

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURE ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE D'ORAN
Mohamed BOUDIAF
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MEMOIRE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE MAGISTER

Spécialité : Physique
Option : Physique Énergétique et Environnement.

Présenté par
M^{elle} Somia FREIFER

Sujet du mémoire

Contribution aux Phénomènes d'Interfaces Fluide - Solide

Soutenu le ...11/11/2010.....

Devant le jury composé de :

Mr FERHAT	Mohamed	Professeur	(USTO-MB)	Président
Mr ALLA	Hocine	Maître de conférences	(USTO-MB)	Rapporteur
Mr DEBAB	Abdelkader	Maître de conférences	(USTO-MB)	Examineur
Mr LOUNIS	Mourad	Maître de conférences	(USTO-MB)	Examineur
Mr TCHOUAR	Nour eddine	Maître de conférences	(USTO-MB)	Examineur

Année universitaire 2010/2011

**«Le vrai point d'honneur n'est pas d'être toujours dans le vrai.
Il est d'oser, de proposer des idées neuves, et ensuite de les vérifier.»**
[Pierre-Gilles de Gennes] - Cité dans le journal *Le Monde.fr* - 22 Mai 2007

« Je dédie ce modeste travail à mon père et à ma mère »
« Ma sœur et mes frères »

Remerciements

La présente étude n'aurait pas été possible sans le bienveillant soutien de certaines personnes. Et je ne suis pas non plus capable de dire dans les mots qui conviennent, le rôle qu'elles ont pu jouer à mes côtés pour en arriver là. Cependant, je voudrais les prier d'accueillir ici tous mes sentiments de gratitude qui viennent du fond de mon cœur, en acceptant mes remerciements.

Mes premiers remerciements, chaleureux et pleins de reconnaissance, vont bien évidemment à Dr. Alla Hocine, qui a été un Directeur de mémoire tout à fait exceptionnel. J'ai beaucoup appris à ses côtés, scientifiquement et humainement, tout en bénéficiant d'une grande liberté de choix et d'action.

Je veux adresser tous mes remerciements à Mr M. Ferhat, Professeur au département de physique, qui m'a fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire.

J'exprime également ma gratitude aux Dr A. Debbab, Dr. M. Lounis et Dr. N. Tchouar, qui ont accepté d'examiner ce travail et de me faire l'honneur de participer au jury.

Ma profonde gratitude s'adresse particulièrement à Monsieur Belherazem Yahia pour son aide, ses conseils et son soutien, qui m'ont permis d'entamer et de réaliser ce travail. Aussi Mr S. M. A. Khtir, mon enseignant en première année théorique et membre de l'équipe que je tiens à remercier.

Je remercie enfin toutes les personnes, qui, de près ou de loin, ont contribué à l'aboutissement de ce travail.

Résumé

Mouillage d'une surface solide avec des liquides est un paramètre important dans le domaine d'industrie tels que : les procédés d'enduction (mise en peinture, impression de différents matériaux), le nettoyage des matériaux...etc.

Dans ce travail, le mouillage des surfaces solides a été étudiée dans les travaux expérimentaux réels [31] et numériquement à travers une simulation en deux dimensions en utilisant l'écoulement multiphasique modèle VOF mis en œuvre dans le logiciel Ansys Fluent 12.0.16 . L'étalement d'une goutte de liquide (glycérin-eau-tensioactif) sur une surface solide a été simulé numériquement et expérimentalement validé.

Les simulations numériques ont été réalisées pour estimer le rayon de la goutte en fonction du temps et ont été comparés aux résultats expérimentaux. On a constaté un bon accord entre les résultats expérimentaux , numériques et le modèle théorique (loi de Tanner) .

Mots clés : Simulation numérique, Ansys Fluent, tension de surface, régime d'étalement.

Abstract

Wetting of solid surfaces with liquids is an important parameter in the field of industry such as: coating processes (for painting, printing of various materials), cleaning materials etc....

In this work, the wetting of solid surfaces has been studied in the actual experimental work [31] and numerically through a simulation in two dimensions using the VOF multiphase flow model implemented in the software Ansys Fluent 12.0.16.

The spreading of a drop of liquid (glycerin-water-surfactant) on a solid surface has been numerically simulated and experimentally validated.

The numerical simulations were conducted to estimate the radius of the drop with time and were compared with experimental results. There was a good agreement between experimental results, numerical and theoretical model (Tanner's law).

Keywords: Numerical simulation, Ansys Fluent, surface tension, spreading regimes.

SOMMAIRE

Introduction Générale	1
Chapitre 1 : Étude Préliminaire	
I.1. Tension\Énergie de surface	4
I.1.1 Définition	4
I.1.2. Mise en évidence de la tension de surface	4
I.1.3. La loi de Laplace	5
I.1.4 Méthodes de mesure de la tension de surface	6
I.1.4.1 Méthode de la goutte pendante	6
I.1.4.2. Tensiomètre du Nouy	6
I.1.4.3. Méthode de la lame	7
I.1.5. Énergie, cohésion et adhésion	8
I.2 Étude des interactions solide/liquide : la mouillabilité	9
I.2.1 Notion d'angle de contact	9
I.2.2 Équation de Young	10
I.2.3 Mouillage partiel/total	10
I.2.4.Hystérésis de mouillage	11
I.2.4.1. Effet de la rugosité de surface sur l'angle de contact	11
I.2.4.2. Effet de présence d'impuretés à la surface	12
I.2. 5. La ligne triple	12
I.2 5.1 Définition	12
I.2 5.2 Dynamique de la ligne triple	13
I.3. Définition des tensioactifs	14
I.4. Agent de surface et processus inter faciaux	14
I.4.1. Amphiphile	14
I.4.2. Adsorption aux interfaces	15
I.5. Concentration micellaire critique (CMC)	15
I.5.1. Procédure standard	16
I.6. Propriétés massique des tensioactifs	16
I.6.1. Caractère colloïde des solutions tensioactif	16
I.6.2. Structure des micelles	16
I.6.2.1 Structure Sphérique	17
I.6.2.2. Structure Lamellaire	17
I.6.2.3. Structure Hexagonal	18
I.6.2.4. Structure Cubique	18
I.7. Les différents types de tensioactif	19
I.7.1. Agents de surfaces non ioniques	19
I.7.2. Agents de surface cationique	19
I.7.3. Agents de surfaces anioniques	20
I.7.4. Agents de surface amphotères	20
I.8. Les propriétés physico-chimiques des tensioactifs	20
I.8.1. Détergents	20
I.8.2 Dispersants	21
I.8.3. Émulsionnants	21
I.8.4. Mouillants	22
I.8.5. Moussants ou anti- mousses	22

I.8.6. Solubilisant	22
I.9. Domaine d'application des tensioactifs	23
I.9.1. Surfactant pulmonaire	23
I.9.2. Surfactant dans l'industrie de l'impression	24
I.9.3. Surfactant dans l'environnement	24
Chapitre 2 : Analyse Théorique	
II.1 Étude de la dynamique de mouillage	27
II.1.1 Les bases du problème	27
II.2 Les modèles classiques	29
II.2.1 Régime gravitaire –visqueux en l'absence de la tension superficielle	29
II.2.2 Approche hydrodynamique : le modèle de Tanner	29
II.2.3 Approche moléculaire cinétique	30
II.2.4 Modèle en loi de puissance à deux régions distinctes successives dans le cas du mouillage partiel	31
II.2.4.1 Description du modèle	31
II.2.5 Modèle tenant compte du glissement du liquide sur le solide près de la ligne triphasique	34
II.2.5 .1 Les hypothèses de Hocking	34
II.3 Étude expérimentale	35
II.3.1 Choix des fluides et du solide	35
II.3.1.1 Choix des fluides newtoniens	35
II.3.1.2 Choix du solide	36
II.3.1.3 Choix du tensioactif	36
II.3.2 Protocole expérimentale de mesure des paramètres physique de la goutte	37
II.3.2.1 Appareillage et le mode opératoire	37
Chapitre 3 : Notions sur l'Approche Numérique	
III.1 Simulation numérique	39
III.2 Architecteur du logiciel Gambit	40
III.2.1 Le pré processeur Gambit	41
III.2.2. Maillage	41
III.2.3 Choix du type de maillage	42
III.2.4 Techniques générales de génération du maillage	43
III.2.5 Spécification du schéma de maillage	43
III.2.6 Spécification du type de maillage des éléments face	43
III.3 Modélisation de la surface libre	44
III .3.1 Généralités sur les modèles multiphasiques	44
III .3.1.1 Méthodes lagrangiennes	44
III .3.1.2 Méthodes eulériennes	44
III.4 Simulation avec Fluent	45
III.4.1 Modèle VOF (Volume of Fluid)	45
III.4.1.1 Équations du modèle VOF	45
III.4.1.2 La Tension de Surface	47
III.4.1.3 Le Travail d'Adhésion	47
III.4.2 Modes de calcul sous Fluent	48
III.4.2.1 Choix de la formulation du solveur	48
III.4.2.2 Schémas de discrétisation	49
III.4.2.3 Choix du schéma d'interpolation de la pression	50
III.4.2.4 Choix de la méthode de couplage Pression-Vitesse	51

III.4.2.5 Conditions initiales et aux limites	51
III.5 Procédure de résolution	52
III.5.1 Construction de la géométrie avec Gambit	52
III.5.2 Étapes de simulation sous Fluent	54
III.6 Mise en œuvre de la simulation sous Fluent	62
III.7 Méthodologie	62
III.7.1 Construction de la géométrie	62
III.7.2 Maillage	63
III.7.3 Conditions aux limites	64
III.7.4 Conditions initiales	64
Chapitre 4 : Résultats et discussions	
IV.1 Résultats et discussions	66
IV.1.1 Convergence du schéma	66
IV.1.2 Contour des pressions	66
IV.1.3 Contour de la fraction de volume	67
IV.1.4 Etude comparative	69
IV.1.5 Détermination le nombre de régime	70
IV.1.5.1 Influence de la viscosité en absence de tensioactif	70
IV.1.5.2 Influence de la viscosité en présence de tensioactif	75
IV.1.5.3 Influence du volume	79
Conclusion Générale	83
Annexes	86
Références	

Index Des Figures

Chapitre I :

Figure I.1 : Illustration des forces s'exerçant sur des molécules dans une phase liquide.

Figure I.2 : Goutte d'eau au bout d'une seringue.

Figure I.3 : Goutte pendante à l'extrémité d'une aiguille

Figure I.4: Méthode de l'anneau

Figure I.5 : Schéma descriptif de la méthode de la lame.

Figure I.6 : travail de cohésion d'un matériau et d'adhésion d'un corps sur l'autre en fonction de la tension de surface.

Figure I.7 : Formation d'une calotte sphérique avec un angle de contact θ_e .

Figure I.8 : types de mouillage

Figure I.9 : Images de goniomètre d'une gouttelette d'eau déposée sur une surface lisse montrant l'angle (a) d'avancée, (c) de recul par rapport à (b) l'angle d'équilibre.

Figure I.10 : Effet de la rugosité sur la mouillabilité pour deux surfaces hydrophiles et hydrophobes (a) lisse ; (b) rugueuse.

Figure I.11 : schéma de la ligne triple

Fig. I.12 : Profile de vitesse dans le coin de liquide.

Figure I.13: Structure d'un tensioactif.

Figure I.14 : Répartition des tensioactifs

Figure I.15: Évolution de la tension de surface en fonction de la concentration.

Figure I.16 : Assemblage micellaire du dodécylsulfate du sodium à la concentration de 50, 100, 200 et >250 Mm.

Figure I.17 : Micelle sphérique.

Figure I.18 : Micelle lamellaire.

Figure I.19 : Micelle hexagonale.

Figure I.20 : Micelle Cubique.

Figure I.21 : Nettoyage et élimination des saletés.

Figure I.22 : Émulsion directe

Figure I.23: Émulsion inverse

Figure I.24: Surfactant pulmonaire. Réduction de la tension de surface air-liquide

Chapitre II:

Figure II.1 : paramètres physiques de la goutte θ est l'angle de contact dynamique.

Figure II.2 : Etalement d'une goutte dans le cas de la théorie moléculaire cinétique .

Figure II.3 : Évolution expérimentale du rayon en $\text{Log}(R)$ en fonction du temps $\text{Log}(t)$.

Figure II.4 : Distinction entre l'angle dynamique θ_d et l'angle d'équilibre statique θ_e

Figure II.5 : Appareille de mesure les paramètres physiques de la goutte.

Chapitre III:

Figure III.1 : Types du maillage

Figure III.2 : Fraction volumique associée a une interface sur un maillage discret.

Figure III.3 : Mesure de l'angle de contact.

Figure III.4 : Maillage quadrilatéral.

Figure III.5: Géométrie sous gambit.

Figure III.6: Différent type du maillage.

Figure III.7 : schéma de la géométrie en deux dimensions sous Gambit.

Figure III.8 : Type du maillage quadrilatère.

Chapitre IV:

Figure IV.1 : Schéma de la convergence

Figure IV.2 : Schéma du contour de la pression statique de la goutte.

Figure IV.3 : Schéma du contour de volume fraction de la goutte.

Figure IV.4 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps en échelle linéaire.

(a) pour glycérine pur sans tensioactif ($\sigma=64\text{mN/m}$ $\mu=1.15$ pa.s et $V=15\mu\text{l}$). (b) pour glycérine en présence tensioactif ($\sigma=29$ mN/m $\mu=0.19$ pa.s et $V=15\mu\text{l}$)

Figure (IV.5- IV.17) : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps (En échelle log-log)

Index des symboles

P_{int} , P_{ext} : Les pressions à l'intérieur et à l'extérieur de la goutte

r_1 , r_2 : Les rayons de courbure principaux de l'interface considérée.

F : Force exercée sur la balance

l : périmètre de mouillage,

W^A : Travail d'adhésion

W_{12}^A : Les interactions entre les deux phases 1 et 2 en contact.

W_{12}^C : Le travail de cohésion

ΔG_{11}^C : L'énergie libre de Gibbs

\vec{u} : Le vecteur de vitesse.

p : La pression hydrostatique.

S : Source de ϕ par unité de volume.

a et a_{nb} : Sont des coefficients.

\tilde{n} : L'unité de la normale de la courbure.

n : La surface normale.

$u_r(\mathbf{r}, \mathbf{h})$: L'expression de la vitesse radiale

K_w^0 : La fréquence des sauts

k : La constante de Boltzmann

n : La concentration en sites d'adsorption

$T_{d,l}$, $T_{d,v}$, $T_{d,f}$: La dissipation respectivement au voisinage de la ligne triple triphasique .

V : Volume de la goutte.

R : Le rayon à la base de la goutte

H : La hauteur à l'apex

Ca : Le nombre Capillaire.

Re : Le nombre de Reynolds

Bo : Le nombre de Bond.

k_B : la constante de Boltzmann

l : Périmètre de mouillage.

t : Temps.

t^* : Temps caractéristique.

T : La température.

\mathbf{F}_{SF} : Le vecteur de la force surfacique.

$\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$: Des constantes

\dot{R} : Le biais de la vitesse de la ligne tri phasique.

R_e : Le rayon de la goutte à l'équilibre.

κ^0 : la fréquence de l'équilibre de déplacement moléculaire

λ : la distance moyenne de chaque déplacement

θ_d : Angle de contact dynamique

θ : Angle de contact.

σ : La tension de surface

σ_1 : Énergie de surface de la phase 1,

σ_2 : Énergie de surface de la phase 2

σ_{12} : Énergie interfaciale entre les deux phases 1 et 2.

σ_{SV} , σ_{LV} et σ_{SL} : Les énergies libres respectives de la surface du solide, de la surface du liquide en équilibre avec sa vapeur et de l'interface solide-liquide.

θ_E : L'angle de contact d'équilibre.

τ : Le tenseur des contraintes.

∇ : L'opérateur nabla.

ρ : La masse volumique

μ : La viscosité du liquide.

ε_0 : Fonction de friction.

λ : La longueur moyenne d'un saut .

α_k : la fraction volumique du liquide.

Φ : La valeur d'une variable scalaire au centre de la cellule.

ζ : Le coefficient de frottement en ligne de mouillage

ϕ : un facteur géométrique.

Introduction Générale

Introduction Générale

La dynamique des fluides est une science qui décrit le mouvement des liquides, des gaz et de l'interaction entre eux. C'est un domaine interdisciplinaire qui est traité avec beaucoup de science et d'ingénierie, et a des implications dans le transport, la fabrication, la médecine, la biologie, l'énergie et l'environnement.

La notion de mouillage traduit de manière générale l'aptitude d'un liquide à s'étaler sur un solide ou de façon équivalente l'aptitude d'un solide à être « mouillé » par un liquide .Le phénomène de mouillage intervient donc dans un large champ d'applications qui peuvent être globalement classées en trois catégories :

- Celles pour lesquelles le mouillage est l'essence même du procédé, comme les procédés d'enduction (mise en peinture, impression de différents matériaux) et ceux faisant intervenir les adhésifs (mis en contact de deux solides).
- Celles pour lesquelles le mouillage est utilisé dans une étape de procédé, à savoir la lubrification et le nettoyage de matériaux divers tels que les polymères, mais aussi traitement des fibres textiles ou du papier (dans ce cas, un bon mouillage du solide assure une action optimale du liquide).on peut également citer les procédés de fabrication de certaines formulations nécessitant la dispersion d'un solide dans une phase liquide (fabrication des crèmes solaires).
- Celles qui utilisent le mouillage comme un outil d'analyse de l'état de surface solide avec par exemple le contrôle de la pureté des semi-conducteurs par mesure de l'angle de contact.

Dans tous ces exemple, le but est d'étaler un liquide distribué en fines gouttes sur des surfaces solide .Il parait donc que la compréhension du phénomène d'étalement est indispensable pour appréhender de nombreux procédés industriels. Cependant, ce processus dynamique est globalement très complexe.

Malgré que cette science a été étudiée depuis de nombreuses années, mais on constate parfois que l'écart reste grand entre la pratique et la théorie. Pendant longtemps, la recherche académique s'est focalisée sur des systèmes idéaux : solides plans, liquides simples. Mais il est important de comprendre à quel point les progrès enregistrés dans ce domaine ont pu donnée une assise à toute recherche en offrant des références indispensables. [1]

Le souci reste grand en ce qui concerne le mouillage des surfaces solides par des liquides contenant des additifs et spécialement lorsqu'ils sont des tensioactifs qui posent des

questions difficiles : adsorption aux interfaces conduisant à une modification du mouillage et en particulier la cinétique de mouvement de la ligne de contact en présence ces additifs.

Les études concernant la dynamique de l'étalement prennent généralement les phénomènes qui gouvernent dans la ligne triphasique liquide-solide-vapeur. Ces études, très utiles pour la compréhension des processus physique mais ne permettent cependant pas d'envisager le cas de présence de tensioactif, influence de viscosité et le volume sur la goutte, pour répondre aux attentes des industriels, il paraît donc essentiel d'apporter des solutions simples pour ces problèmes.

Dans ce contexte et devant le manque indéniable de données expérimentales dans le domaine, nous avons choisis d'étudier la dynamique d'étalement de gouttes de fluide (eau-glycérine-tensioactif) sur un substrat solide par une simulation numérique en utilisant le code de calcul Ansys FLUENT 12.0.16.

L'étude menée est scindée en quatre chapitres :

Dans le premier chapitre nous définissons à partir de la littérature la tension de surface, les méthodes de mesure, l'énergie d'adhésion et de cohésion, comme on a décrit l'angle de contact, l'équation de Young et l'influence de l'état surface de solide ainsi que les notions fondamentales des tensioactifs et ces différentes structures et propriétés et leurs applications.

Le deuxième chapitre a pour objectif de synthétiser les travaux antérieurs dans le domaine de mouillage, nous représenterons quelque modèles théoriques qui rendent compte de la cinétique de l'étalement, puis nous exposerons les techniques expérimentales.

Le troisième chapitre vise à décrire le code de calcul fluent son architecteur, le préprocesseur Gambit et les équations sous Fluent, et surtout la méthodologie que nous avons adopté pour l'étude numérique.

Nous abordons dans le quatrième chapitre les résultats numériques du contour de pression et de fraction de volume, ainsi que les graphes du rayon de la goutte en fonction du temps trouvés numériquement, pour chaque type d'étalement.

Le manuscrit s'achève par une conclusion générale. Et les annexes jugés utiles pour le lecteur pour une bonne compréhension de ce manuscrit.

Chapitre I :
Étude Préliminaire

Dans cette partie, nous rappelons quelques concepts généraux relatifs à la physico-chimie et aux propriétés des interfaces.

