

Evaporation d'une goutte de liquide pur dans sa vapeur près du point critique : pertinence de l'hypothèse quasi-stationnaire et corrections au premier ordre

Stéphane Préau¹, Jalil Ouazzani², Roger Prud'homme¹ & Bernard Zappoli³

¹ Laboratoire de Modélisation en Mécanique
8, rue du Capitaine Scott-75015 Paris

² Arcofluid-Marseille

³ CNES Toulouse
preau@lmm.jussieu.fr

Résumé :

L'hypothèse quasi-stationnaire appliquée au processus d'évaporation d'une goutte de liquide pur critique dans sa vapeur à la pression critique conduit à des résultats qui diffèrent assez significativement des résultats numériques. Deux sources d'instationnarités peuvent être invoquées pour expliquer ces écarts : la présence d'une zone instationnaire loin de la goutte et la relaxation des conditions initiales. Des corrections aux résultats quasi-stationnaires prenant en compte ces deux effets sont déterminées. La comparaison avec les résultats numériques s'avère satisfaisante.

Abstract :

The quasi-steady hypothesis applied to the vaporization process of a pure critical droplet in its vapor at the critical pressure leads to theoretical results that differ quite significantly from the numerical ones. Two kinds of unsteadiness can be involved in order to explain such results : the presence of an unsteady area far from the droplet and the occurrence of initial data relaxation. Corrections to the quasi-steady results that take into account those two kind of unsteadiness are worked out. These analytical results are in good agreement with the numerical results.

Mots-clefs :

Evaporation ; Quasi-stationnaire ; Point critique

1 Introduction

L'évaporation isobare d'une goutte de liquide pur initialement à la température de vapeur saturante dans sa vapeur est classiquement étudiée dans des configurations nettement subcritiques en négligeant les termes instationnaires dans les équations bilan en phase gazeuse. C'est l'hypothèse Quasi-Stationnaire (Q.S.). Il est alors montré que le carré du diamètre de la goutte varie linéairement avec le temps (loi en d^2) (Godsave (1953), Spalding (1953)). Cette hypothèse se justifie lorsque le rapport des densités du gaz à l'infini et de la goutte est très petit : les effets convectifs alors importants viennent équilibrer les termes diffusifs dans les équations et les termes instationnaires peuvent, au premier ordre, être négligés. Les effets convectifs s'amusent cependant au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la goutte du fait de la symétrie sphérique du problème. Crespo et Liñan (1975) ont pu déterminer des corrections au premier ordre aux expressions Q.S. en prenant en compte les effets liés à la présence d'une zone instationnaire loin de la goutte. La concordance entre les résultats théoriques Q.S. corrigés et les résultats numériques dans des cas nettement subcritiques s'avère excellente, y compris pour des rapports de densité gaz/liquide d'ordre un.

Arias-Zugasti *et al.* (1999) ont récemment appliqué l'hypothèse Q.S. à "l'évaporation" isobare d'une goutte à la densité critique dans sa vapeur à la pression critique pour des rapports de densité gaz/liquide très petits. Les différentes divergences critiques apparaissent dans un terme intégral convergeant définissant le temps de vie.

Des essais numériques sur la configuration critique étudiée par Arias-Zugasti *et al.* (1999) ont pu être menés. Des différences plus importantes que prévu, sur la valeur des temps de vie et la forme des profils de récession du carré du rayon de la goutte, apparaissent en confrontant ces résultats à ceux issus de l'hypothèse Q.S.. Nous expliquons dans ce qui suit l'origine des écarts observés et proposons des corrections aux expressions Q.S..

