entre fluides miscibles par forçage oscillant horizontal, *C. R. Acad. Sci. Paris*, t. 329, Série IV, p. 1-??, 2001.
  - ✓ Del Piero G., “On the method of virtual power in continuum mechanics”, *Journal of Mechanics of materials and Structures*, Vol. 4, No. 2, 2009.
  - *Ondes de choc*
  - ✓ Jamet N., Prud'homme R. & Gottesdiener L. (1999) Modeling of discontinuities in two-phase compressible flows. Put in February 2015 as unpublished paper, on Research Gate
  - *Divers*
  - ✓ Résumés des travaux des Colloques annuels du GDR MFA (le dernier à Fréjus, France, 8-10 Nov. 2017).
  - ✓ Prud'homme R, Ecoulements et réactions chimiques 3 ; applications aux mélanges réactifs, Hermès-Science Lavoisier, Paris, 2014. ISBN 978-2-7462-4586-0