I.1 Tension/Energie de surface

I.1.1 Définition

Appelée tension de surface ou énergie d'interface ou bien encore la tension superficielle est une force qui existe au niveau de toute interface entre deux milieux différents (entre un solide ou un liquide et un gaz). La tension entre des milieux identiques: deux solides, deux liquides, ou également entre un liquide et un solide est généralement appelée: la tension interfaciale. C'est donc cette force, la tension superficielle, qui permet à la goutte d'eau de ne pas s'étaler sur une feuille, ou à certains insectes de marcher sur l'eau.

I.1.2. Mise en évidence de la tension de surface

Le phénomène de la tension de surface réside dans la distribution anisotropie des forces d'attraction subies par les molécules d'un liquide à la surface de contact avec l'air. Au sein du liquide, toute molécule est soumise de la part des autres à des forces attractives dont la résultante est nulle (figure I.1). Par contre La résultante des forces est non nulle dirigée vers l'intérieur du liquide créant ainsi une tension à la surface. La surface de contact entre l'air et l'eau est donc réduite au maximum, à l'inverse, augmenter l'aire de la surface de contact (interface) nécessite l'application d'une force et la réalisation d'un travail proportionnel à l'accroissement de surface visée. Ainsi, on définit, la tension de surface, σ , exprimée en J/m^2 ou mN/m ou bien dyne/cm en système CGS. [2]

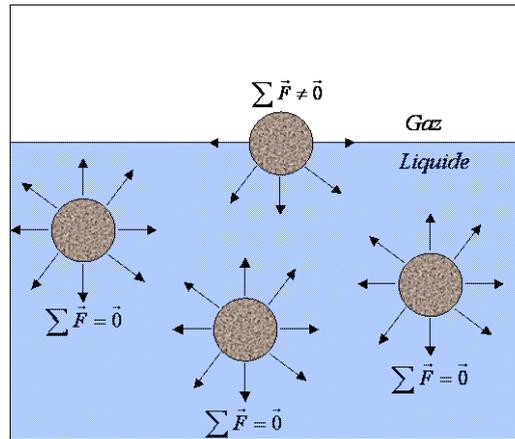


Figure I.1 : Illustration des forces s'exerçant sur des molécules dans une phase liquide.

I.1.3. La loi de Laplace [3]

Une des conséquences de la tension interfaciale est un saut de pression lorsque l'on traverse une interface courbée. Pour le montrer, on peut calculer la pression qu'il faut appliquer sur le piston d'une seringue pour augmenter maintenir une goutte de liquide au bout de son aiguille.

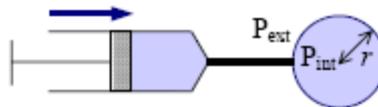


Figure I.2 : Goutte d'eau au bout d'une seringue.

Une variation infinitésimale dr du rayon r de la goutte se traduit par l'équilibre mécanique suivant :

$$(P_{\text{int}} - P_{\text{ext}})d(4\pi r^3 / 3) = \sigma.d(4\pi r^2) \quad (\text{I.1})$$

où P_{int} et P_{ext} désignent respectivement les pressions à l'intérieur et à l'extérieur de la goutte.

On en déduit la loi de Laplace :

$$P_{\text{int}} = P_{\text{ext}} + 2\sigma / r \quad (\text{I.2})$$

Pour une surface quelconque, on montre que cette relation s'écrit :

$$\Delta P = \sigma \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (\text{I.3})$$

où r_1 et r_2 sont les rayons de courbure principaux de l'interface considérée.

I.1.4 Méthodes de mesure de la tension de surface [4]

I.1.4.1. Méthode de la goutte pendante

Cette méthode est basée sur la forme de gouttes à l'équilibre. Les petites gouttes tendent à être sphériques car les effets de tension superficielle dépendent de la surface de la goutte ; les effets gravitationnels, qui dépendent du volume de la goutte, entraînent des distorsions. Lorsque les effets de tension de surface et les effets gravitationnels sont à l'équilibre, on peut déterminer la tension superficielle d'un liquide en fonction de la forme de la goutte obtenue.

La méthode de la goutte pendante est une méthode couramment utilisée, qui nécessite une faible quantité de liquide et qui permet d'obtenir de façon rapide une mesure relativement précise de la tension superficielle. Elle ne peut cependant pas être utilisée dans le cas de liquides volatils.

La procédure générale consiste à former, à l'aide d'une aiguille, une goutte à l'équilibre, c'est à dire juste avant qu'elle ne tombe. On mesure ensuite certaines de ses dimensions à l'aide d'une image numérique. (voir figure I .3)

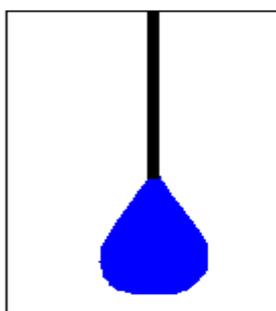


Figure I .3 : Goutte pendante à l'extrémité d'une aiguille

I.1 .4.2 Tensiomètre de du Nouy

Une méthode très populaire, est l'utilisation du tensiomètre de Lecomte du Nouy, qui mesure la force nécessaire pour tirer un anneau (habituellement de 2 cm de diamètre constitué d'un fil ayant une section de 1/ 30 ou 1/ 60 de celle de l'anneau). Cela est réalisé au moyen d'une balance analytique de torsion. L'anneau est en général fait d'un fil de platine qui doit avoir une section uniforme aussi proche que possible du cercle. Les diamètres du fil et de l'anneau doivent être tous deux connus avec précision. (voir figure I .4)

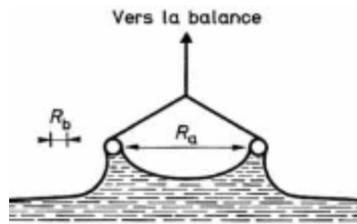


Figure I.4: Méthode de l'anneau

I.1.4.3 Méthode de la lame

Pour la méthode de la lame, le liquide est élevé vers la sonde jusqu'à la détection du contact entre la surface ou l'interface et la lame. La tension maximale s'exerce dès cet instant sur la balance, et l'échantillon n'a plus besoin d'être déplacé au cours de la mesure. La lame, fabriquée en platine rugueux, assure un mouillage parfait des liquides sur la surface, et l'angle de contact est idéalement égal à 0° . Ce qui signifie donc que le terme $\cos \theta$ est pratiquement égal à 1, et qu'il suffit de connaître le périmètre de mouillage et la force mesurée par la balance. (voir figure I .5)

De plus, aucune correction n'est nécessaire lorsqu'on utilise la méthode de la lame. La tension est calculée en utilisant l'équation suivante :

$$\sigma = \left(\frac{F}{l \cdot \cos \theta} \right) \quad (\text{I.4})$$

σ = tension de surface

F = Force exercée sur la balance

l = périmètre de mouillage,

θ = angle de contact.

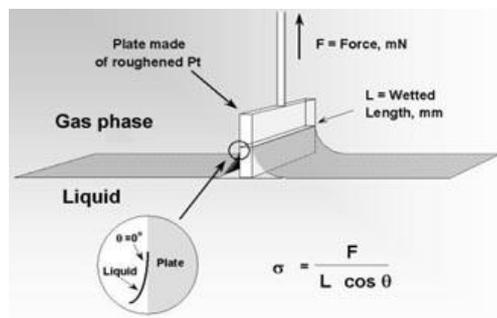


Figure I.5 : Schéma descriptif de la méthode de la lame.

I.1.5. Énergie, cohésion et adhésion [5]

Pour assurer un contact au niveau moléculaire entre deux phases différentes 1 et 2, il est nécessaire de fournir une énergie libre par unité de surface de contact. On appelle cette énergie tension interfaciale σ_{12} . En effet, les interactions cohésives entre les molécules de la phase 1 sont plus satisfaites au sein de la phase 1 qu'au plan de contact phase 1-phase 2. Du déficit d'interactions au contact des phases résulte l'énergie ou tension interfaciale σ_{12} . Dupré fut le premier à introduire le concept du *travail d'adhésion* (W^A) entre deux phases. Pour justifier son raisonnement, il considéra le processus réversible qui consiste à créer, partant de deux corps dissemblables 1 et 2 initialement en contact, une unité de surface 1 et une unité de surface 2 séparées à l'infini (Figure I.6-b). Selon ce raisonnement, le travail d'adhésion s'écrit :

$$W_{12}^A = \sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_{12} \quad (I.5)$$

avec σ_1 : énergie de surface de la phase 1, σ_2 : énergie de surface de la phase 2 et σ_{12} : énergie interfaciale entre les deux phases 1 et 2. W_{12}^A traduit les interactions entre les deux phases 1 et 2 en contact. L'équation (I.5) indique que le travail d'adhésion entre deux phases est d'autant plus faible que l'énergie interfaciale σ_{12} est grande.

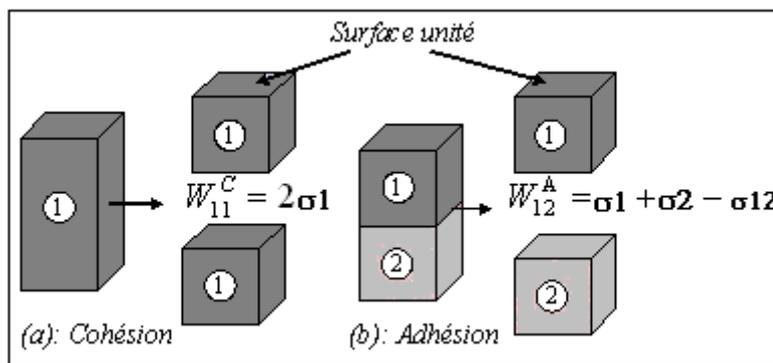


Figure I.6 :
Travail de cohésion d'un matériau et d'adhésion d'un corps sur l'autre en fonction de la tension de surface.

D'une manière analogue, on définit le *travail de cohésion* W_{12}^C comme l'énergie nécessaire pour séparer un corps 1 (liquide ou solide) en deux pour former deux entités de section identique (Figure I.6-a). Le travail de cohésion est défini par :

$$W_{12}^C = 2\sigma_1 \quad (I.6)$$

La cohésion d'un corps peut aussi être décrite au moyen de l'énergie libre de Gibbs ΔG_{11}^C qui va être développé dans les paragraphes suivants. On a alors :

$$\Delta G_{11}^C = -2\sigma_1 \quad (\text{I.7})$$

I.2 Étude des interactions solide/liquide : la mouillabilité

Le concept de mouillabilité se définit comme étant la capacité d'un liquide à s'étendre sur une surface solide [6]

I.2.1 Notion d'angle de contact

Lorsque l'on dépose sur un solide S une goutte de liquide L, celle-ci adopte une configuration particulière qui reflète les interactions se produisant entre le solide et le liquide. Dans le cas idéal, on assiste à la formation d'une calotte sphérique à l'interface solide-liquide délimitée par ce qu'on appelle la *ligne de contact des phases*. Cette dernière tend à repousser l'interface solide-vapeur. La forme adoptée par la goutte à l'équilibre correspond à l'énergie minimale du système. Elle résulte de l'équilibre entre les forces d'adhésion solide-liquide et les forces de cohésion du liquide.

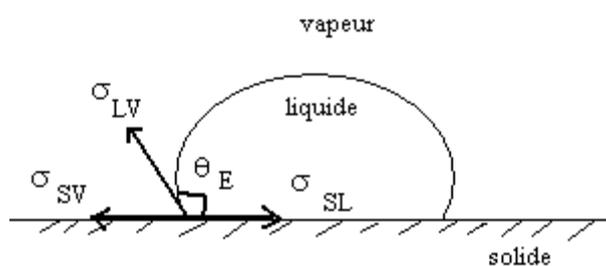


Figure I.7 : Formation d'une calotte sphérique avec un angle de contact θ_E

Sur la Figure (I.7), σ_{SV} , σ_{LV} et σ_{SL} sont les énergies libres respectives de la surface du solide, de la surface du liquide en équilibre avec sa vapeur et de l'interface solide-liquide.

Par ailleurs, σ_{SL} est l'énergie nécessaire pour créer une unité de contact entre le liquide et le solide initialement séparés. L'angle de contact θ_E est défini donc comme l'angle avec lequel le liquide L rejoint le solide S sous une vapeur V à l'équilibre.

I.2.2 Équation de Young [7]

Pour la première fois, (Thomas Young 1805) a fait l'étude de l'angle de contact statique. Il supposa alors que la ligne de séparation des trois phases (solide- liquide-vapeur) en équilibre sous l'action des trois tensions s'exerçant respectivement dans le plan de chacune des interfaces Liquide - Vapeur, Solide- Vapeur et Solide –liquide (voir figure I.18)

La projection de la tension sur le plan de la surface du solide conduit à la relation suivante :

$$\sigma_{LV} \cdot \cos \theta_E = \sigma_{SV} - \sigma_{SL} \quad (I.8)$$

Où θ_E désigne l'angle de contact.

I.2.3 Mouillage partiel/total [8]

De façon générique, le mouillage décrit les phénomènes physiques lorsque trois phases sont mises en contact. Lorsqu'une goutte de liquide est déposée sur une surface solide, deux comportements peuvent apparaître. Soit il existe une ligne de contact qui est la ligne à l'interface des trois phases (aussi appelée ligne triple) (figure I.8) Théoriquement, le mouillage varie entre deux cas extrêmes :

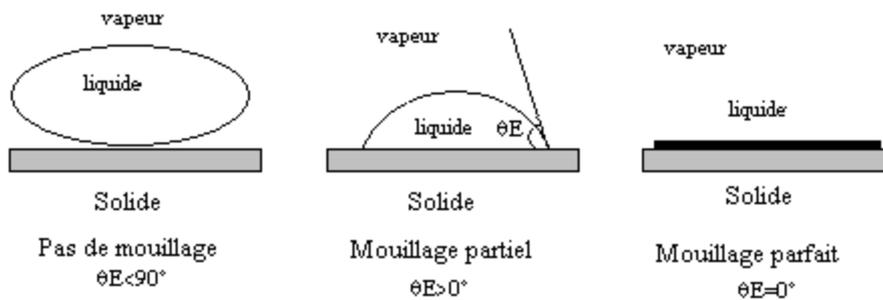


Figure I.8 : types de mouillage

- le premier correspond à un angle de contact nul ($\theta_E = 0^\circ$). Dans ce cas le liquide va s'étaler spontanément et mouiller complètement la surface : on parle alors de *mouillage total* ou *parfait*.
- inversement, lorsque $\theta_E > 90^\circ$, le liquide ne mouille pas le support et prend une forme sphérique avec une zone de contact réduite à un point.
- Lorsque $\theta_E < 90^\circ$ dans ce cas le liquide mouillé partiellement la surface on parle donc de *mouillage partiel*.

I.2.4. Hystérésis de mouillage [9]

L'hystérésis de mouillage provient d'une différence entre l'angle formé par progression du liquide sur la surface sèche (angle d'avancé), et celui du liquide qui se retire de la surface qu'il vient de mouiller (angle de recul) (figure I.9). L'explique par une hétérogénéité soit chimique, soit physique de la surface due à :

- ✓ sa rugosité.
- ✓ présence des impuretés.

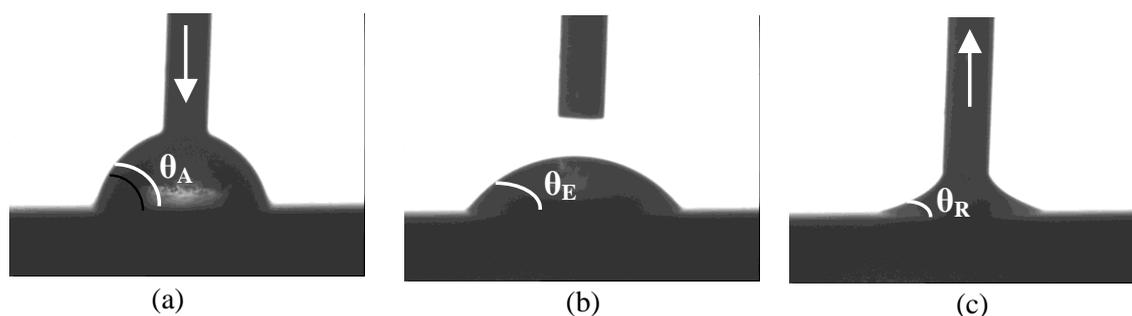


Figure I.9 : Images de goniomètre d'une gouttelette d'eau déposée sur une surface lisse montrant l'angle (a) d'avancée, (c) de recul par rapport à (b) l'angle d'équilibre.

I.2.4.1. Effet de la rugosité de surface sur l'angle de contact

L'effet de la rugosité a été démontré aussi bien qualitativement que quantitativement. Pour un liquide mauvais mouillant, la rugosité tend à aggraver la qualité du mouillage comparée à la même surface si elle était lisse. Inversement, pour un liquide bon mouillant, la rugosité tend à améliorer l'étalement du liquide. Autrement dit, un solide hydrophile rugueux peut devenir davantage hydrophile alors qu'un solide hydrophobe peut devenir "super hydrophobe" comme le montre la figure(I.10).

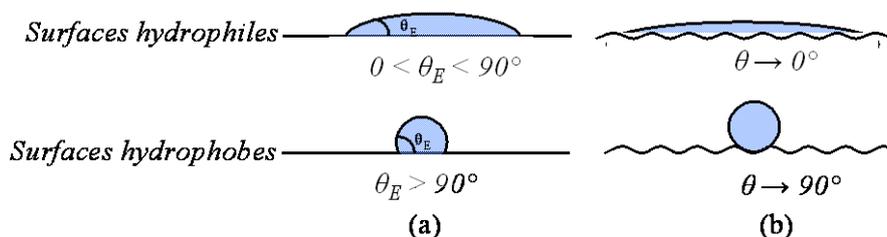


Figure I.10 : Effet de la rugosité sur la mouillabilité pour deux surfaces hydrophiles et hydrophobes (a) lisse ; (b) rugueuse.

En effet, pour un liquide bon mouillant, le liquide s'incorpore dans les rugosités. Le raccordement de la goutte se fait à la fois sur le substrat (avec un angle égal à θ_E , angle qu'on observerait sur une surface lisse) et sur le liquide même (angle nul). L'angle apparent macroscopiquement observé au final est inférieur à θ_E . Inversement, pour un liquide mauvais mouillant, le liquide ne s'incorpore pas dans les rugosités. Le raccordement de la goutte se fait à la fois sur le substrat (avec un angle égal à θ_E) et sur l'air environnant (angle supérieur à θ_E). L'angle macroscopique final observé est supérieur à θ_E .

I.2.4.2. Effet de présence d'impuretés à la surface

Les impuretés de surfaces sont identifiées au niveau du substrat, soit comme des molécules polluantes adsorbées à la surface d'un substrat pur, soit comme des zones hyperénergétiques ou hypoénergétiques par rapport au reste de la surface. Pour un liquide mouillant donné, les zones hyperénergétiques sont définies comme des zones possédant un travail d'adhésion supérieur à celui du reste de la surface. Lors du mouillage, les zones hypoénergétiques vont avoir tendance à augmenter l'angle de raccordement du liquide, à l'avancée. Lors du retrait de la goutte, les zones hyperénergétiques vont retenir le liquide et réduire l'angle de recul [6].

I.2. 5. La ligne triple

I.2 5.1 Définition [10]

La figure 1.11 montre le profil d'une ligne de contact, également appelée ligne triple. Celle-ci est le lieu où se rejoignent trois interfaces : l'interface liquide-vapeur, l'interface solide-liquide et l'interface solide-gaz. La rencontre de ces interfaces est appelée **point de contact**.

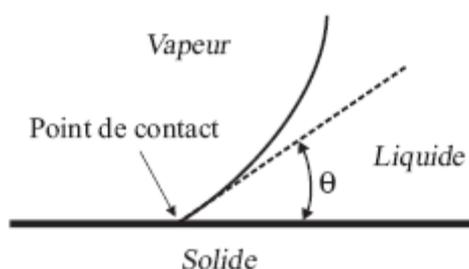


Figure I.11 : schéma de la ligne triple.

I. 2.5.2 Dynamique de la ligne triple[11]

L'angle de contact au repos est l'angle de contact statique θ_E . Celui-ci est donnée par la loi d'Young qui traduit l'équilibre des forces au niveau de la ligne de contact immobile.

Lorsque θ est différent de θ_E , les forces capillaires ne sont plus compensées et la ligne bouge.

si $\theta > \theta_E$, la ligne avance et si $\theta < \theta_E$ elle recule. On parle dans ce cas d'angle dynamique θ_D .

Lorsque l'on fait un bilan des forces au niveau de la ligne de contact, on constate qu'a ce changement d'angle correspond une force F (par unité de longueur de la ligne), qui est celle avec laquelle on tire ou on pousse sur la ligne. On a :

$$F = \sigma(\cos \theta_E - \cos \theta_D) \quad (\text{I.9})$$

Les Tensioactifs

Cette partie présente une étude bibliographique sur les tensioactifs. Après une brève description de leur structure chimique.