2 Etude de de type Quasi-Stationnaire

Considérons une goutte d'un corps C à la densité critique placée à la pression critique dans une atmosphère gazeuse de ce même corps C de température $T'_\infty > T'_{critique}$. L'adimensionnalisation des équations est effectuée de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{t'}{t'_{temps-de-vie}} & \rho &= \frac{\rho'}{\rho'_\infty} & \theta &= \frac{T'}{T'_\infty} \\ r_o &= \frac{r'_{goutte}}{r'_{initial}} & x &= \frac{r'}{r'_{initial}} - r_o & u &= \frac{v' t'_{diffusion-a-l'-infini}}{r'_{initial}} - \gamma_\infty \frac{dr_o}{d\tau} \\ \lambda &= \frac{\lambda'(T')}{\lambda'_\infty} & C_p &= \frac{C'_p(T')}{C'_{p\infty}} \\ \gamma_\infty &= \frac{t'_{diffusion-a-l'-infini}}{t'_{temps-de-vie}} & \epsilon &= \frac{\rho'_\infty}{\rho'_{critique}} \end{aligned} \quad (1)$$

Les équations à considérer en phase gazeuse sont, du fait du caractère isobare du phénomène, les équations de conservation de la masse et de conservation de l'énergie :

$$\gamma_\infty \left(\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \frac{2\rho}{x + r_o} \frac{dr_o}{d\tau} \right) + \frac{1}{(x + r_o)^2} \frac{\partial ((x + r_o)^2 \rho u)}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

$$\gamma_\infty \rho \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \rho u \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{C_p (x + r_o)^2} \frac{\partial}{\partial x} \left((x + r_o)^2 \lambda \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \quad (3)$$

L'équation de conservation de la masse à l'interface s'écrit :

$$\rho_o u_o = -\frac{\gamma_\infty}{\epsilon} \frac{dr_o}{d\tau} \quad (4)$$

et l'équation de l'énergie :

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_{x=0} = 0 \quad (5)$$

du fait de la divergence critique de la conductivité thermique (Arias-Zugasti *et al.* (1999)). A l'infini :

$$\theta(x \rightarrow \infty) = 1 \quad (6)$$

L'hypothèse Q.S. consiste à supposer : $\gamma_\infty \ll 1$. Trois zones peuvent alors être distinguées. Tout d'abord, une zone centrale stationnaire du fait de la nullité de la diffusivité thermique au point critique. C'est la récession du rayon r_o délimitant cette zone que nous cherchons à caractériser. Vient ensuite une zone de couche limite en densité où le terme instationnaire peut être négligé dans les équations 2 et 3 et où $\rho u \approx \text{Constante}/x$. Une analogie peut être envisagée entre cette couche limite et le saut en densité à l'interface liquide-vapeur dans les cas nettement subcritiques. Cette couche limite prend approximativement fin à la densité pour laquelle le débit surfacique ρv est maximal. Les grandeurs relatives à ce maximum seront par la suite indicées par "m" (θ_m : température, ρ_m : densité, r_m rayon du domaine délimité par θ_m). Suit enfin une zone où le terme instationnaire peut là encore être négligé et où le débit surfacique ρv décroît en $1/r^2$. Cette zone est tout à fait analogue à la zone gazeuse dans les cas nettement subcritiques.

Ainsi, les termes instationnaires dans les équation 2 et 3 peuvent être négligés dans les trois zones. Ces équations privées de leurs termes instationnaires peuvent donc être étudiées en l'état, sans distinguer les trois zones précédemment décrites. Une relation de conservation du débit peut alors être déduite des équations 2 et 4. Une double intégration de l'équation de conservation de l'énergie fournit, compte tenu des conditions aux limites, une autre relation sur le débit. L'égalisation des deux équations puis l'intégration de la relation ainsi obtenue avec la condition $r_o = 0$ pour $\tau = 1$ conduisent à :

$$r_o^2 = 1 - \tau \quad (7)$$

et

$$\gamma_\infty = 2\epsilon \int_{\theta_{critique}}^{\theta_\infty} \frac{\lambda(\theta')}{\int_{\theta_{critique}}^{\theta'} C_p(\theta'') d\theta''} d\theta' \quad (8)$$

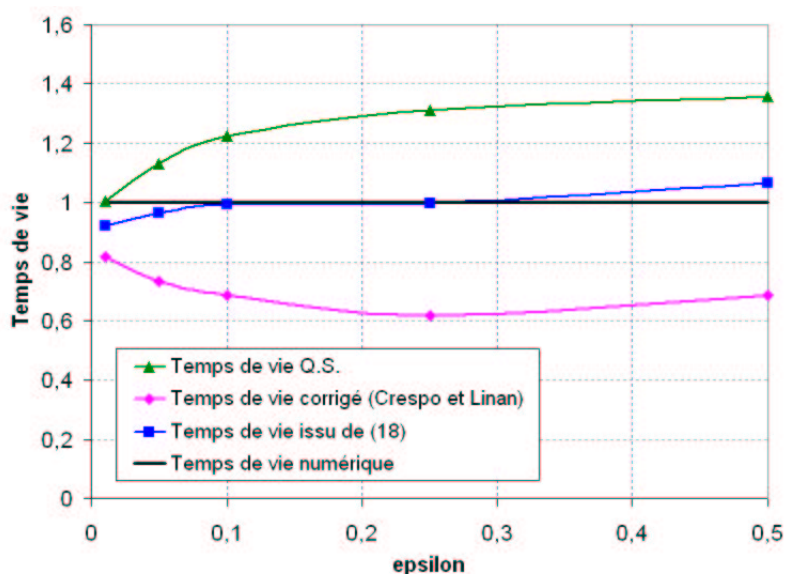
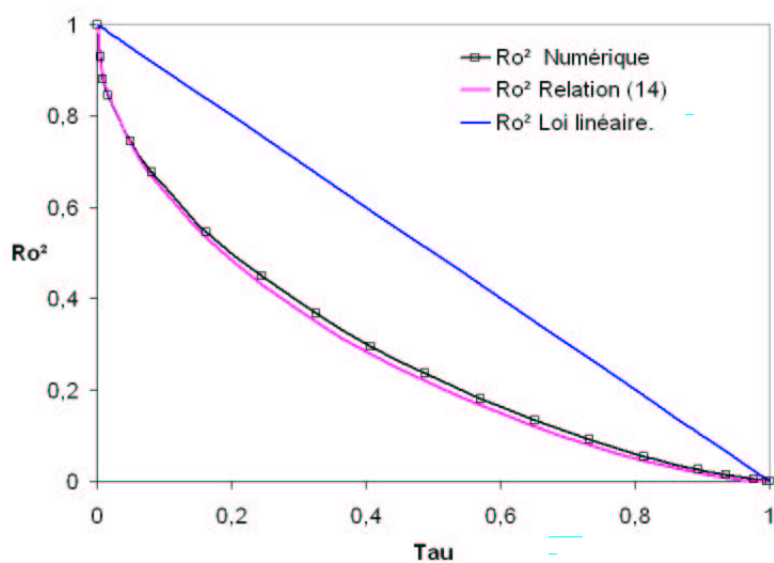
3 Corrections aux résultats Q.S.

Des essais numériques ont pu être menés dans une configuration très légèrement supercritique ($P/P_{critique} \approx 1.00004$) avec une loi d'état du gaz de type Van Der Waals, et une loi de conductivité thermique identique à celle donnée par Arias-Zugasti *et al.* (1999) :

$$\lambda = \lambda_o \left(\sqrt{\theta} + 0.078 \frac{\rho}{\rho_{critique}} + 0.014 \left| \frac{\theta}{\theta_{critique}} - 1 \right|^{-\frac{1}{3}} \right) \quad (9)$$

La stationnarité de la zone centrale (poche critique) est assurée au premier ordre dans des conditions très légèrement supercritiques. L'isotherme délimitant cette zone centrale et définissant par conséquent r_o est prise très proche de la température critique ($\theta_o/\theta_{critique} = 1.000001$). Les temps de vie Q.S. relatifs ($\tau_{vie-numerique} = 1$) de la zone centrale sont représentés Figure 1 pour plusieurs valeurs de ϵ . Les temps de vie corrigés obtenus par Crespo et Liñan sont aussi indiqués. La récession temporelle de r_o^2 est représentée sur la Figure 2. Des écarts quantitatifs assez importants apparaissent entre les valeurs des temps de vie numériques et Q.S.. Les corrections instationnaires de Crespo et Liñan ne compensent pas les différences observées. Par ailleurs, les profils de régression de r_o^2 numériques ne sont pas linéaires.