I.3 Définition

Les tensioactifs ou surfactants sont des composants essentiels des produits d'hygiène et des détergents ou destinés à d'autres applications industrielles, leurs rôles consistent à améliorer les propriétés de mouillage d'un liquide, et ainsi ils lui permettent de mieux s'étaler sur une surface ou de mieux se disperser, en abaissant la tension superficielle du liquide.

Les tensioactifs sont composés de deux parties : Partie hydrophobe insoluble dans l'eau et partie hydrophile soluble l'eau. (Voir figure I.12).

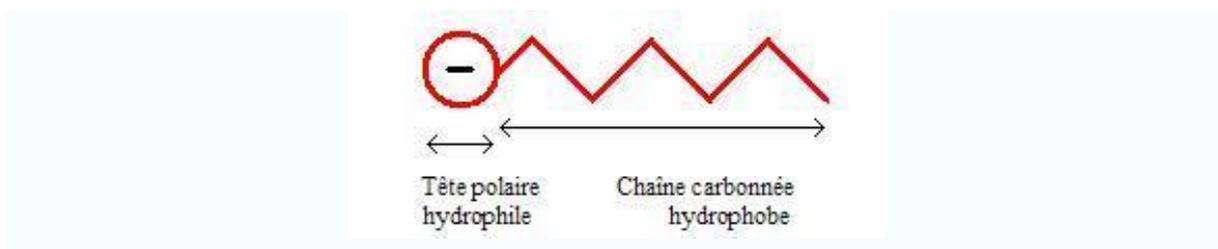


Figure I.12: Structure d'un tensioactif

I. 4 Agent de surface et processus inter faciaux

Les propriétés des solutions aqueuses d'un tensioactif sont une adsorption en surface et aux interfaces ; en effet cette adsorption conduit à deux types d'effets [12] :

- ✓ Diminution d'une ou plusieurs forces de liaison aux interfaces du système.
- ✓ Stabilisation des interfaces par formation de couche adsorbées qui s'opposent mécaniquement à toute diminution de l'aire des interfaces et à leur disparition.

Ces deux facteurs provoquent un abaissement de la tension superficielle.

I.4.1 Amphiphile [13]

Le caractère fondamental d'un surfactant c'est l'amphiphile c'est-à-dire la présence de deux groupements ayant des caractères de solubilité différente dans la molécule :

- ✓ Pour le groupement qui est soluble dans l'huile on dit « lipophile »
- ✓ Pour le groupement qui est soluble dans l'eau on dit « hydrophile ».

I.4.2 Adsorption Aux Interfaces

L'adsorption aux interfaces rend les surfactants plus concentré par exemple :

- ✓ Aux interfaces liquide – liquide et à cause de l'amphiphile chaque groupement se dirige vers le liquide pour lequel il a le plus d'affinité.
- ✓ Aux interfaces liquide –gaz et liquide - solide le liquide repoussant vers l'extérieur c'est-à-dire les groupements qui ont une tendance opposée.

I. 5 Concentration micellaire critique (CMC) [14]

Une propriété importante pour la caractérisation des tensioactifs est la concentration micellaire critique (CMC). Les tensioactifs sont des molécules constituées d'une "tête" hydrophile et d'une « queue » hydrophobe. Lorsqu'un tensioactif est ajouté à de l'eau il vient se placer immédiatement à la surface, avec la queue hydrophobe pointant à l'extérieur de la surface (voir figure I.13). Ce n'est qu'une fois la surface saturée, et n'offrant plus d'espace disponible à de nouvelles molécules de tensioactifs de venir s'y adsorber, que les tensioactifs vont former des structures organisées au sein du liquide : ce sont les micelles. La concentration de tensioactifs au-dessus de laquelle les micelles commencent à se former est appelée concentration micellaire critique (CMC).

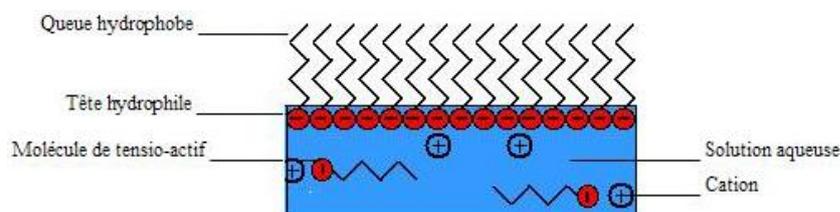


Figure I.13: Répartition des tensioactifs

Les micelles sont des structures sphériques ou ellipsoïdales dont la surface est constituée des têtes hydrophiles des tensioactifs, alors que les queues hydrophobes de ces derniers sont regroupées à l'intérieur. L'effet nettoyant des tensioactifs découle du fait que les substances hydrophobes, telles que les matières grasses ou la suie, peuvent être contenues à l'intérieur des micelles

I.5.1 Procédure standard

La Concentration Micellaire Critique (CMC) peut être déterminée en réalisant la mesure de la tension de surface pour une série de différentes concentrations de tensioactifs. Les tensioactifs présents en solution donnent lieu à une courbe spécifique de la tension de surface en fonction de la concentration. Initialement, pour des concentrations faibles, les molécules de tensioactifs viennent préférentiellement enrichir la surface de l'eau. Pendant cette phase on observe une décroissance linéaire de la tension de surface en fonction du logarithme de la concentration en tensioactifs. Une fois la valeur de la CMC atteinte, la surface est saturée en tensioactifs et toute augmentation de la concentration n'a aucune incidence sur la tension de surface. (voir figure I.14)

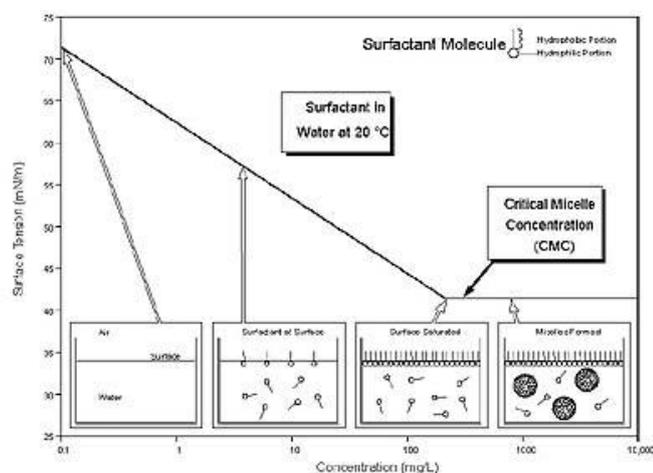


Figure I.14: Évolution de la tension de surface en fonction de la concentration

I.6. Propriétés massique des tensioactifs

I.6.1 Caractère Colloïde Des Solutions Tensioactifs [16]

La quasi-totalité des tensioactifs se comportent en s'associant en micelles lorsque leur concentration augmente et peuvent répondre à l'appellation d'électrolytes colloïdaux.

I.6.2 Structure Des micelles [16]

Lorsqu'on augmente de façon sensible la concentration de tensioactif, on peut observer la formation de micelles plus ou moins allongées puis des micelles cylindriques qui s'associent d'abord en cristaux liquides, donc on peut trouver différente structure qui varie en fonction de concentration de tensioactif [17], par exemple :

Pour la molécule de le dodécylsulfate de sodium ($C_{12} H_{25} SO_4 Na$), on obtient les géométries représentées ci-dessous. (voir figure I.15)

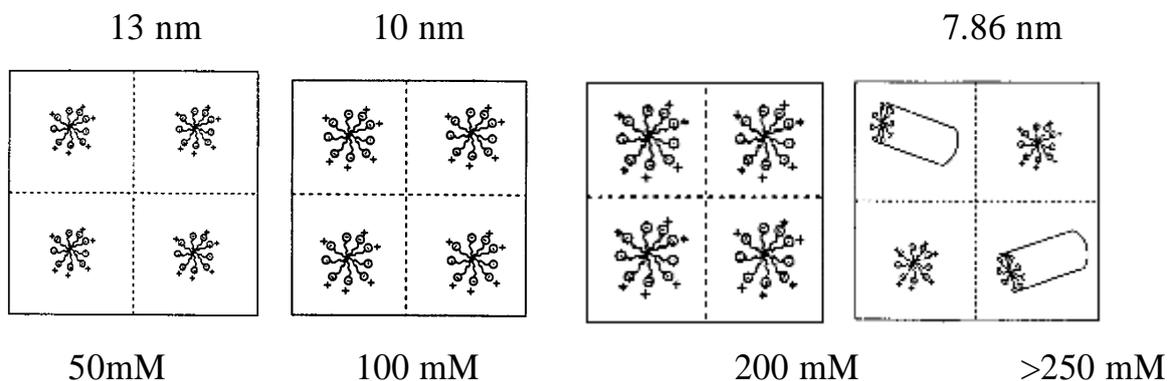


Figure I.15: Assemblage micellaire du dodécylsulfate du sodium à la concentration de 50, 100, 200 et >250 Mm.

I.6.2 .1 Structure Sphérique

Les micelles liquides et sphériques présentent des groupes ioniques en contact avec la phase aqueuse. (Voir figure I.16)

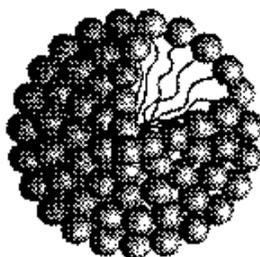


Figure I.16 : Micelle sphérique.

I.6.2.2 Structure Lamellaire

Des études aux rayons X a permis de mettre un autre type d'arrangement, appelé **lamellaire**, il s'agit de structures micellaires lamellaire .Ces structures développent une viscosité moyenne, pressentent une tendance collante. (voir figure I.17)

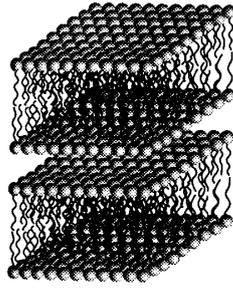


Figure I.17 : Micelle lamellaire.

I.6.2 .3 Structure Hexagonale

Il s'agit de cylindres (empilement de structure) dont le motif de base est constitué de bâtonnets formant un hexagone. Une telle structure est visqueuse et présente un fort caractère solide. (voir figure I.18)

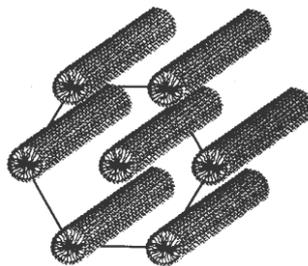


Figure I.18 : Micelle hexagonale

I.6.2.4 Structure Cubique

Cette structure est une structure de type éponge, très visqueuse présente un caractère solide énorme. (voir figure I.19)

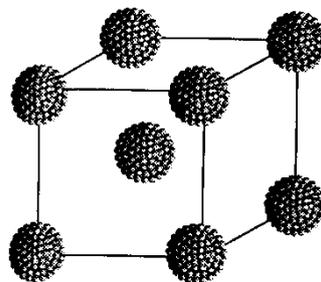


Figure I.19 : Micelle Cubique

I.7. Les différents types de tensioactif

Le classement des tensioactifs est fondé sur la nature de leur partie hydrophile, on distingue, alors, plusieurs types :

I.7.1 Agents de surfaces non ioniques

Leur solubilité dans l'eau est due à la présence dans la molécule de regroupement fonctionnel ayant une forte affinité pour l'eau.

Les produits non ioniques sont majoritairement préparés par condensation d'oxyde d'éthylène sur des corps hydrophobes comportant un ou plusieurs hydrogènes actifs tels que les alcools gras, acides gras, alkylphénols, amines grasses...etc. [18]

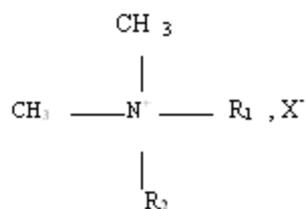
Ils sont généralement classés suivant la nature de la liaison qui unit la partie hydrophile à la partie hydrophobe.

Par exemple

Le plantacare2000 (alkyl(8-16)glucoside) est un liquide visqueux, jaunâtre sa masse volumique est de 390 g.mol⁻¹ avec un excellent pouvoir moussant. Il est utilisé dans la composition des Shampoing, gel douche et les nettoyants pour le visage.

I.7.2 Agents de Surface Cationique

Ils possèdent un ou plusieurs groupes fonctionnels s'ionisent en solution aqueuse pour fournir des ions organiques chargés positivement. Parmi les plus importants produits de cette gamme se trouvent les sels d'ammoniums quaternaires et alcools sulfatés...etc.



La structure d'une amine quaternaire

R1, R2 : alkyl

X : Br. Ou Cl.

Ces composés constituent les principaux liquides adoucissants des textiles.

I.7.3 Agents de surfaces anioniques

Ils possèdent un ou plusieurs groupes fonctionnels s'ionisant en solution aqueuse pour fournir des ions organiques chargés négativement. On peut les subdiviser en trois groupes principaux : les savons, les composés sulfonés et les composés sulfatés [19].

✓ *Les savons*

Ce sont les plus anciens surfactants connus et utilisés, ils sont essentiellement obtenus à partir des corps gras.

✓ *Les composés sulfones*

De formule générale $R-SO_3^-Na^+$, ils constituent la matière première pour les détergents

✓ *Les composés sulfates*

De formule générale : $R-OSO_3^-Na^+$, ils ont un pouvoir moussant très élevé mis à profit dans la préparation des shampoings et bains moussant

I.7.4 Agents de surface amphotères

Ce sont des molécules qui possèdent un ou plusieurs groupements fonctionnels qui peuvent selon les conditions du milieu s'ioniser en solution aqueuse pour poser des surfactants cationiques ou bien anionique.

Exemple :

Acides aminés, esters et amines amino-sulfoniques.

I.8 Les propriétés physico-chimique des tensioactifs

Ces caractéristiques des agents de surface leur confèrent des propriétés particulières définies selon leur principale activité [17] :

I.8.1 Détergents

Les tensioactifs sont dits détergents, lorsqu'ils facilitent l'élimination des salissures et leurs dispersion dans l'eau ; ils sont utilisés pour le lavage et le nettoyage. (voir figure I.20)

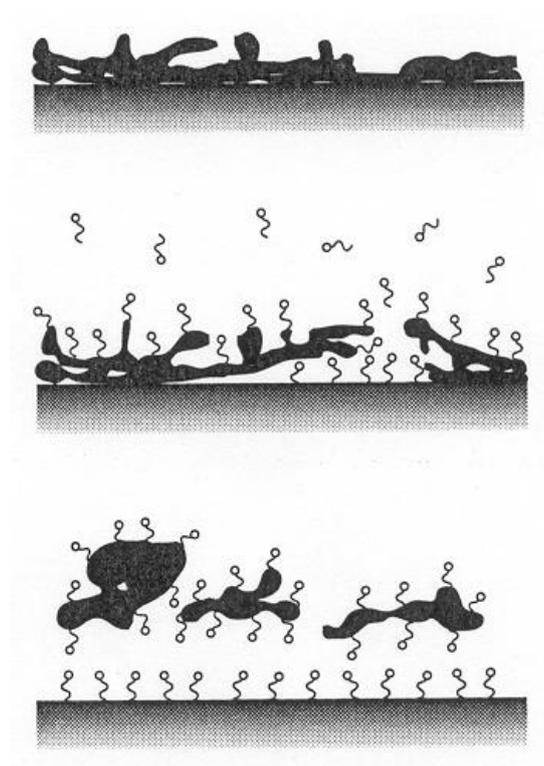


Figure I.20 : Nettoyage et élimination des saletés

I.8.2 Dispersants

Les tensioactifs sont dits dispersants, lorsqu'ils augmentent la stabilité de suspension des petites particules solides dans un liquide.

I.8.3 Emulsionnants

Les tensioactifs sont dits émulsionnants, lorsqu'ils facilitent la formation d'une émulsion, c'est-à-dire une dispersion sous forme de fines gouttelettes d'un liquide dans un autre (huile dans l'eau, par exemple) et en augmente la stabilité.

On distingue deux types d'émulsion selon la phase dispersée :

✓ *Emulsion directe*

L'huile dans l'eau dont la phase continue est l'eau, elle peut être représentée de la manière suivante. (voir figure I.21)

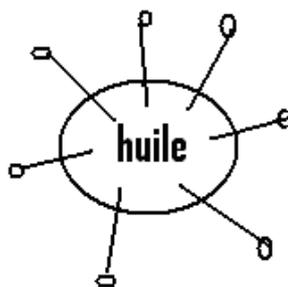


Figure I.21 : Émulsion directe

✓ **Émulsion indirecte:**

Eau dans l'huile, dont la phase continue est l'huile, peut être schématisée comme suite.
(voir figure I.22)

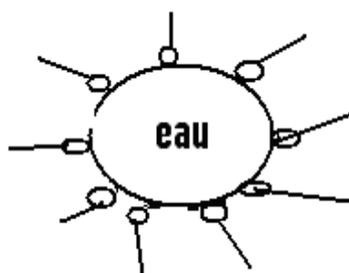


Figure I.22: Émulsion inverse

I.8.4 Mouillants

Les tensioactifs sont dits mouillants, lorsqu'ils favorisent l'étalement d'un liquide sur une surface solide ou augmente sa vitesse de pénétration dans le corps poreux : coton, cuir, papier ...ect

I.8.5 Moussants ou anti- mousses

Les tensioactifs sont dits moussants (resp anti-moussant), lorsqu'ils provoquent ou empêchent la formation de mousses.

I.8.6 Solubilisant

Les tensioactifs sont dits solubilisant, lorsqu'ils augmentent la solubilité apparente dans l'eau de corps peu solubles.

I.9 Domaine d'application des tensioactifs

I.9.1 Surfactant pulmonaire

Le surfactant pulmonaire est un matériau complexe sécrété continuellement dans la lumière alvéolaire par les pneumocytes. Il est constitué d'un grand nombre de molécules différentes : lipides, phospholipides et protéines.

Son rôle principal est de réduire la tension superficielle air/liquide créée par la fine couche de liquide se trouvant à la surface des alvéoles pulmonaires. La réduction de la tension superficielle facilite l'expansion des alvéoles à l'inspiration et les maintient ouvertes pendant l'expiration. Le surfactant joue en outre un rôle dans la perméabilité alvéolaire (effet anti-œdémateux) et dans les mécanismes de défenses contre les micro-organismes.

Le manque de surfactant pulmonaire est la cause du syndrome de détresse respiratoire idiopathique du nouveau-né prématuré ou maladie des membranes hyalines. Il résulte de l'immaturité du poumon du fait de la naissance prématurée. On traite ce déficit par l'administration de surfactant exogène en attendant que la maturité du poumon soit atteinte et que suffisamment de surfactant endogène soit produit, ce qui ne demande que quelques jours de vie. Dans le syndrome de détresse respiratoire aiguë de l'adulte, il existe aussi un déficit en surfactant, mais qui est cette fois secondaire aux lésions de l'épithélium alvéolaire. (voir figure I.23)

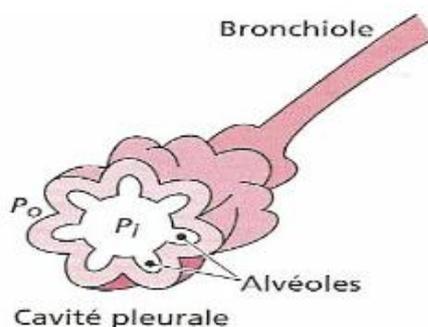


Figure I.23: Surfactant pulmonaire. Réduction de la tension de surface air-liquide

Le composant principal du Surfactant pulmonaire est un phospholipide appelée la dipalmitoyl phosphatidylcholine. Elle comporte un pôle hydrophile et un pôle hydrophobe, ce qui lui permet de s'étaler à la surface alvéolaire, le pôle hydrophile vers la couche de liquide, le pôle hydrophobe vers l'air. Il en résulte la formation d'un film superficiel qui revêt toute la surface alvéolaire.

Le surfactant pulmonaire est éliminé en permanence, ce qui implique un renouvellement constant. Toutefois, une grande partie est recyclée directement et re-sécrétée. La demi-vie des molécules dans l'alvéole est de quelques dizaines d'heures.

I.9.2 surfactant dans l'industrie de l'impression

Le rôle premier du tensioactif incorporé dans la solution de mouillage est d'abaisser sa tensions, afin d'améliorer le mouillage des zones non imprimantes de la plaque. Ce rôle s'exprime à la fois dans un mode statique et un mode dynamique. En effet, il s'agit:

- De maintenir un film de solution de mouillage aussi fin que possible à la surface des zones non imprimantes lorsque la machine est à l'arrêt ou tourne à très faible vitesse (mode statique).
- D'assurer un mouillage rapide et régulier de cette même plaque lorsque la machine tourne à pleine vitesse (mode dynamique).

Par ailleurs, le tensioactif peut réduire le travail nécessaire à la création de petites gouttelettes de solution de mouillage dans l'encre lors de l'émulsionnement. Par exemple :

Les tensioactifs anioniques et cationiques sont utilisés dans la formulation d'encres, par exemple pour mieux disperser des pigments dans des véhicules non polaires.

I.9.3 Surfactant dans l'environnement

Les détergents sont très utilisés dans l'environnement en particulier en ce qui concerne la détergence ménagère, ce qui conduit au rejet dans les eaux de composés dont la biodégradabilité n'est pas probante dans tous les compartiments du milieu aquatique et qui peuvent, en conséquence, s'accumuler dans l'environnement.

Le rejet des tensioactifs dans les eaux en sortie de station d'épuration peut contribuer à la pollution du milieu naturel, si le traitement des eaux usées ne se fait pas de façon assez efficace.

Ainsi le premier problème est la formation de mousse en quantité non négligeable à la surface des eaux. Ce phénomène modifie le contact entre l'air et l'eau et provoque un problème d'oxygénation du milieu ayant une influence sur la vie de la flore aquatique. Au sein même des stations d'épuration la présence de tensioactifs peut avoir une influence néfaste sur le processus d'épuration. Dans ce cas, l'épandage agricole des boues de station d'épuration peut aboutir à la pollution de la nappe phréatique sous-jacente. C'est d'autant plus vrai que la teneur en agents tensioactifs contenus dans les boues de station d'épuration est loin d'être négligeable (de l'ordre de 2 ppm).



Chapitre II :
Analyse théorique

Ce chapitre présente quelques théories et modèles existants relatifs au mouillage, il s'achèvera par une étude expérimentale sur l'étalement d'une goutte sur un substrat solide qui nous a servi de base pour faire notre étude.

II.1 Étude de la dynamique de mouillage

II.1.1 Les bases du problème

Comme tout écoulement, l'étalement d'une goutte sur un solide peut être décrit par l'équation de Navier-Stokes généralisée (ou équation du mouvement), soit :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\nabla \cdot \rho \vec{u} \vec{u}] = -\nabla p - [\nabla \cdot \tau] + \rho \vec{g} \quad (\text{II. 1})$$

Et par l'équation de conservation de la masse, soit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho \vec{u}) \quad (\text{II. 2})$$

Où \vec{u} est le vecteur de vitesse, τ le tenseur des contraintes, ∇ l'opérateur nabla, \vec{g} le vecteur d'accélération de la pesanteur, p la pression hydrostatique et ρ la masse volumique du liquide. Les forces s'exerçant sur la goutte pendant son étalement sont donc à priori les forces inertielles, gravitaires, visqueuses et superficielles. Pour pouvoir comparer ces forces on introduit des différents nombres adimensionnels :

- Le nombre de Reynolds défini comme le rapport des forces inertielles et visqueuses, soit :

$$Re = \frac{\rho R \dot{R}}{\mu} \quad (\text{II. 3})$$

- Le nombre de Bond défini comme le rapport des forces gravitaires et superficielles, soit :

$$Bo = \frac{\rho g R^2}{\mu \sigma} \quad (\text{II. 4})$$

- Le nombre Capillaire défini comme le rapport des forces visqueuses et superficielles, soit :

$$Ca = \frac{\mu \dot{R}}{\sigma} \quad (\text{II.5})$$

Où σ et μ sont respectivement la tension superficielle et la viscosité du liquide, R est le rayon à la base de la goutte et $\left(\dot{R} = \frac{dR}{dt}\right)$ est la vitesse d'avancement de la ligne triphasique.

Les équations du mouvement n'étant pas exploitables en l'état, il est nécessaire de faire au préalable certaines hypothèses simplificatrices (figure II.1). Ainsi, la plupart des modèles supposent que :

- Le fluide newtonien et incompressible (μ et ρ constantes).
- L'hypothèse de la lubrification est applicable, à savoir que la goutte est suffisamment aplatie pour que sa hauteur à l'apex H soit négligeable devant son rayon R à la base.
- Les forces d'inertie sont négligeables ($Re \ll 1$).

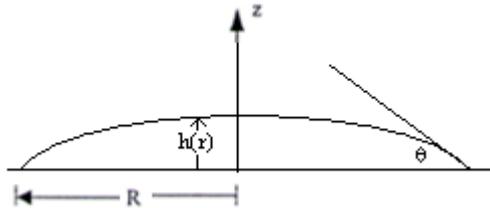


Figure II.1 : paramètres physiques de la goutte θ est l'angle de contact dynamique

Ces trois hypothèses permettent de simplifier les équations du mouvement (II.1) et (II.2) qui se réduisent au système suivant (en coordonnées cylindriques) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{II.6})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial p}{\partial r} = \mu \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} \end{array} \right. \quad (\text{II.7})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \end{array} \right. \quad (\text{II.8})$$

II.2 Les modèles d'étalement classiques [20]

II.2.1 Régime gravitaire –visqueux en l'absence de la tension superficielle

Ce modèle très simple permet de traiter le cas de grosses gouttes dont le rayon de courbure à l'apex demeure faible et dont l'étalement est gouverné par les forces de gravité et visqueuses ($B_0 \gg 1$ et $Ca \gg 1$).

En supposant l'hypothèse de la lubrification vérifiée, les forces d'inertie négligeables et le non glissement à la paroi, il est possible d'établir l'expression du rayon maximal R à la base de la goutte de volume V

$$\frac{R(t)}{V^{1/3}} = 0.894 \left(\frac{\rho g V^{1/3}}{3\mu} t \right)^{1/8} \quad (\text{II.9})$$

Le modèle permet également d'obtenir l'expression de la hauteur h d'un point M du profil distant de r de l'axe de symétrie en fonction du temps soit :

$$\frac{h(r, t)}{V^{1/3}} = 0.531 \left(\frac{\rho g V^{1/3}}{3\mu} t \right)^{-1/4} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]^{1/3} \quad (\text{II.10})$$

On constate donc qu'à priori, en régime gravitaire, à volume de la goutte fixé, le rayon à la base de la goutte varie en fonction t à la puissance $1/8$.

II.2.2 Approche hydrodynamique : le modèle de Tanner [21]

Soit V , le volume d'une goutte qui s'étale sur un substrat solide, avec l'angle de contact appelé θ_d ou θ . Supposons que cette goutte conserve une forme de calotte sphérique lors de son étalement qui est égale à:

$$V = \frac{\pi R^3}{4} \theta_d \quad (\text{II.11})$$

et :

$$\theta_d = C(Ca)^{1/3} \quad (\text{II.12})$$

Dans une étude indépendante, Friz [22] aboutit à la même relation avec $C=3.4$.

Dans ce modèle, la relation du rayon de la goutte en fonction du temps est donnée par :

(Voir annexe 1).

$$R(t) = 0.94 \left(\frac{\sigma V^3 t}{\mu} \right)^{0.1} \quad (\text{II.13})$$

Des études faites avec des gouttes de volumes différents ont permis de mettre en évidence une loi de puissance en fonction du volume V de la goutte, soit :

$$R(t) \sim V^p t^n \quad (\text{II.14})$$

Marmur [23] et Summet al. [24] ont essayé de regrouper les valeurs expérimentales de n obtenues par différents auteurs. Ces résultats expérimentaux montrent que généralement n est compris entre 0.1 et 0.15 et p entre 0.3 et 0.4.

II.2.3 Approche moléculaire cinétique [25]

Le mouvement de la ligne de contact est déterminé par la dynamique statistique des molécules dans une zone de trois phases, le solide, le liquide et le gaz (figure II.2). Les paramètres clés sont κ^0 : la fréquence de l'équilibre de déplacement moléculaires survenant dans la zone triphasique et λ c'est la distance moyenne de chaque déplacement. La force de la ligne de contact est:

$$F_W = 2\sigma(\cos \theta_{eq} - \cos \theta) \quad (\text{II.15})$$

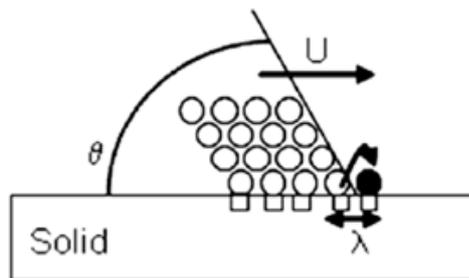


Figure II.2 : Etallement d'une goutte dans le cas de la théorie moléculaire cinétique.

θ et θ_{eq} sont les angles de contact dynamique et d'équilibre, respectivement. Dans ce cas, λ est supposé être la distance entre sites d'adsorption sur la surface solide. L'équation qui en résulte de la vitesse de la ligne mouillage est alors:

$$U = \frac{dR}{dt} = 2\kappa^0 \lambda \sin h \left[\sigma (\cos \theta_{eq} - \cos \theta) \frac{\lambda^2}{2k_B T} \right] \quad (II.16)$$

La loi d'étalement qui caractérise cette approche est :

$$R(t) \approx \left(\frac{56V^2 \sigma}{4\zeta \pi^2} \right)^{\frac{1}{7}} t^{\frac{1}{7}} \quad (II.17)$$

Avec ζ : le coefficient de frottement en ligne de mouillage. (Voir annexe 2).

Conduisant à une loi de puissance de l'étalement de la forme:

$$R(t) \approx t^{\frac{1}{7}} \quad (II.18)$$

II.2.4 Modèle en loi de puissance à deux régions distinctes successives dans le cas du mouillage partiel

De Ruijter et al [26] ont observé expérimentalement que l'évolution temporelle du rayon R à la base de la goutte peut, dans certains cas, présenter deux portions linéaires de pentes différentes en coordonnées logarithmiques (figure II.3). Ils proposent un nouveau modèle combinant deux approches différentes de l'étalement, l'une hydrodynamique, l'autre basée sur la cinétique moléculaire.

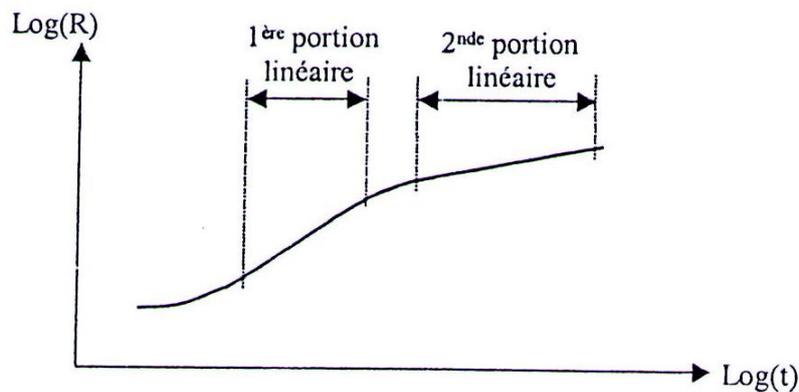


Figure II.3: Évolution expérimentale du rayon en $\text{Log}(R)$ en fonction du temps $\text{Log}(t)$.

II.2.4.1 Description du modèle

Brochard-Wyart et de Gennes [27] considèrent la dynamique du mouillage comme un processus irréversible.

Si l'on peut supposer que la dissipation d'énergie totale comprend les pertes visqueuses dans le coin de liquide adjacent au mouillage en mouvement ligne, plus les pertes dues au frottement de mouillage en ligne, on obtient:

$$\sigma(\cos \theta_{eq} - \cos \theta)U = \frac{6\eta U}{\theta}KU + \zeta U^2 \quad (\text{II. 19})$$

$$U = \frac{\sigma(\cos \theta_{eq} - \cos \theta)}{\frac{6\mu U}{\theta}K + \zeta} \quad (\text{II. 20})$$

Selon l'équation. (II.20), la dissipation visqueuse domine dans les petits angles. Brochard-Wyart et de Gennes [27] ont interprété le coefficient de friction ζ en termes de la théorie moléculaire cinétique.

De Ruijter et al. [26] ont tiré une équation analogue à l'équation (II.20) pour une baisse de la diffusion. Leur analyse suggère que le régime de friction de la ligne de mouillage précède le régime visqueux, qui devient dominant que pour de petit angle contact. Une étude expérimentale est apparue plus tard, pour confirmer ce résultat, montrant le changement prévu dans la loi de puissance qui dépendant du temps, à partir de $R(t) \approx t^{\frac{1}{7}}$ à $R(t) \approx t^{\frac{1}{10}}$ [28].

En combinant le modèle moléculaire cinétique et le modèle hydrodynamique classique de cette manière, il est possible de montrer que la vitesse de la ligne de contact est:

$$U = \frac{dR}{dt} = \frac{\sigma(\cos \theta_{eq} - \cos \theta)}{\zeta_0 + 6\eta\phi \ln(R(t)/a)} \quad (\text{II. 21})$$

où le paramètre ζ_0 est le coefficient de frottement des molécules liquides à l'échelle microscopique dans de la ligne de contact. ζ_0 est défini par

$$\zeta_0 = \frac{\kappa_B T}{k^0 \lambda}$$

Le paramètre a qui est le rayon de la région centrale où la dissipation est négligeable

La solution de l'équation (II.21), avec R_0 rayon initial (à $t = 0$) de la goutte qui évolue dans le temps à l'équilibre est :

$$R(t) = R_0 + \frac{\sigma \cos \theta_{eq}}{\zeta_0 + \eta} t \quad (\text{II.22})$$

Ce régime persiste jusqu'à ce que $t < t_1$, avec:

$$t_1 \approx \frac{(\zeta_0 + \mu)R_0}{\sigma \cos \theta_{eq} \ln \left(\frac{3V}{2\pi a^3} \right)} \quad (\text{II.23})$$

Lorsque $t \gg t_1$, dans le second régime, la dépendance temporelle suit les prédictions de la théorie moléculaire cinétique :

$$R(t) \approx \left(\frac{2V}{\pi} \right)^{\frac{2}{7}} \left(\frac{14\sigma t}{\zeta_0} \right)^{1/7} \quad (\text{II.24})$$

Ce régime existe pour moins de temps d'un certain temps t_2 qui est égal à:

$$t_2 \approx \frac{V^{\frac{1}{3}}}{2\sigma} (\zeta_0)^{\frac{3}{10}} \mu^{-\frac{7}{3}} \left(\ln \left(\frac{V}{a^3} \right) \right)^{-\frac{7}{3}} \quad (\text{II.25})$$

Au moment t supérieur à t_2 , nous observons le troisième régime de propagation qui suit les prédictions de la théorie hydrodynamique:

$$R(t) = \left(\frac{3V}{\pi} \right)^{\frac{3}{10}} \left(\frac{15\sigma t}{\mu \ln \left(\frac{3V}{\pi a^3} \right)} \right)^{\frac{1}{10}} \quad (\text{II.26})$$

Enfin, un régime de relaxation de long temps est observé lorsque la goutte se rapproche de sa forme d'équilibre. Soit le rayon de la base $R(t) = R_{eq} - \delta R(t)$, où $\delta R(t)$ désigne un petit écart de la valeur d'équilibre R_{eq} , conduit à:

$$R_{eq} - R(t) = \delta R(t) \approx \exp \left(-\frac{t}{T} \right) \quad (\text{II.27})$$

Avec

$$T = \frac{\eta R_{eq} \left[\frac{\zeta_0}{\mu} + 8 \ln \left(\frac{3V}{\pi a^3 \theta_{eq}} \right) / 3\theta_{eq} \right]}{3\sigma \theta_{eq}^2} \quad (\text{II.28})$$

II.2.5 Modèle tenant compte du glissement du liquide sur le solide près de la ligne triphasique

La théorie de Hocking[29] introduit une condition de glissement du liquide sur le solide à la ligne triphasique. De même elle considère les différents régimes d'écoulements.

II.2.5 .1 Les hypothèses de Hocking[29]

Concernant les hypothèses à formuler, deux problèmes essentiels sont à souligner :

- Le problème de la vitesse sur la ligne triphasique : le principe d'adhérence admis à l'intérieur de la goutte aboutit à une singularité sur sa bordure (la contrainte de cisaillement devient infinie quand on s'approche de la de contact).pour lever cette incohérence, on définit une vitesse de glissement, laquelle nécessite l'introduction d'un paramètre supplémentaire, la longueur de glissement l_s , qui rend compte des phénomènes particuliers à la jonction triphasique.
- Le problème de l'angle de raccordement : selon les auteurs, cet angle peut être (figure .II.4) soit l'angle de contact macroscopique apparent (identique à l'angle dynamique θ_d ou comme nommé précédemment θ) soit l'angle d'équilibre statique θ_e (qui est en fait l'angle réel observable macroscopiquement).

En $z=0$

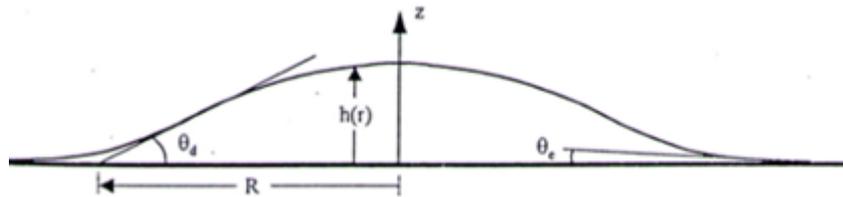


Figure II.4 : Distinction entre l'angle de contact dynamique θ_d et l'angle d'équilibre statique θ_e . Dans le modèle de Hocking[29] .

- L'hypothèse de lubrification étant admise, les équations (II.6) à (II.8) sont toujours valables. Les conditions aux limites à l'interface liquide-solide prennent en compte une vitesse de glissement sur le solide. La condition interfaciale gaz-liquide est explicitée en conservant la composante verticale de vitesse, soit :

$$\begin{aligned} \text{en } z=0 \quad , \quad u_r - l_s \frac{\partial u_r}{\partial z} = 0 \text{ et } u_z = 0 & \quad \text{(II.29)} \\ \text{en } z=h(r) \quad , \quad \tau_{rz} = -\mu \frac{\partial u_r}{\partial z} = 0 \text{ et } u_z = \frac{\partial h}{\partial t} + u_r \frac{\partial h}{\partial r} & \end{aligned}$$

On obtient :

$$\frac{3\mu}{\sigma} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r h^2 (h + 3l_s) \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial h}{\partial r} - \frac{\rho g}{\sigma} h \right) \right) = 0 \quad (\text{II.34})$$

C'est une équation aux dérivées partielles non linéaire d'ordre quatre avec un terme de glissement supplémentaire qui élimine la singularité près de la ligne triple.

La résolution analytique de cette équation est compliquée, pour cela on fait l'approche numérique pour des cas simples, afin de simplifier l'équation. [30]

II.3 Étude expérimentale [31]

II.3.1 Choix des fluides et du solide

II.3.1.1 Choix des fluides newtoniens

Le fluide utilisé c'est un mélange eau- glycérine les principales raisons de ce choix sont :

- La viscosité du glycérol étant mille fois plus élevée que celle de l'eau, pour pouvoir balayer une gamme très large de viscosité.
- Les tensions superficielles de ces deux constituants sont relativement proches.
- L'eau et le glycérol possèdent des fonctions chimiques identiques, les interactions entre le fluide et le solide devraient demeurer a priori quasiment inchangées et ce quelle que soit la composition du mélange.

Les principales caractéristiques physico-chimiques des deux constituants purs sont rappelées dans le tableau suivant :

	Eau	Glycérine
Formule semi développée	H ₂ O	HOCH ₂ -CHOH-CH ₂ OH
Masse molaire	18.015 g.mol ⁻¹	92.095 g.mol ⁻¹
Masse volumique (20C°)	0.998 g.cm ⁻³	1.261 g.cm ⁻³
Viscosité dynamique (20C°)	1.002 mPa.s	1.410 mPa.s
Tension superficielle (20C°)	72 .8 dyne /cm	63 .4 dyne /cm

Tableau II.1 : Propriétés de l'eau et de la glycérine.

II.3.1.2 Choix du solide

Le solide utilisé c'est le verre de 50mm de côté et de 2mm d'épaisseur, car le verre est le matériau le plus accessible et le plus économique pour cette étude, la littérature précise cependant qu'il doit être parfaitement propre pour pouvoir être mouillé par l'eau.

Protocole de préparation des plaques de verre

La procédure de nettoyage de verre est le suivant :

- Pour une première utilisation, trempage des plaques de verre dans une solution aqueuse contient un détergent à base de tensioactif anionique et non ionique pendant une nuit.
- Rinçage abondant à l'eau du robinet.
- Rinçage à l'éthanol.
- Rinçage à l'eau permutée.
- Trempage pendant 10minutes dans de l'eau permutée portée à l'ébullition.
- Rinçage à l'éthanol.
- Séchage au sèche- cheveux.