La présence d'une couche limite en densité dans les configurations proches du point critique explique ces différences : les corrections instationnaires aux résultats Q.S. en subcritique supposent implicitement que le maximum du débit surfacique est atteint à la frontière de la goutte,

FIG. 1 – Temps de vie relatifs pour différentes valeurs de ϵ FIG. 2 – Récession temporelle de r_o^2 pour $\epsilon = 10^{-1}$

ce qui se vérifie du fait de l'importance relative du saut en densité à l'interface. En proche critique, ces corrections ne doivent donc pas être directement appliquées à l'étude de la récession du domaine central mais à celle du domaine où le débit surfacique est maximal, délimité par r_m . L'étude des différents ordres de grandeurs dans les équations de bilan montre que l'isotherme θ_m délimitant ce domaine est telle que le temps caractéristique de diffusion calculé à cet endroit est de l'ordre du temps de vie Q.S. de la goutte, ce qui permet la détermination de θ_m . Les calculs de Crespo et Liñan sont donc repris en se plaçant à l'isotherme θ_m . Ceci conduit à la

relation :

$$-\frac{\gamma_\infty}{\epsilon} r_m \frac{dr_o}{d\tau} = m(\theta_m) + \sqrt{\gamma_\infty} \frac{m(\theta_m)}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{\tau}} - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 + \sqrt{\tau}}{1 - \sqrt{\tau}} \right) \right) \quad (10)$$

avec

$$m(x) = \int_x^{\theta_\infty} \frac{\lambda(\theta')}{\int_{\theta_{critique}}^{\theta'} C_p(\theta'') d\theta''} d\theta' \quad (11)$$

Une deuxième relation liant r_o et r_m est nécessaire à la résolution. Les constatations suivantes permettent l'établissement de cette relation : la forme de la distribution en densité Q.S.,

$$\rho = f \left(\frac{r}{r_o(\tau)} \right) \quad (12)$$

fait que le créneau en densité des conditions initiales ne peut être représenté par les calculs Q.S.. Ceci revêt peu d'importance dans des conditions nettement subcritiques, le créneau en densité se trouvant naturellement dans le saut à l'interface. L'absence de saut en densité à l'interface au point critique fait que les distributions Q.S. et réelles diffèrent plus significativement à l'instant initial. Une hypothèse sur la distribution en densité dans la couche limite peut être effectuée :

$$\rho = h \left(\frac{r - r_o(\tau)}{r_m(\tau) - r_o(\tau)} \right) \quad (13)$$

ce qui suppose aussi que les domaines délimités par r_m et r_o aient des temps de vie très voisins, ce qui est confirmé par les simulations numériques. Le terme $r_m - r_o$ est représentatif de l'épaisseur de couche limite. Cette hypothèse autorise la représentation d'une couche limite d'épaisseur nulle en $\tau = 0$, la distribution initiale en densité dans l'ensemble du domaine se rapproche alors d'un créneau. L'écriture des équations de bilan dans la couche limite dans ce nouveau repère et l'hypothèse de stationnarité dans ce même repère conduisent à l'établissement de la relation suivante :

$$-\frac{\gamma_\infty}{\epsilon} \frac{dr_o}{d\tau} (r_m - r_o) = m(\theta_{critique}) - m(\theta_m) \quad (14)$$

$r_m \frac{dr_o}{d\tau}$ peut alors être exprimé en fonction de $r_o \frac{dr_o}{d\tau}$ puis remplacé dans la relation 10. Cependant, l'établissement de 10 suppose une distribution en densité de type 12 dans tout le domaine et r_o et r_m ne peuvent simultanément être pris égaux à un à l'instant initial. Le phénomène de relaxation des conditions initiales ne peut donc être intégré que partiellement via la relation 14 dans notre modèle. Les travaux d'Arias-Zugasti *et al.* (2000) montrent que la différence sur les rayons initiaux r_o et r_m est d'autant plus importante que le terme $\theta_m - \theta_o$ est important, ce terme étant lui même d'autant plus important que ϵ est petit. Par ailleurs, l'hypothèse $r_m(0) = 1$ a été admise pour l'obtention de 10 (ce qui implique compte tenu des remarques précédentes, $r_o(0) < 1$) et il est alors préférable d'exprimer $r_m \frac{dr_o}{d\tau}$ en fonction de $r_m \frac{dr_m}{d\tau}$. La relation 14 peut se réécrire en :