II.3.1.3 Choix du tensioactif

Le tensioactif utilisé c'est le plantacare2000 (alkyl(8-16)glucoside) de type non ionique(pour les caractéristiques de ce tensioactif, voir la fin du chapitre I), il permet de conserver la viscosité du mélange et d'abaisser la tension superficielle jusqu'à une valeur minimale plus faible .

II.3.2 Protocole expérimental de mesure des paramètres physiques de la goutte.

II.3.2.1 Appareillage et le mode opératoire

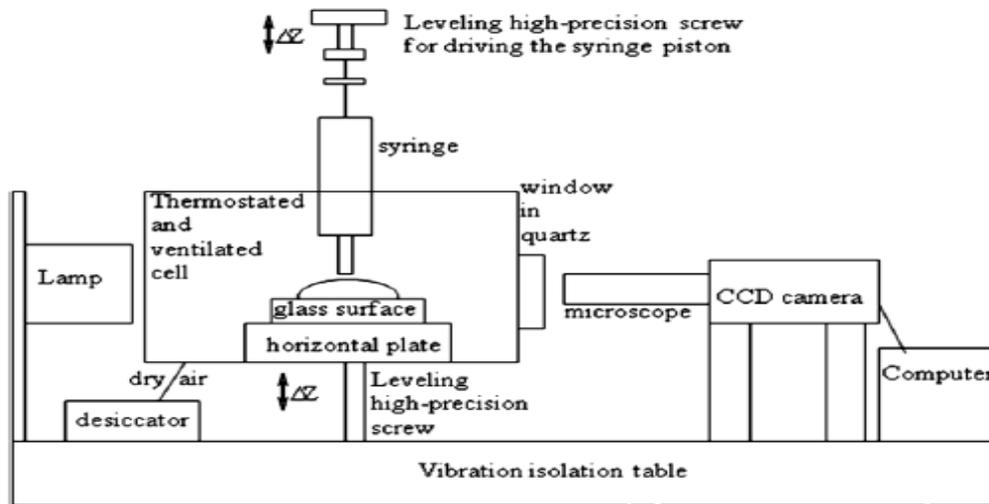


Figure II.5 : Appareille de mesure des paramètres physiques de la goutte.

La figure (II. 5) montre le dispositif expérimental utilisé dans les expériences qui permet de visualiser une goutte posée sur une surface solide au moyen d'une caméra CCD de résolution 572x768 pixels. Le mode opératoire d'étude d'étalement d'une goutte est le suivant :

- Mise en place de la seringue remplie d'un volume V donné d'une solution donnée.
- Mise en place de la surface solide nettoyée.
- Mise en marche du pousse seringue.
- Démarrage de l'enregistrement des séquences d'images de la goutte avec la caméra CCD dès sa sortie de la seringue.
- Traitement les images enregistrée avec le logiciel Optimas version 6.1, (ce dernier logiciel permet de réparer le contour de la goutte) permettant d'avoir une base de données relative aux paramètres physiques de la goutte tels que (le temps, le rayon, la hauteur, l'angle de contact .etc.)

Chapitre III :
Notions sur
l'Approche Numérique

Les codes de calcul, ou codes CFD (Computational Fluid Dynamics), traitent les équations régissant les mouvements d'un fluide. Ces équations traduisent la conservation de la masse et de la quantité de mouvement du fluide (équations de Navier-Stokes), ainsi que la conservation de son enthalpie. Certains codes sont aussi en mesure de décrire le transport de polluant ou les réactions chimiques au sein d'un fluide. Il existe un grand nombre de codes CFD disponibles (plus d'une centaine), qu'ils soient commerciaux, du domaine public ou encore propre à certaines institutions.

Pour notre travail, on a recours au code CFD Fluent, commercialisé par Ansys Fluent, nous disposons de la version 12.0.16. Pour l'usage que nous en avons, il permet de résoudre les équations régissant la dynamique d'étalement d'une goutte sur une surface solide, en deux dimensions. Les problèmes à résoudre peuvent être en régime permanent comme en régime non stationnaire, laminaire ou turbulent. Dans ce qui suit nous précisons l'architecture du code, les équations utilisées pour la compréhension de la suite.

III.1 Simulation Numérique

FLUENT est un code de calcul conçu principalement pour modéliser les écoulements des fluides et les transferts thermiques dans des géométries complexes. Il peut résoudre des problèmes d'écoulement avec des mailles non structurées, qui peuvent être produites pour des géométries complexes, avec une facilité relative.

Les types de mailles supportées sont des mailles, en 2 dimensions, triangulaires ou quadrilatérales, ou en 3 dimensions tétraédriques/hexaédriques/pyramidales, et les mailles (hybrides) mélangées. FLUENT est écrit en langage de programmation C et utilise pleinement la flexibilité et la puissance offertes par ce langage (allocation de la mémoire dynamique). En outre, il utilise une architecture qui lui permet de s'exécuter en plusieurs processus simultanés sur le même poste de travail ou sur des postes séparés, pour une exécution plus efficace.

FLUENT s'utilise à travers une interface graphique. L'utilisateur avancé peut adapter ou augmenter aux besoins l'interface en écrivant des macros et des fonctions de menu, afin d'automatiser certaines procédures. Ainsi, à titre non exhaustif, il a les capacités de traiter tous types d'écoulements :

- Ecoulements en 2D ou en 3D.
- Etats permanents ou transitoires.
- Ecoulements incompressibles ou compressibles incluant toute vitesse de régimes (subsoniques, transsoniques, supersoniques et hypersoniques).
- Ecoulements non visqueux, laminaires ou turbulents.
- Ecoulements Newtonien ou non.
- Transfert de chaleur forcé, par conduction, par convection ou radiatif.
- Les écoulements avec changements de phases.
- Ecoulements en milieu poreux.

Ce code de calcul emploie la méthode des volumes finis comme procédé de discrétisation. Les équations intégrales qui gouvernent l'écoulement, telles que l'équation de continuité, l'équation de conservation de la masse, celle de l'énergie ainsi que d'autres scalaires, comme la turbulence, sont résolues par cette méthode statistique. En utilisant cette technique basée sur un volume de contrôle, "Fluent" passe par les étapes suivantes :

- Division du domaine en volumes de contrôle discrets en utilisant une grille (maillage) de calcul.
- Intégration des équations sur les volumes de contrôle individuels, afin de construire les équations algébriques pour les variables discrètes dépendantes, (les inconnues), telles que les vitesses, pression, température ...
- Linéarisation des équations discrétisées et solution du système d'équations linéaires résultant, pour pouvoir mettre à jour les valeurs des variables dépendantes (inconnues). [32]

III.2 Architecture du Logiciel Gambit[33]

Comme tout logiciel de CFD (Computational Fluid Dynamics), il est composé de trois éléments : le pré processeur, le solveur et le post processeur :

- La définition du problème à résoudre s'effectue à l'aide du pré processeur GAMBIT. Il permet de représenter la géométrie du système, de définir le type des conditions aux limites et aux frontières du domaine, de spécifier le type de matériau (fluide ou solide).

Il fournit aussi la possibilité de discrétiser le domaine, en proposant plusieurs algorithmes de maillage suivant sa géométrie.

- Le solver permet de définir numériquement les conditions opératoires (gravité, pression) dans lesquelles est effectuée la simulation, ainsi que la spécification des conditions aux limites. Enfin, il permet de choisir le processus itératif, en proposant notamment plusieurs schémas numériques pour la discrétisation spatiale et temporelle, et pour le couplage de la vitesse et de la pression. Il offre également une interface permettant de contrôler à tout moment l'état d'avancement des calculs
- Le post processeur est l'élément qui permet de visualiser la géométrie et le maillage du domaine, mais surtout d'afficher les résultats obtenus. Il est ainsi possible de visualiser les champs de vecteur vitesse, les champs de pression, de turbulence ainsi que toutes les autres grandeurs calculées sur un segment, une section du domaine ou sur tout le volume. Il offre aussi la possibilité de tracer des courbes et de visualiser les lignes de courant ou la trajectoire de particules.

III.2.1 Le pré processeur GAMBIT [34]

Le logiciel Gambit est le préprocesseur qui permet de construire la géométrie du problème, de mailler des domaines de géométrie d'un problème de CFD. Il génère des fichiers tels que ceux ayant l'extension *.msh pour Fluent.

Gambit regroupe trois fonctions : définition de la géométrie des problèmes (construction de la géométrie), le maillage et sa vérification, la définition des frontières (Types de conditions aux limites) et définitions des domaines de calculs.

III.2.2 Maillage

La génération du maillage (en 2D ou en 3D) est une phase très importante dans une analyse CFD, vu l'influence de ses paramètres sur la solution calculée. Pour les applications en turbomachines, la technique de génération de maillage peut être résumée sous la forme suivante :

- La géométrie doit être préparée au préalable, avec la définition de tous les composants de la turbomachine, moyeu, volute, stator, rotor ...etc., sous forme de données numériques, fichier CAD préétabli ou plutôt sous forme de fichier maillage qu'on peut importer sous Gambit.
- La géométrie qui représente les différents domaines fluides est décomposée en sous domaines « maillables ».

- Maillages des sous domaines fluides.

La réduction du temps nécessaire à la génération du maillage est un critère de bonne maîtrise de l'utilisation des outils CFD dans le design des turbomachines.

III.2.3 Choix du type de maillage

a) Maillage structuré (quadra/hexa)

Il est beaucoup plus facile de le générer en utilisant une géométrie à multi bloc, il présente les avantages suivants :

- Économique en nombre d'éléments, présente un nombre inférieur de maille par rapport à un maillage non structuré équivalent.
- Réduit les risques d'erreurs numériques car l'écoulement est aligné avec le maillage.

Ses inconvénients sont:

- Difficile à le générer dans le cas d'une géométrie complexe
- Difficile d'obtenir une bonne qualité de maillage pour certaines géométries complexes

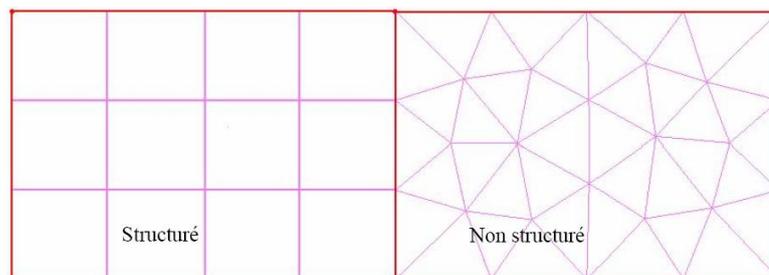


Figure III.1 : Types du maillage

b) Maillage non structuré (tri/tétra.)

Les éléments de ce type de maillage sont générés arbitrairement sans aucune contrainte quant à leur disposition.

Ses avantages sont:

- Peut être généré sur une géométrie complexe tout en gardant une bonne qualité des éléments.
- Les algorithmes de génération de ce type de maillage (tri/tétra) sont très automatisés

Ses inconvénients sont:

- Très gourmand en nombre de mailles comparativement au maillage structuré
- Engendre des erreurs numériques (fausse diffusion) qui peuvent être plus importantes si l'on compare avec le maillage structuré

c) Maillage hybride

Maillage généré par un mélange d'éléments de différents types, triangulaires ou quadrilatéraux en 2D, tétraédriques, prismatiques, ou pyramidaux en 3D.

Son avantage est qu'il combine entre les avantages du maillage structuré et ceux du maillage non structuré.

III.2.4 Techniques générales de génération du maillage

Pratiquement, il n'existe pas de règle précise pour la création d'un maillage valable, cependant il existe différentes approches qui permettent d'obtenir une grille acceptable.

Nous pouvons résumer ces règles ainsi :

- Maintenir une bonne qualité des éléments.
- Assurer une bonne résolution dans les régions à fort gradient.
- Assurer un bon lissage dans les zones de transition entre les parties à maillage fin et les parties à maillage grossier.
- Minimiser le nombre total des éléments (temps de calcul raisonnable).

III.2.5 Spécification du schéma du maillage

GAMBIT spécifie un type d'élément de maillage surfacique, Chaque élément est associé avec un type de maillage :

Quad : Spécifie que le maillage contient seulement des éléments quadrilatéraux

Tri : Spécifie que le maillage contient seulement des éléments triangulaires

Quad/Tri : Spécifie que le maillage est composé d'éléments quadrilatéraux mais peut contenir des éléments triangulaires.

III.2.6 Spécification du type du maillage des éléments face

GAMBIT nous donne les types de maillage suivant:

Map : Crée un maillage régulier et structuré

Submap : Divise une face de géométrie complexe en régions plus régulières et crée un maillage structuré en chaque région.

Pave : Crée un maillage non structuré.

Tri Primitive: Divise la face en trois régions et crée un maillage quadrilatère mappé dans chaque région.

III.3 Modélisation de la surface libre

III .3.1 Généralités sur les modèles multiphasiques [35]

Les écoulements à surface libres restent un problème difficile à simuler numériquement .Ils ont donné lieu à une recherche abondante et de nombreuses méthodes numériques ont été développées, il n y a pas de méthode globale qui résout tous les problèmes surtout en ce qui concerne les écoulements diphasique.

Les écoulements à surface libres sont caractérisés par le fait que l'interface sépare deux fluides non miscibles. Les méthodes de transport d'interfaces peuvent être classifiées en deux principales familles en fonction de maillage que l'on va utiliser : la méthode lagrangienne (sur un maillage mobile) et la méthode eulérienne (sur un maillage fixe).

III .3.1.1 Méthodes lagrangiennes

Les méthodes lagrangiennes sur maillage mobile permettent de représenter l'interface comme une réelle discontinuité et de suivre son évolution de manière très précise. Le transport de l'interface se fait soit en déformant le maillage au cours du calcul soit en régénérant le maillage après avoir advecté l'interface. Le principal avantage de cette méthode est le suivi très précis de l'interface qui permet d'imposer très facilement et avec rigueur les conditions aux limites de l'interface. Ces méthodes sont limitées aux écoulements où l'interface ne subit pas de grandes déformations, car cela conduit à des maillages trop déformés. Les cas où l'on a rupture ou reconnections de l'interface ne peut pas être traité par ce type de méthode de transport d'interface.

III .3.1.2 Méthodes eulériennes

Les méthodes eulériennes sont en général utilisées sur un maillage fixe. Dans ces méthodes une fonction de présence permet de localiser la présence de fluide. L'interface est alors reconstruite à partir du changement des propriétés physiques.

III.4 Simulation avec Fluent

Fluent propose trois modèles principaux fondés sur l'approche Eulérienne: le modèle de mélange ou «Mixture», le modèle d'Euler et le modèle VOF (Volume Of Fluid).

III.4.1 Modèle VOF (Volume of Fluid)

Pour cette méthode nous repérons les fluides à l'aide d'une fonction dont la valeur varie entre 0 et 1, pour repérer les deux fluides. Cette fonction scalaire représente le volume occupé par le fluide dans une cellule de calcul. Donc, une maille pleine de fluide a une valeur de 1 et une maille vide a la valeur 0. Si la valeur de la fraction volumique est comprise entre ces deux valeurs cela indique la présence de l'interface et on connaîtra directement la proportion occupée par le fluide [35].

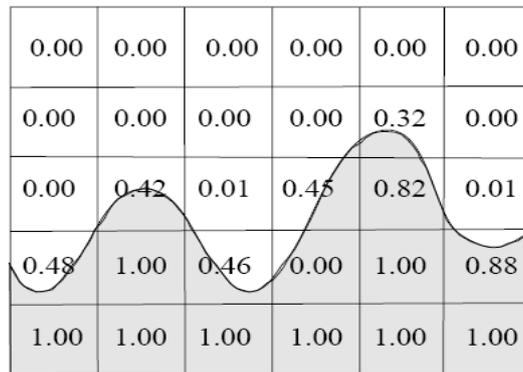


Figure III.2 : Fraction volumique associée à une interface sur un maillage discret.

III.4.1.1 Équations du modèle VOF [36]

Les équations de masse et de conservation du moment pour chaque phase sont donnés par :

$$\nabla \cdot V = 0 \quad (\text{III.1})$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \nabla \cdot (VV) = -\frac{1}{\rho} [\nabla P - \mu \nabla^2 V] + g + \frac{1}{\rho} F_{SF} \quad (\text{III.2})$$

Où V est le vecteur vitesse, P est la pression, et F_{SF} est le vecteur de la force surfacique, μ c'est la viscosité et ρ la densité.

La densité du mélange est calculée comme suit :

$$\rho = \sum \alpha_k \rho_k \quad (\text{III.3})$$

Où α_k est la fraction volumique du liquide. Tout autre propriété de mélange est calculée comme suit:

$$\varphi = \frac{\sum \alpha_k \rho_k \varphi_k}{\sum \alpha_k \rho_k} \quad (\text{III.4})$$

Si :

$\alpha_k=0$: la cellule est vide.

$\alpha_k=1$: la cellule est pleine.

$0<\alpha_k<1$: la cellule contient une interface entre les fluides.

L'interface entre les deux phases a été suivie par la résolution de l'équation de continuité pour la fonction de la fraction volumique :

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + V \cdot \nabla \alpha_k = 0 \quad (\text{III.5})$$

L'équation de la fraction volumique de la phase primaire (gaz) n'a pas été résolue et a été obtenue par l'équation suivante:

$$\sum \alpha_k = 1 \quad (\text{III.6})$$

En plus des équations de bilan, la tension de surface doit être prise en compte. La tension de surface a été modélisée comme variation régulière des pressions capillaires à travers l'interface.

$$F_{SF} = \alpha_1 \kappa n \left[\frac{\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2}{1/2(\rho_1 + \rho_2)} \right] \quad (\text{III.7})$$

$$n = \nabla \alpha_2 \quad (\text{III.8})$$

$$k = -(\nabla \cdot \tilde{n}) = \frac{1}{|n|} \left[\left(\frac{n}{|n|} \cdot \nabla \right) |n| - (\nabla \cdot n) \right] \quad (\text{III.9})$$

Où n est la normale à la surface, \tilde{n} est l'unité de la normale et κ est la courbure. La normale à la surface n a été évaluée dans l'interface contenant les cellules et nécessite la connaissance de la quantité de volume du fluide présente dans la cellule.

III.4.1.2 La Tension de Surface [33]

La tension de surface dans ANSYS FLUENT est la force continue de surface (CSF). Avec ce modèle, l'addition de la tension superficielle au calcul VOF dans le terme source dans l'équation dynamique. Pour comprendre l'origine du terme source, considérons le cas particulier où la tension de surface est constante le long de la surface, et où seules les forces normales à l'interface sont considérées. Il peut être démontré que la différence de pression dans la surface dépend du coefficient de la tension de surface σ , et de la courbure κ de la surface mesurée par deux rayons dans des directions orthogonales, R_1 et R_2 :

$$p_2 - p_1 = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = \sigma \cdot \kappa \quad (\text{III.10})$$

Avec p_2 et p_1 sont les pressions dans les deux fluides de part et d'autre de l'interface.

Dans ANSYS Fluent, une formulation du modèle de CSF est utilisée, là où la courbure de la surface est calculée à partir des gradients locaux dans la surface normale à l'interface. Soit n la normale à surface et α_k la fraction volumique du liquide.

La tension de surface peut être écrite en termes de saut de pression dans la surface. La force à la surface peut être exprimée comme une force de volume en utilisant le théorème de la divergence. C'est cette force de volume qui est le terme source ajoutée à l'équation de moments. Elle a la forme suivante :

$$F_{vol} = \sum_{pairs\ ij, i < j} \sigma_{ij} \frac{\alpha_i \rho_i \kappa_j \nabla \alpha_j + \alpha_j \rho_j \kappa_i \nabla \alpha_i}{\frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j)} \quad (\text{III.11})$$

III.4.1.3 Le Travail d'Adhésion

Une option pour spécifier l'angle de contact en liaison avec la tension de surface est également disponible dans le modèle VOF.

θ_w : est l'angle à l'interface de la paroi. Alors la normale à surface de la cellule est :

$$\hat{n} = \hat{n}_w \cos \theta_w + \hat{t}_w \sin \theta_w \quad (\text{III.12})$$

\hat{n}_w et \hat{t}_w sont respectivement, les vecteurs unitaires normales et tangentielles à la paroi.

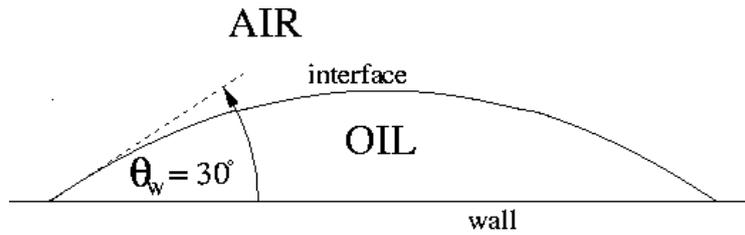


Figure III.3 : Mesure de l'angle de contact. [33]

III.4.2 Modes de calcul sous "Fluent"

"Fluent" offre deux modes de calcul: le mode "**double précision**" et le mode "**simple précision**".

- Dans le mode "double précision", les nombres à virgule flottante sont représentés en utilisant 64 bits, alors que le mode "simple précision" utilise une représentation à 32 bits. Le revers de cette précision est que le premier mode requiert beaucoup plus de mémoire. En outre, Le mode "double précision" est préconisé, entre autres, pour les écoulements impliquant des longueurs d'échelles très disparates.

III.4.2.1 Choix de la formulation du solveur

En démarrant "Fluent" on peut choisir entre plusieurs formulations du solveur:

- **La formulation "Segregated", ou isolée (implicite):** Cette formulation résout les équations de continuité, de quantité de mouvement et quand c'est nécessaire celle de l'énergie, séquentiellement, c'est-à-dire isolées les unes des autres (implicite par défaut). Le solveur isolé est classiquement employé pour les écoulements incompressibles à modérément compressibles. De ce fait, c'est la formulation que l'on a choisi d'utiliser pour notre problème.
- **La formulation "Coupled", ou couplée soit implicite ou explicite:** Cette option permet aux équations gouvernantes d'être résolues simultanément, c'est-à-dire couplées les unes avec les autres. Cependant, les autres scalaires, tels que les quantités de la turbulence, sont traités isolément. Initialement, ce mode a été conçu pour les écoulements compressibles à grandes vitesses. Ce qui lui donne un avantage pour le traitement des écoulements hautement couplés (forte interdépendance entre la densité, l'énergie et les moments) avec des forces de volumes (ex. flottabilité et forces de rotation). Il faut signaler que le solveur couplé implicite requiert presque le double de la mémoire qu'utiliserait le solveur isolé, alors que le solveur couplé explicite vient au

milieu, en terme de besoins en ressources, mais convergera plus lentement que la formulation implicite et n'est conseillé que pour les écoulements non stationnaires.

III.4.2.2 Schémas de discrétisation

En régime permanent, la forme linéaire des équations discrètes est la suivante :

$$a_p \phi = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (\text{III.13})$$

a_p et a_{nb} : sont des coefficients.

nb : représente les indices des cellules voisines. Le nombre de cellules voisines dépend de la topologie du maillage (6 cellules voisines pour un maillage hexaédrique).

ϕ : est la valeur d'une variable scalaire au centre de la cellule.

Cette équation est à écrire pour chaque cellule de centre P du domaine. Le système d'équations aux dérivées partielles est donc transformé en un système algébrique représenté sous forme de produit de matrices comprenant un grand nombre de coefficients nuls.

Fluent propose trois schémas de discrétisation. Les plus utilisés pour notre étude sont :

- **schéma "QUICK"** (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinetics): Il procure une meilleure précision que le schéma au second ordre pour les écoulements rotationnels et tourbillonnaires avec un maillage régulier. Cependant, il ne s'applique pas à un maillage triangulaire. Et ce système est basé sur une moyenne pondérée des interpolations de second ordre et interpolations central de la variable. Pour la face e de la figure III.4, si le débit est de gauche à droite, cette valeur peut être écrite comme :

$$\phi_e = \theta \left[\frac{S_d}{S_c + S_d} \phi_p + \frac{S_c}{S_c + S_d} \phi_E \right] + (1 - \theta) \left[\frac{S_u + 2S_c}{S_u + S_c} \phi_p - \frac{S_c}{S_u + S_c} \phi_W \right] \quad (\text{III.14})$$

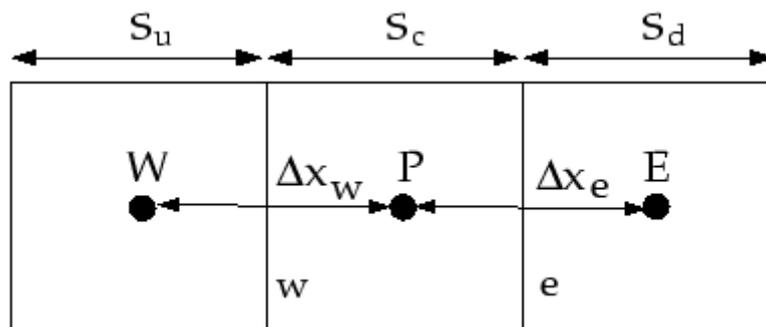


Figure III.4 : Maillage quadrilatéral.

ϕ : valeur de convection à travers la face

S : source de ϕ par unité de volume

$\theta = 1$: c'est une interpolation centrée au second ordre.

$\theta = 0$: c'est le schéma second ordre amont.

$\theta = 1/8$: c'est le schéma Quick traditionnel, dans le code Fluent, θ est choisi d'une manière dépendante de la solution pour éviter d'introduire un nouvel extremum à celle ci, à noter que pour un maillage hybride θ sera pris nul pour les faces des cellules non quadrilatérales ou non hexaédrique.

- **Schéma amont du premier ordre:** Ce schéma permet une certaine stabilité dans les calculs mais il est responsable de diffusion numérique.
- **Schéma amont du second ordre:** l'utilisation de cette méthode permet de minimiser la diffusion numérique mais peut faire diverger le calcul.

III.4.2.3 Choix du schéma d'interpolation de la pression

Pour la plupart des cas, le schéma "Standard" est acceptable. Pour des écoulements spécifiques, on peut choisir parmi les options suivantes:

- **Le schéma force de volume pondéré "Body-Force-Weighted"** : recommandé pour les écoulements impliquant d'importantes forces de volume (ex. convection naturelle à haut nombre de Rayleigh).
- **Le schéma "PRESTO!" (PREssure Staggering Option):** approprié pour les écoulements hautement tourbillonnaires, à grande vitesse de rotation ou les écoulements dans des domaines fortement courbés.
- **Le schéma au second ordre :** utilisé pour les écoulements compressibles et pour améliorer la précision en écoulements incompressibles.

- **Le schéma linéaire "Linear"** : disponible comme alternative au cas où les autres options ont des difficultés de convergence ou génèreraient des comportements non physiques.

III.4.2.4 Choix de la méthode de couplage Pression-Vitesse

Si les vitesses sont définies aux nœuds d'un volume de contrôle ordinaire (comme les autres scalaires: pression, température), il est démontré qu'un champ de pression hautement non uniforme agira comme un champ uniforme sur les équations de quantité de mouvement discrétisées. La solution passe par la définition des vitesses sur une grille décalée et l'emploi d'algorithmes tels que "SIMPLE" pour résoudre ce lien ou couplage entre la pression et la vitesse. La famille des algorithmes "SIMPLE" est essentiellement une procédure d'estimation et correction" pour le calcul de la pression sur la "grille décalée" des composantes de la vitesse.

"Fluent" propose trois méthodes pour le couplage pression-vitesse:

- Les deux premières, très similaires, sont la méthode "**SIMPLE**" (Semi-Implicit Method for a Pressure Linked Equations) et la méthode "**SIMPLEC**" (SIMPLE Consistent). Cette dernière méthode se différencie de la première par le fait qu'on peut lui assigner un facteur de relaxation (correction) de pression proche de 1, ce qui accélère la convergence dans la plupart des cas, mais peut conduire à des instabilités de la solution.
- **Méthode "PISO" (Pressure-Implicit with Splitting of Operators)**: Cette méthode fait partie des algorithmes de la famille "SIMPLE". Elle est recommandée pour les écoulements non stationnaires ou pour les maillages contenant des cellules très obliques.

III.4.2.5 Conditions initiales et aux limites [37]

Conditions initiales

Pour résoudre les équations du modèle il y a lieu de fournir au modèle numérique les conditions initiales qui représentent l'état de l'écoulement lors du démarrage de la simulation. Comme Il est nécessaire de donner des vitesses initiales de l'écoulement dans différents domaines fluides (au niveau des volumes d'eau et d'air), ainsi que les valeurs initiales pour la turbulence, la pression et la fraction volumique (position initiale de la surface libre) et si les variables possèdent des valeurs initiales constantes, il est possible de les livrer directement au logiciel. Dans le cas contraire, l'utilisateur peut créer un sous-programme (fonctions définies

par l'utilisateur ou User Define Fonction) dans lequel il est possible d'établir des profils initiaux non uniformes pour chacune des variables de l'écoulement.

Conditions aux limites

Une fois que nous avons représenté la géométrie du système étudié, nous devons fixer des conditions aux limites du système sur les valeurs de la pression P , de la vitesse U , de l'énergie cinétique turbulente k et du taux de dissipation d'énergie cinétique turbulente ε .

Plusieurs types de conditions aux limites sont proposés dans le code de calcul Fluent (conditions de symétrie, de pression, de flux nul, de vitesse imposée ...).

On utilise essentiellement trois : vitesse d'entrée, pression de sortie et conditions de rugosité :

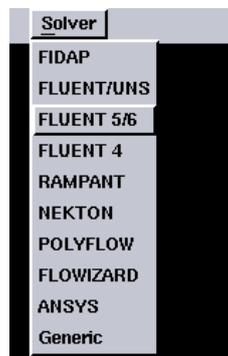
- La première condition aux limites « velocity-inlet » correspond à une vitesse imposée.
- La deuxième condition « pressure-outlet » (pression de sortie) est appliquée au niveau des sorties (sortie de fluide à la pression atmosphérique).
- La troisième « type wall », la condition de rugosité permet également de modéliser l'effet de la paroi sur l'écoulement.

III.5 Procédure de résolution

III.5.1 Construction de la géométrie avec Gambit

Étape 1 : choix du solveur

Avant même de créer la géométrie il faut choisir le type de solveur; c'est-à-dire le type de logiciel (ici fluent) qui doit modéliser et résoudre les équations du problème physique posé.



Étape 2: création de la géométrie

Pour la création de la géométrie, soit on se base sur une géométrie prédéfinies, soit on crée la face à partir des points, ensuite des lignes, enfin la face.

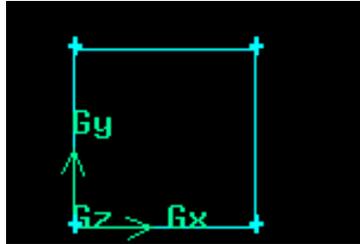


Figure III.5: Géométrie sous gambit.

Étape 3 : maillage de la géométrie

La face doit être maillée par Gambit qui traite plusieurs types de maillages très compliqués.

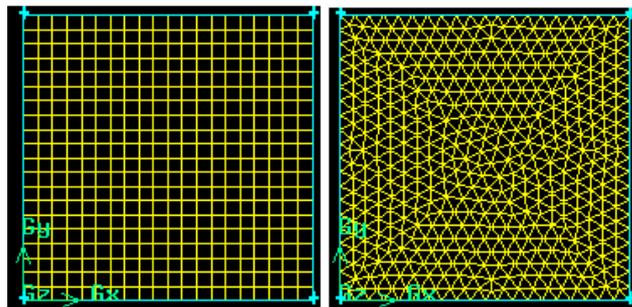


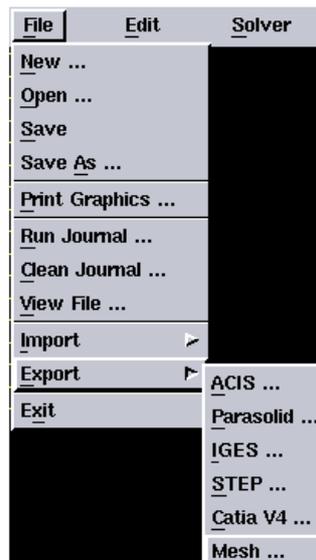
Figure III.6: Différent type du maillage.

Étape 5: les conditions aux limites

La déclaration des conditions aux limites est importantes pour la suite.

Étape 7: export la géométrie

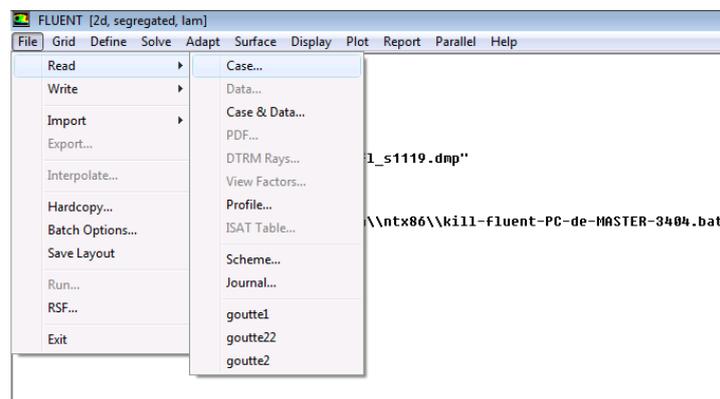
La dernière étape sous gambit c'est l'export de la géométrie en extension .msh pour permettre après son utilisation dans Fluent.



III.5.2 Étapes de la simulation sous FLUENT

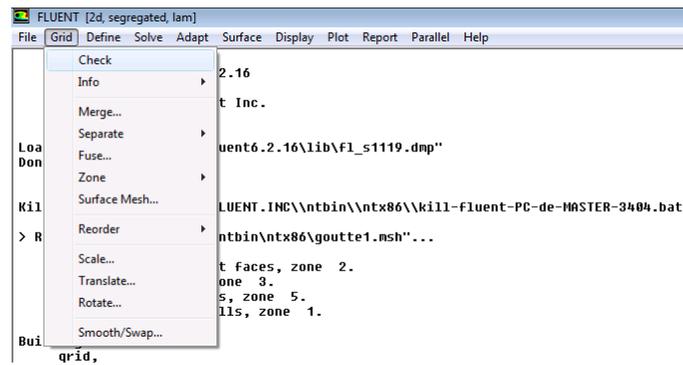
Étape 1: import la géométrie (.msh)

Pour commencer la simulation, il faut importer le fichier (*.msh) généré sous Gambit.



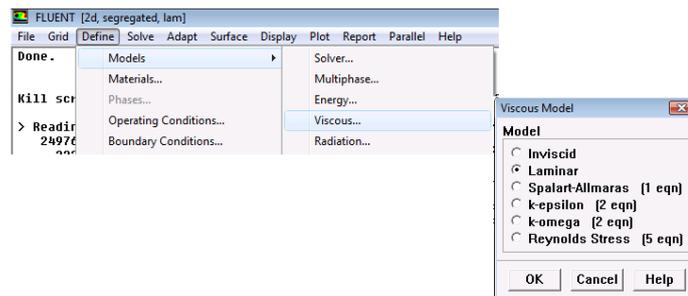
Étape 2: vérification du maillage

Ceci permet de vérifier si le maillage importé ne contient pas d'erreurs ou de volumes de signes négatifs.



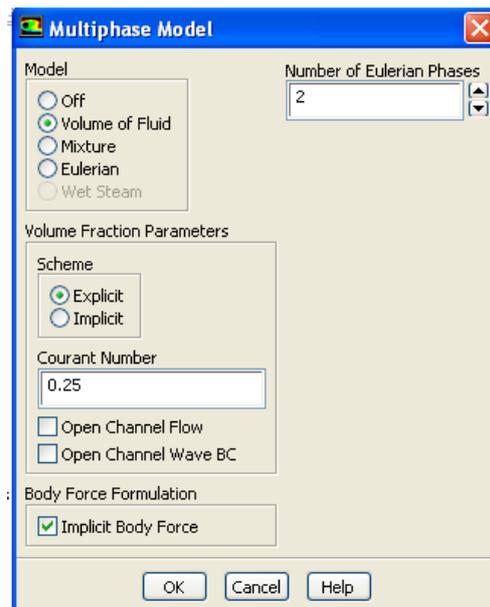
Étape 3: choix du modèle d'écoulement

Fluent propose différentes modélisations de l'écoulement turbulent. « Viscous » permet de choisir le modèle de turbulence visqueux que l'on va prendre pour résoudre le problème (laminaire, $k-\epsilon$,...).



Étape 4: choix du modèle multiphasique

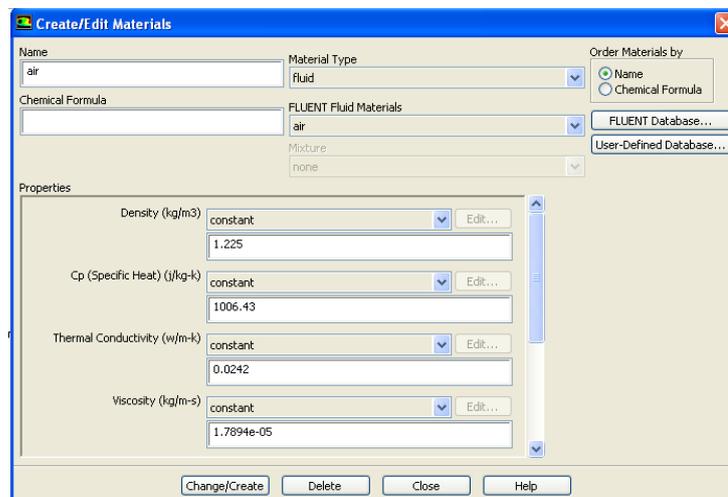
Fluent propose trois modèles multiphasiques pour traiter les différents problèmes. Pour notre cas on a utilisé le modèle VOF (Volume Of Fluid) où la tension de surface a été prise en considération dans ce modèle.



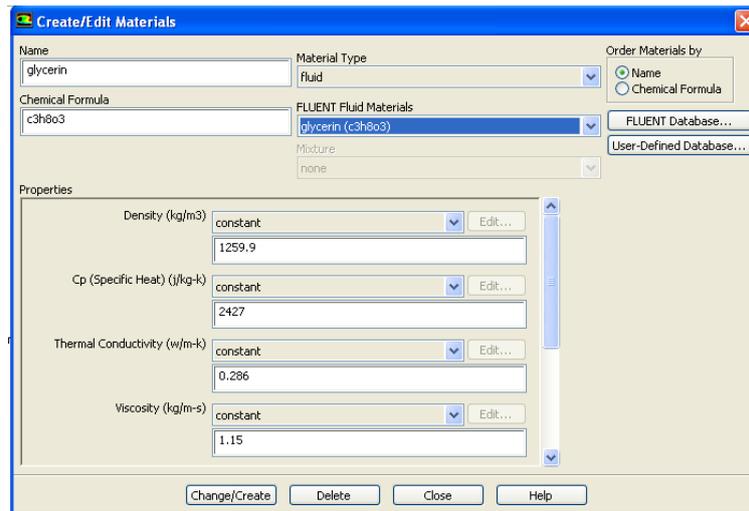
Étape 5: définition des caractéristiques du fluide

Les caractéristiques du fluide sont chargées à partir de la bibliothèque de données de Fluent.

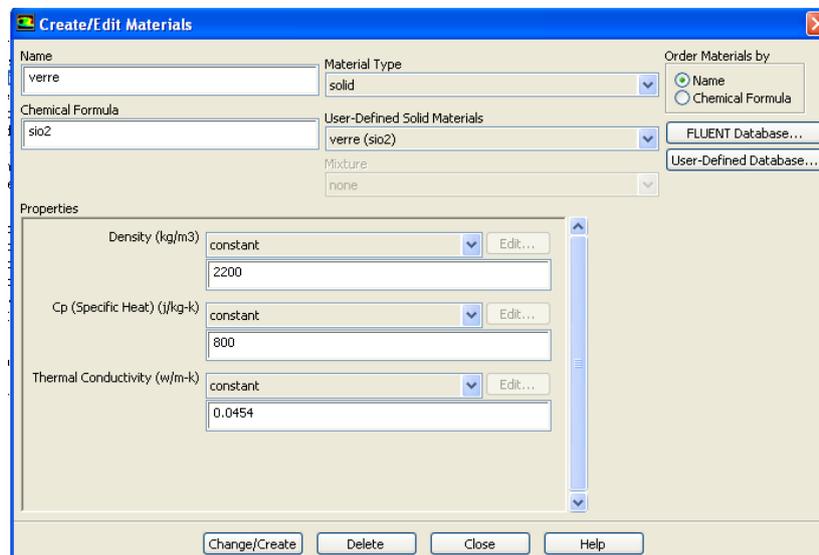
Le premier choix du fluide est l'air avec ses caractéristiques illustrées ci-dessous :



Le deuxième fluide c'est la glycérine ses propriétés physico-chimiques illustrées ci-dessous :

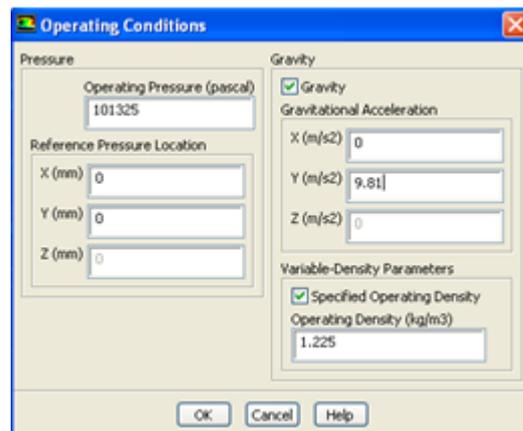


Pour la surface solide nous avons inséré un fichier contenant les caractéristiques du verre car Ce type de matériel n'existe pas sur la base de données de Fluent.