$$r_m \frac{dr_o}{d\tau} = r_m \frac{dr_m}{d\tau} - \alpha r_m \frac{\frac{d^2 r_o}{d\tau^2}}{\left(\frac{dr_o}{d\tau} \right)^2} \quad (15)$$

avec $\alpha = \frac{\epsilon(m(\theta_{critique}) - m(\theta_m))}{\gamma_\infty} \ll 1$. En supposant $r_m(\tau) \approx r_o(\tau) \approx \sqrt{1-\tau}$ dans le terme de deuxième ordre de la relation 15, il vient :

$$r_m \frac{dr_o}{d\tau} = r_m \frac{dr_m}{d\tau} + \frac{\gamma_\infty}{\epsilon} (m(\theta_{critique}) - m(\theta_m)) \quad (16)$$

La relation 10 peut maintenant être intégrée temporellement entre $\tau = 0$ et $\tau = 1$ pour donner :

$$r_m^2 = 1 - \frac{2\epsilon m(\theta_{critique})}{\gamma_\infty} \tau - \frac{\epsilon m(\theta_m)}{\sqrt{\gamma_\infty}} \left(\sqrt{\tau} + \frac{1-\tau}{2} \ln \left(\frac{1+\sqrt{\tau}}{1-\sqrt{\tau}} \right) \right) \quad (17)$$

La condition $r_m(1) = 0$ permet la détermination de γ_∞ (et donc du temps de vie) :

$$\gamma_\infty = \left(\frac{\epsilon m(\theta_m) + \sqrt{(\epsilon m(\theta_m))^2 + 8\epsilon m(\theta_{critique})}}{2} \right)^2 \quad (18)$$

La précision de la relation 18 peut être évaluée sur la Figure 1 par la comparaison avec les temps de vie numériques. La précision obtenue est satisfaisante de $\epsilon = O(0.05)$ à $\epsilon = O(0.5)$ ou, de façon plus explicite, respectivement de $T_\infty/T_{critique} \approx 7.4$ à $T_\infty/T_{critique} \approx 1.1$. Les profils temporels de récession de r_o^2 numériques, Q.S. et obtenus par intégration numérique de la relation 14 (avec r_m donné par 17 et γ_∞ par 18) sont représentés sur la Figure 2 pour $\epsilon = 10^{-1}$. La régression temporelle numérique du carré du rayon s'écarte significativement de la loi de régression linéaire Q.S.. La loi de régression issue de 14 est, elle, en très bon accord avec les résultats numériques.

4 Conclusions

Les corrections à la théorie Q.S. proposées ici dans le cas de l'”évaporation” d'une goutte au point critique permettent de déterminer des temps de vie en bon accord avec les résultats numériques pour ϵ non trop petit. Une étude faisant intervenir de façon plus complète le phénomène de relaxation des conditions initiales pourrait être envisagée dans ce dernier cas. Plus qualitativement, la relation issue de l'hypothèse effectuée dans la couche limite décrit de façon satisfaisante la régression temporelle du carré du rayon.

Références

- Arias-Zugasti, M., Garcia-Ybarra, P.L., Castillo, J.L. 2000 *Unsteady Effects in Droplet Vaporization Lifetimes at Subcritical and Supercritical Conditions Combust. Sci. Techno* **153**, 179–191.
- Arias-Zugasti, M., Garcia-Ybarra, P.L., Castillo, J.L. 1999 *Droplet vaporization at critical conditions : Long time diffusive profiles along the critical isobar Phys. Rev.* **60**, 2930–2940.
- Crespo, A., Liñan, A. 1975 *Unsteady Effects in Droplet Evaporation and Combustion Combust. Sci. Technol* **11**, 9–18.
- Godsave, G.A.E. 1953 *Fourth Symposium on Combustion* 818. Baltimore
- Spalding, D.B. 1953 *Fourth Symposium on Combustion* 854. Baltimore