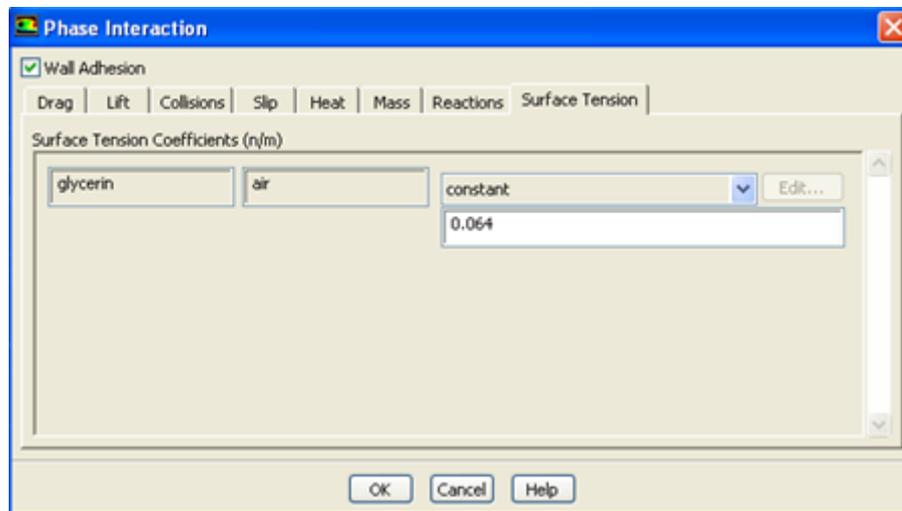
Étape 6: définition les conditions opératoires

Avant de choisir les conditions aux limites, il faut estimer d'abord la valeur de la pression de référence « operating conditions » et introduire l'effet de gravité.



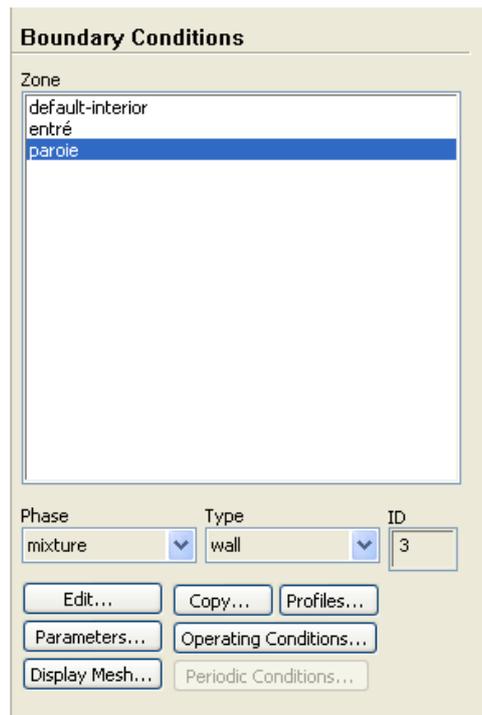
Étape7: définition les phases

Sert à introduire la valeur de la tension de surface du fluide.



Étape8: définition des conditions aux limites

Sert à fixer les conditions aux limites du problème. On a précédemment vu que les limites physiques sont déjà définies sous Gambit, cependant on doit les explicité et leur donner une valeur sous Fluent. Ceci montre que même si l'on a fait une erreur de condition aux limites sous Gambit, on peut toujours modifier sous Fluent.



Étape9: déclaration de la goutte

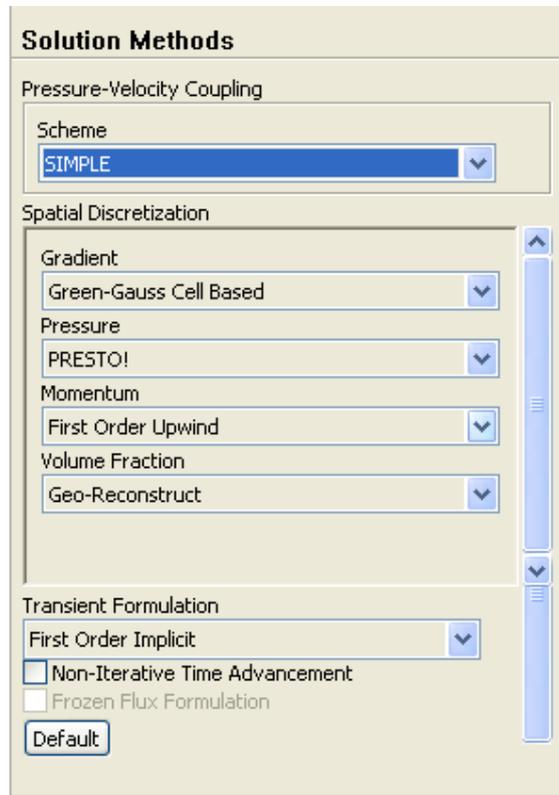
Dans le menu « adapt region » on déclare la goutte comme un cercle et on définit la valeur de son rayon initiale. Dans notre cas, la valeur correspondante au rayon est celle prise durant les mesures expérimentales.



Étape 10: choix des méthodes de discrétisation

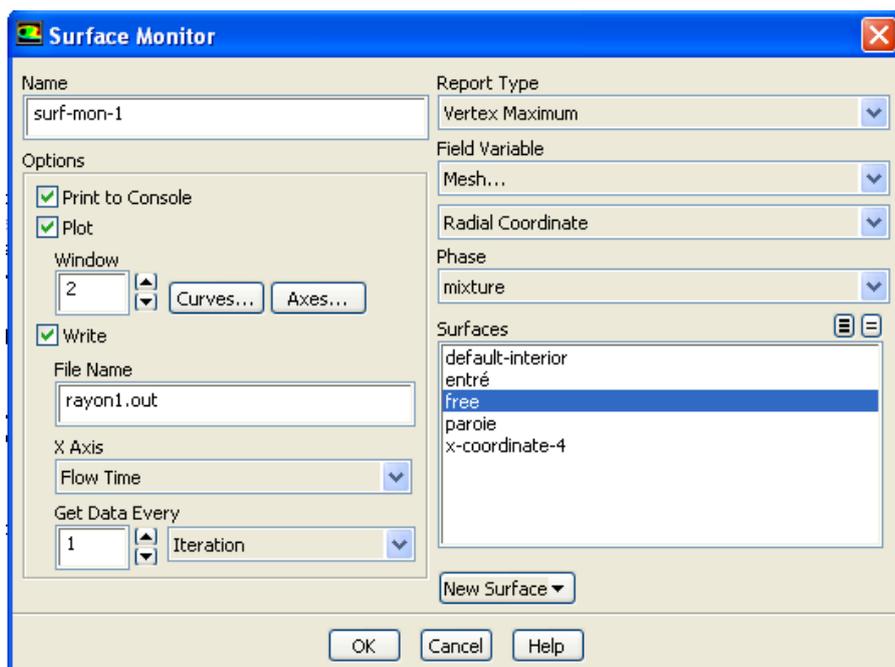
C'est grâce à cette option que l'on va pouvoir entrer les différents facteurs de sous relaxation du système (pression, température, etc...). Ces facteurs peuvent être modifiés au cours de la

résolution. Leur principal intérêt est de forcer la solution à converger. Dans ce menu, on peut aussi choisir la façon de discrétiser chaque variable (pression, moment, etc.)



Étape 11: détermination du rayon de la goutte

Grâce à ce menu on peut avoir le rayon d'étalement de la goutte en fonction du temps. Les résultats obtenus sont sauvegardés dans un fichier donné d'extension .dat



Étape 12: Lancement des calculs

On fixe le nombre d'itération pour lancer les calculs pour obtenir des résultats convergents.

Run Calculation

Check Case... Preview Mesh Motion...

Time Stepping Method: Fixed (dropdown) Time Step Size (s): 0.0009

Settings... Number of Time Steps: 1000 (spinner)

Options

Extrapolate Variables
 Data Sampling for Time Statistics

Sampling Interval: 1 (spinner) Sampling Options...

Max Iterations/Time Step: 2 (spinner) Reporting Interval: 1 (spinner)

Profile Update Interval: 1 (spinner)

Data File Quantities... Acoustic Signals...

Calculate

III.6 Mise en œuvre de la simulation sous Fluent

La modélisation numérique d'un phénomène physique, dans une géométrie donnée, se construit par des étapes, quel que soit le code de calcul utilisé :

- Construction de la géométrie puis choix du type et le pas de maillage.
- Choix du modèle physique.
- Définition des propriétés des phases, conditions opératoires et les conditions aux limites pour les différentes frontières du domaine d'étude.
- Définition des méthodes numériques et les schémas de discrétisations.
- Analyse des résultats.

III.7 Méthodologie

III.7.1 Construction de la géométrie

Nous avons choisis à faire l'étude du problème en 2 dimensions. Pour cela, la géométrie choisie est un carré de dimension $0.05 \times 0.05 \text{m}^2$. (voir figure III.7)

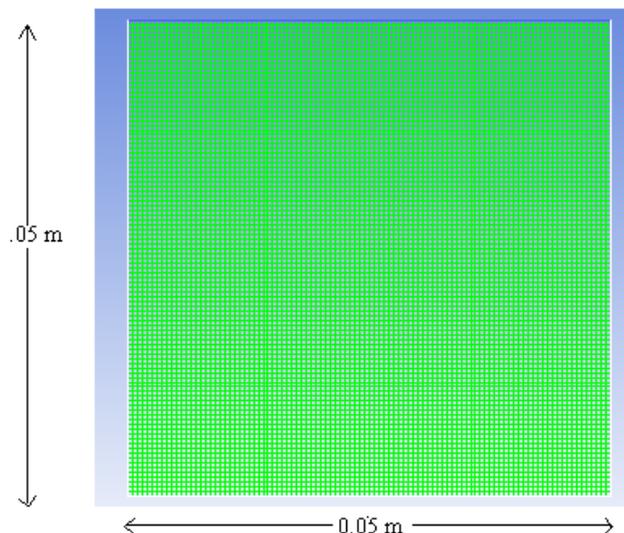


Figure III.7 : schéma de la géométrie en deux dimensions sous Gambit.

III.7.2 Maillage

La création de la géométrie ainsi que le maillage se font sous le préprocesseur "Gambit" 2.2.30. Ce mailleur propose des solutions étendues pour les géométries les plus compliquées. Cependant, pour notre cas, deux choix principaux de maillage se sont posés. En l'occurrence, un maillage soit à base de cellules quadrilatères, soit à base de cellules triangulaires (soit à base de cellules hexaédriques, soit à base de cellules tétraédriques, pour le cas 3D). L'utilisation d'un maillage triangulaire induirait un surplus du nombre de cellules par rapport aux cellules quadrilatères, d'où le besoin de plus de ressources et de temps de calcul. Cependant, notre géométrie est assez simple où l'écoulement suit pratiquement la forme de la géométrie. Donc, on utilise un maillage à cellules quadrilatères de type map (c'est-à-dire un maillage régulier et structuré) de taille 5×10^{-2} m. Les caractéristiques de ce maillage sont données dans le tableau (III.1) :

Type	Nombre de cellules
Cellules	10000
Faces	20200
Noeuds	10201
Volume Total (m ³)	2.500000e-003

Tableau III.1 : Caractéristiques du maillage.

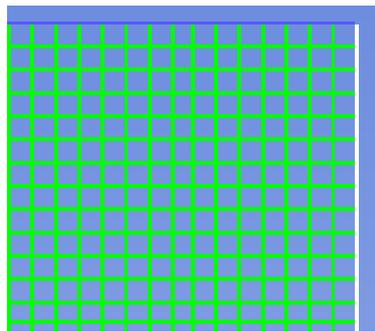


Figure III.8 : Type du maillage quadrilatère.

III.7.3 Conditions aux limites

Deux états de frontières ont été proposés comme conditions aux limites :

- La condition d'entrée : qui simule l'entrée de l'écoulement dans le domaine de calcul est définie comme une « pression inlet ».
- Les parois latérales plus la paroi inférieure sont déclarées de type « Wall ».

III.7.4 Conditions initiales

- La pression d'entrée est prise égale à la pression atmosphérique ($P_{atm}=101325$ pascal) et est exigée à l'entrée.
- Tension superficielle est égale à 64 dyne/cm^2 en absence de tensioactif et à 29 dyne/cm^2 en présence de tensioactif.
- L'écoulement de la goutte est soumis à une gravité $g = 9,81 \text{ m/s}^2$.

Chapitre IV :
Résultats
et
Discussions

Ce chapitre a pour but d'exploiter les résultats trouvés, dans les quels la géométrie et le maillage ont été réalisés avec le logiciel Gambit 2.2.30 et la simulation numérique obtenue à l'aide du code de calcul Ansys Fluent 12.0.16.

IV.1 Résultats et discussions

IV.1.1 Convergence du schéma

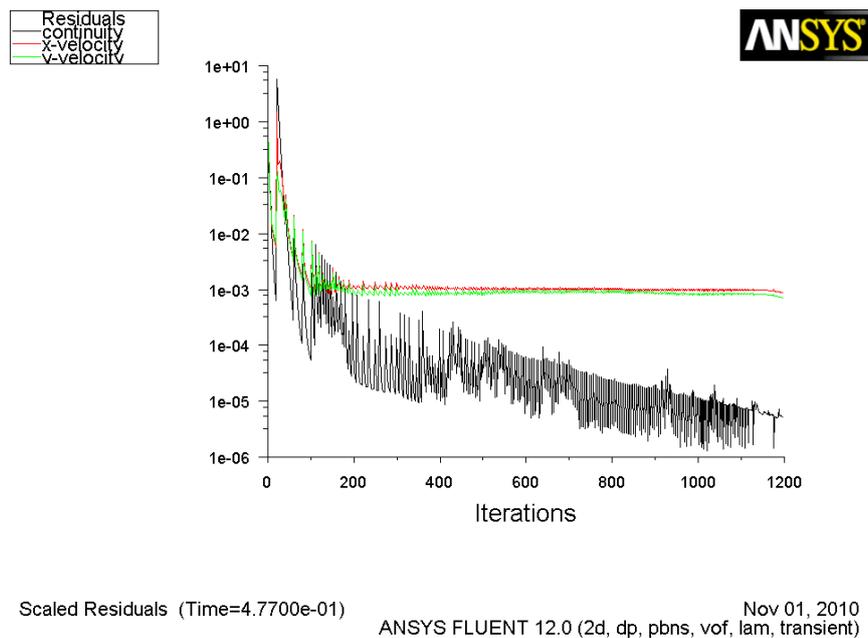


Figure IV.1 : Schéma de la convergence.

Pour s'assurer de la convergence des calculs, on a choisi d'observer les courbes de résidus tracées par fluent en fonction des itérations. Le schéma numérique a convergé après un nombre d'itérations donné égale à $n=1000$, pour un pas de temps $\Delta t= 0.004s$.

IV.1.2 Contour des pressions

La figure (IV.2) montre les contours de la pression statique à l'intérieur de la goutte, on remarque bien une pression maximale égale à 49.7 pa près de la paroi due essentiellement à la concentration du poids de la goutte à l'interface solide liquide. Ce qui est en accord avec la réalité.

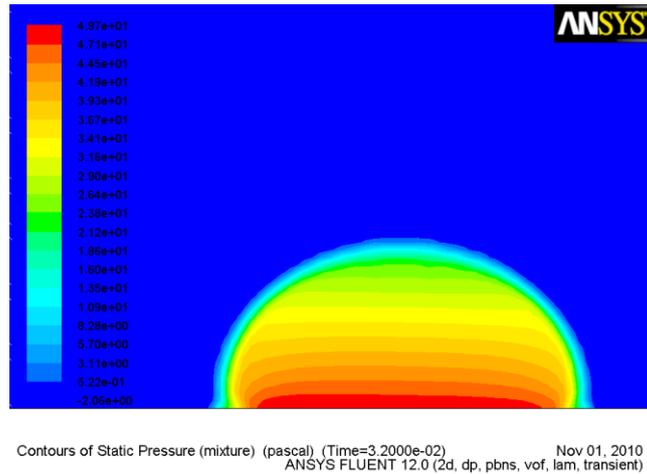


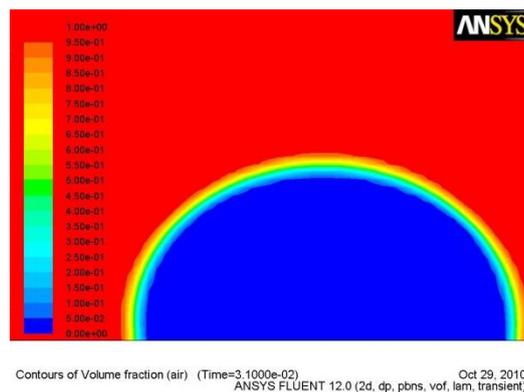
Figure IV.2 : Schéma du contour de la pression statique de la goutte

Plus on s'éloigne de l'interface, plus la pression à l'intérieur de la goutte diminue jusqu'à une valeur égale 3.11 pa, ce qui est parfaitement représenté dans la figure IV.2.

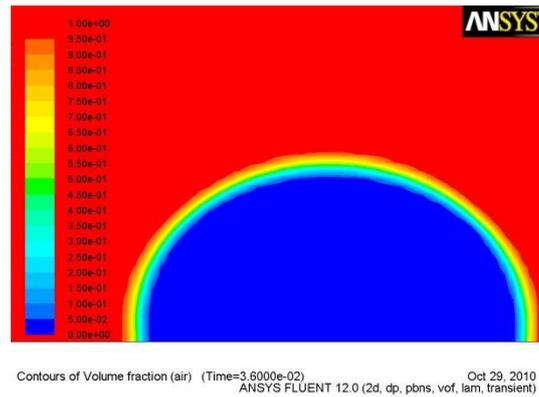
IV.1.3 Contour de la fraction de volume

La méthode VOF nous a permis d'avoir une meilleure illustration du profil de la goutte et ce à partir des équations de la dynamique des fluides. Le rayon de la goutte croît avec le temps et par conséquent la hauteur de la goutte diminue ce qui est représenté dans la figure IV.3 (a),(b) et (c).

(a) $t=3.1e-2s$



(b) $t=3.6e-2s$



(c) $t=4.067s$

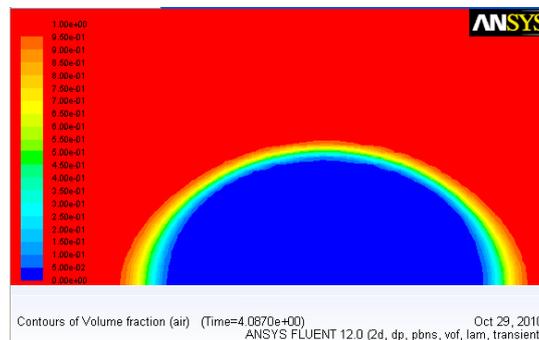


Figure IV.3 : Schéma du contour de la fraction du volume de la goutte

On remarque que pour la glycérine pur, l'étalement dans le verre, de 1 à vitesse de la ligne triple, augmente rapidement, puisque à des temps d'ordre très petits ($o(10^{-2} s)$), le rayon évolue très vite. Les forces capillaires étant dominantes ($\sigma=64\text{dyne/cm}$), par rapport aux forces visqueuses ($\mu=1.15\text{pa.s}$), c'est le cas du régime hydrodynamique.

IV.2 Etude comparative

La figure IV.4 représente l'évolution du rayon de la goutte en fonction du temps en échelle linéaire. Dans une première étude nous avons vérifié la validité de la loi de tanner (II.13) en comparant les valeurs du rayon trouvés théoriquement et le rayon expérimentale [31] avec le rayon numérique, que nous avons obtenu, en fonction du temps. La figure (IV.4 a) présente les résultats de la glycérine pur en absence de tensioactif et la figure (IV.4 b) pour un mélange glycérine –eau- tensioactif.

On remarque un très bon accord entre le modèle théorique et les données numériques et expérimentales.

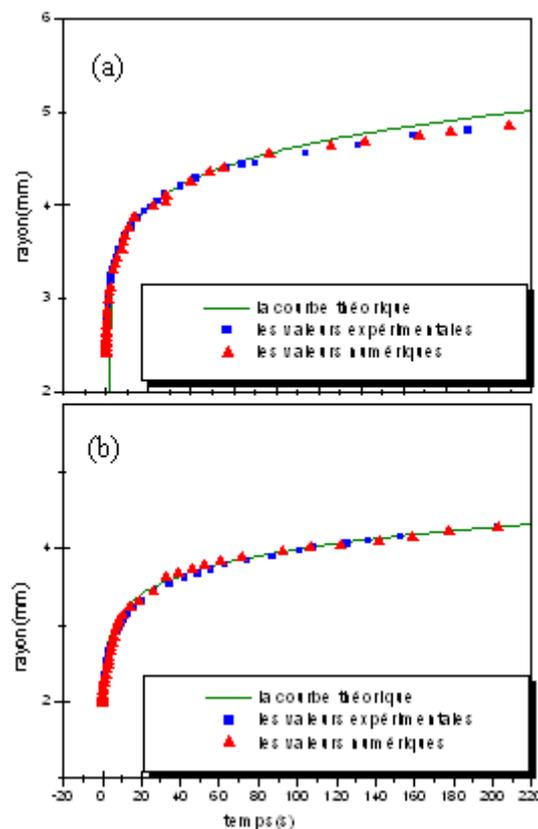


Figure IV.4 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps en échelle linéaire. (a) pour glycérine pur sans tensioactif ($\sigma=64\text{mN/m}$ $\mu=1.15\text{ pa.s}$ et $V=15\mu\text{l}$). (b) pour glycérine en présence de tensioactif ($\sigma=29\text{ mN/m}$ $\mu=0.19\text{ pa.s}$ et $V=15\mu\text{l}$ [tensioactif] $=1.4.10^{-2}\text{M}$)

Ainsi donc, notre approche numérique ne fait que conforter les résultats théoriques et expérimentaux trouvés.

IV.3.5 Régime d'étalements

Pour chaque simulation le rayon de la goutte $R(t)$ est tracé en fonction du temps t en échelle logarithmique et comparé avec les données expérimentales [31]. Dans tous les cas une évolution du rayon est observée. Cette évolution signifie que le régime d'étalement de la goutte peut être écrit par une loi de puissance de la forme :

$$R(t) = k t^n$$

Avec, k et n des constantes données.

IV.3.5.1 Influence de la viscosité en absence de tensioactif ($V=15\mu\text{l}$, $\sigma=64 \text{ dyne/cm}$)

Le tableau IV.1 ci-dessous présente les valeurs expérimentales de la viscosité μ et du rayon initial r_0 des gouttes de mélange de glycérines-eau en absence de tensioactifs.

μ (pa.s)	r_0 (mm)	n_1^{num}	n_1^{exp}	k_1^{num} (mm.s ⁻ⁿ)	k_1^{exp} (mm.s ⁻ⁿ)	n_2^{num}	n_2^{exp}	k_2^{num} (mm.s ⁻ⁿ)	k_2^{exp} (mm.s ⁻ⁿ)
1.15	2.308	0.101	0.108	2.91	2.557	0.086	0.085	3.09	3.16
0.6	2.029	0.10	0.109	2.91	2.661	0.06	0.078	3.25	3.089
0.42	2.145	0.112	0.107	2.75	2.749	0.06	0.072	3.19	3.034
0.27	2.165	0.096	0.108	2.90	2.891	0.073	0.073	3.081	3.28
0.13	2.394	0.10	0.106	3.061	3.060	0.068	0.074	3.281	3.289
0.09	2.285	0.117	0.098	2.99	3.042	0.066	0.079	3.41	3.512
0.07	2.540	0.10	0.106	3.21	3.159	0.069	0.064	3.504	3.542
0.04	2.836	0.073	0.073	3.55	3.568	0.05	0.044	3.75	4.124
0.03	2.963	0.076	0.078	3.698	3.716	0.05	0.03	4.07	4.561
0.02	2.772	0.07	0.073	3.55	3.604	0.01	0.008	4.37	4.427

Tableau IV.1 : Paramètres d'étalement expérimental et numérique d'une goutte de glycérine à différentes viscosités.

L'approche numérique de l'évolution du rayon de la goutte en fonction du temps pour un volume fixe égale à 15 μ l et pour des viscosités allant de 1.15 pa.s à 0.02 pa.s, en absence de tensioactif, nous a permis d'avoir une moyenne d'erreur sur le coefficient n_1 égale à 0.0069 ± 10^{-4} et pour le coefficient n_2 égale à 0.0083 ± 10^{-4} . Cette moyenne montre bien que la moyenne d'erreurs sur les deux coefficients n_1 et n_2 est trop petite. De même pour les valeurs k_1 et k_2 dont la moyennes d'erreurs respectives est de l'ordre de 0.08 ± 10^{-2} et 0.16 ± 10^{-2} . D'où on a concordance entre les valeurs expérimentales et numériques, comme le montre les figures (IV.5- IV.10).

L'étude expérimentale et numérique a montré que pour chaque cas correspondant à une viscosité donnée, il y'a bien succession de deux régimes identiques.

On voit bien que la viscosité influe sur la valeur de l'exposant de la loi de puissance et donc la nature du régime d'étalement. Deux gammes de viscosité peuvent être identifiées, dans chacune de ces gammes où l'exposant de loi de puissance ne varie pas avec la viscosité. La viscosité critique est égale à 0,05Pa.s.

Pour une viscosité **supérieure à 0,05 Pa.s**, la moyenne de n_1 expérimentale est égale à 0,106 et n_1 numérique est égale à 0.104 tandis que n_2 expérimentale est égale à 0,075 et n_2 numérique est égale à 0.075.

Pour **cette première gamme** de viscosité le premier régime est en bon accord avec le régime hydrodynamique car l'exposant n_1 correspond à ce régime, alors que le deuxième régime n'est autre que le régime asymptotique.

Pour **la deuxième gamme** de viscosité **inférieure à 0.05 pa.s** la moyenne n_1 expérimentale est égale à 0.076 et n_1 numérique est égale à 0.073 tandis que n_2 expérimentale est égale à 0,042 et n_2 numérique est égale à 0.037, ce qui correspond parfaitement aux régimes asymptotiques.

Ce régime n'étant pas prévu par la théorie [31],

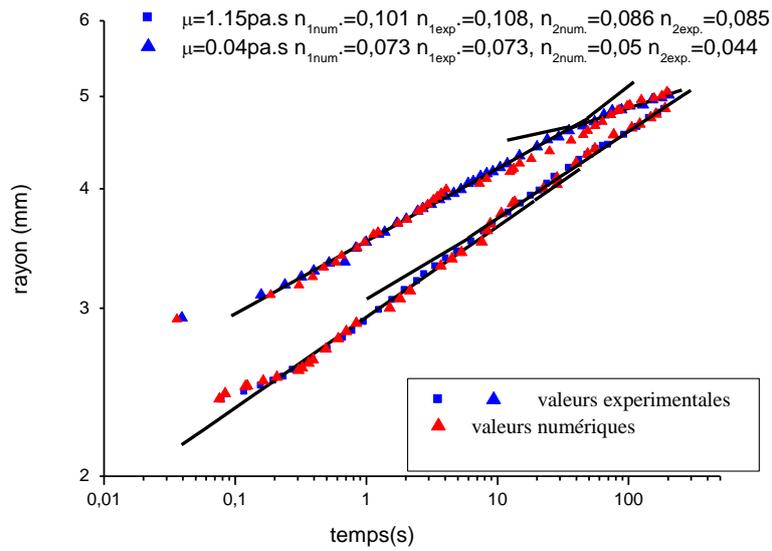


Figure IV.5 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

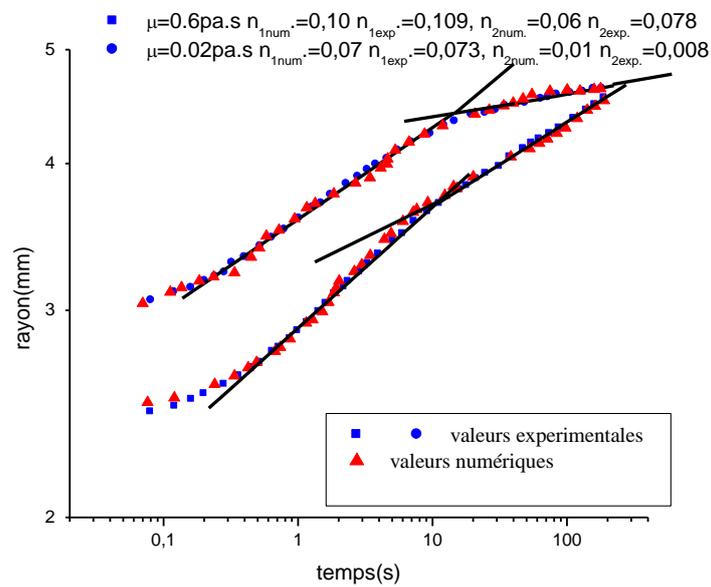


Figure IV.6 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

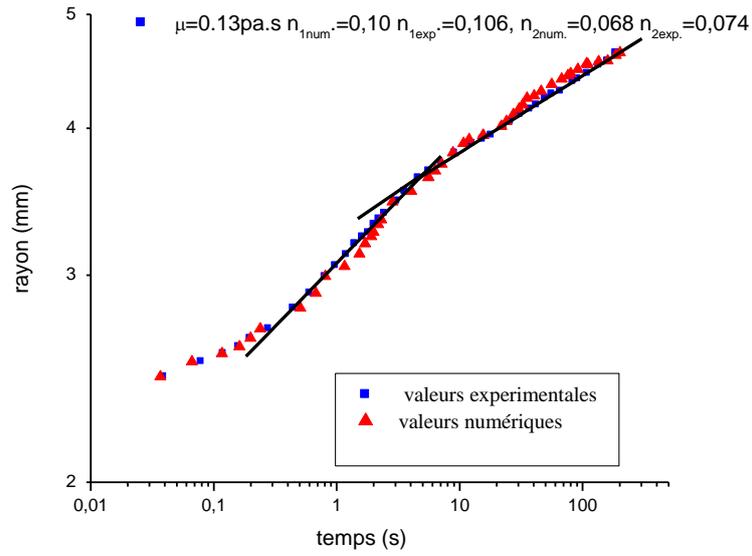


Figure IV.7: Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

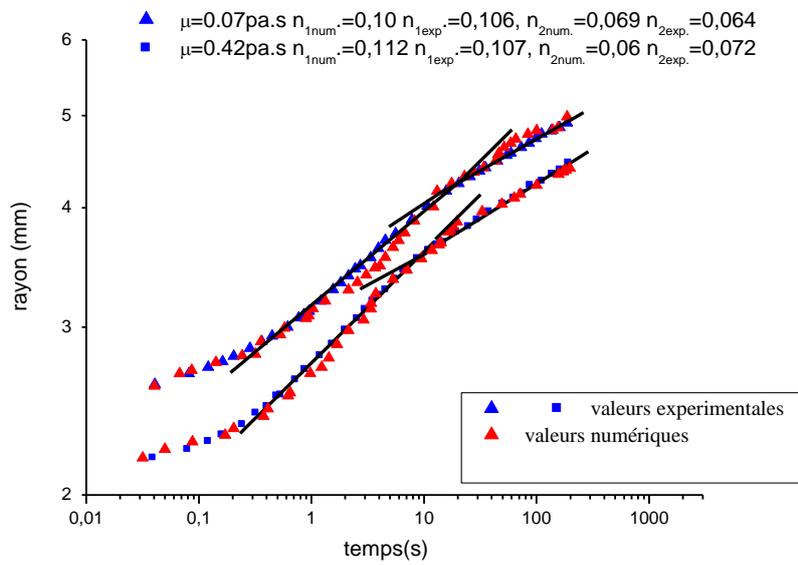


Figure IV.8: Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

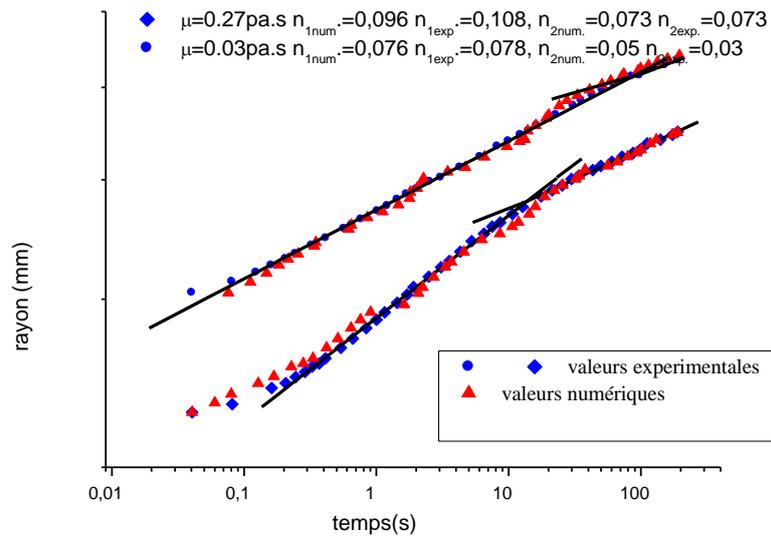


Figure IV.9 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

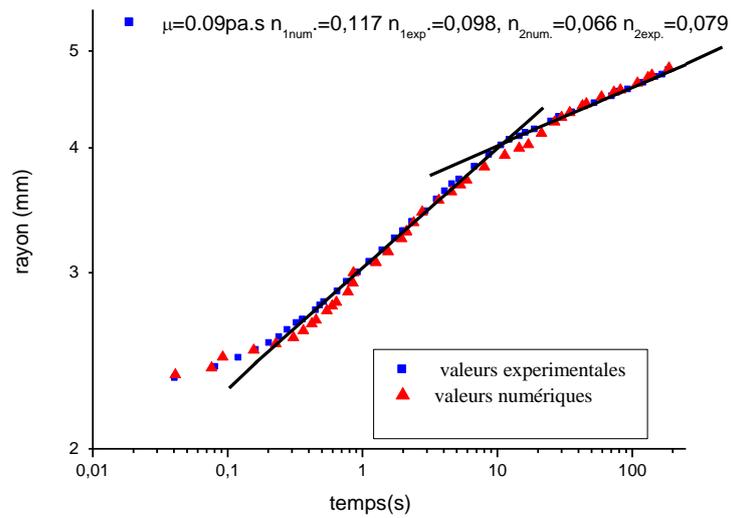


Figure IV.10: Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

IV.3.5.2 Influence de la viscosité en présence de tensioactif ($V=15 \mu\text{l}$, $\sigma=29 \text{ dyne/cm}$, $[\text{tensioactif}]=1.4.10^{-2}\text{M}$)

Le tableau IV.2 ci-dessous présente les valeurs expérimentales de la viscosité μ et du rayon initial r_0 des gouttes de mélange de glycérines-eau en présence de tensioactifs.

μ (pa.s)	r_0 (mm)	n_1^{num}	n_1^{exp}	k_1^{num} (mm.s ⁻ⁿ)	k_1^{exp} (mm.s ⁻ⁿ)	n_2^{num}	n_2^{exp}	k_2^{num} (mm.s ⁻ⁿ)	k_2^{exp} (mm.s ⁻ⁿ)
1.15	1.412	0.127	0.137	2.182	2.172	0.108	0.105	2.4	2.046
0.42	1.377	0.125	0.132	2.29	2.27	0.094	0.092	2.54	2.19
0.19	1.95	0.124	0.131	2.30	2.248	0.1	0.103	2.51	2.45
0.09	1.645	0.149	0.133	2.269	2.276	0.102	0.104	2.66	2.652
0.05	2.324	0.136	0.132	2.454	2.493	0.093	0.096	2.824	2.763
0.03	2.218	0.11	0.099	2.88	2.924	0.088	0.084	3.16	3.239
0.02	2.634	0.098	0.104	3.13	3.135	0.088	0.084	3.271	3.368

Tableau IV.2: Paramètres d'étalement expérimental et numérique d'une goutte de glycérine à différentes viscosités en présence tensioactif.

L'approche numérique de l'évolution du rayon de la goutte en fonction du temps pour un volume fixe égale à $15\mu\text{l}$ et pour des viscosités allant de 1.15 pa.s à 0.02 pa.s , en présence de tensioactif $1.4 \cdot 10^{-2} \text{ M}$, nous a permis d'avoir une moyenne d'erreur sur le coefficient n_1 égale à 0.0087 ± 10^{-4} et pour le coefficient n_2 égale à 0.003 ± 10^{-3} . Cette moyenne montre bien que la moyenne d'erreurs sur les deux coefficients n_1 et n_2 est trop petite. De même pour les valeurs k_1 et k_2 dont la moyenne d'erreurs respectives est de l'ordre de 0.025 ± 10^{-3} et 0.144 ± 10^{-3} . D'où il y a concordance entre les valeurs expérimentales et numériques, comme le montre les figures (IV.11- IV.14).

Les figures de (IV.11 jusqu'au IV.14) représentent l'évolution du rayon de la goutte en fonction du temps pour un volume fixe $=15\mu\text{l}$ et pour des différentes viscosités en présence de tensioactif. On remarque un très bon accord entre les courbes expérimentales et numériques avec la distinction de deux régimes. Deux gammes de viscosité peuvent être identifiées. Dans chacune de ces gammes la loi de puissance ne varie pas avec la viscosité. Pour une viscosité supérieure à $0,03\text{ Pa}\cdot\text{s}$, la moyenne de n_1 expérimentale est égale à $0,139$ et n_1 numérique est égale à $0,132$ tandis que pour n_2 expérimentale est égale à $0,102$ et pour n_2 numérique est égale à $0,099$.

Pour le premier régime on trouve que la valeur de l'exposant n_1 se réfère avec le régime moléculaire cinétique, cependant l'exposant de deuxième régime correspond au régime hydrodynamique.

Pour une viscosité inférieure ou égale à $0,03\text{ pa}\cdot\text{s}$ la moyenne n_1 expérimentale est égale à $0,109$ et n_1 numérique est égale à $0,104$ tandis que pour n_2 expérimentale est égale à $0,084$ et n_2 numérique est égale à $0,088$.

Dans cette gamme de viscosité on remarque le premier régime correspond au régime hydrodynamique donc le modèle de tanner et le second régime n'est autre que le régime asymptotique.

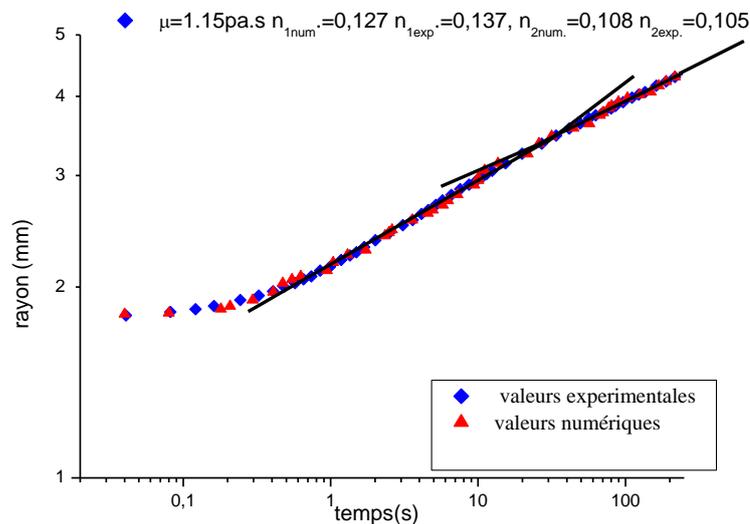


Figure IV.11 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

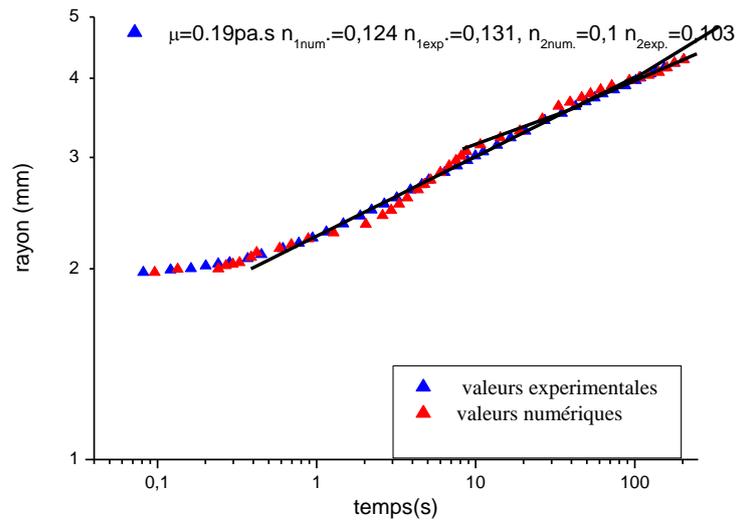


Figure IV.12 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

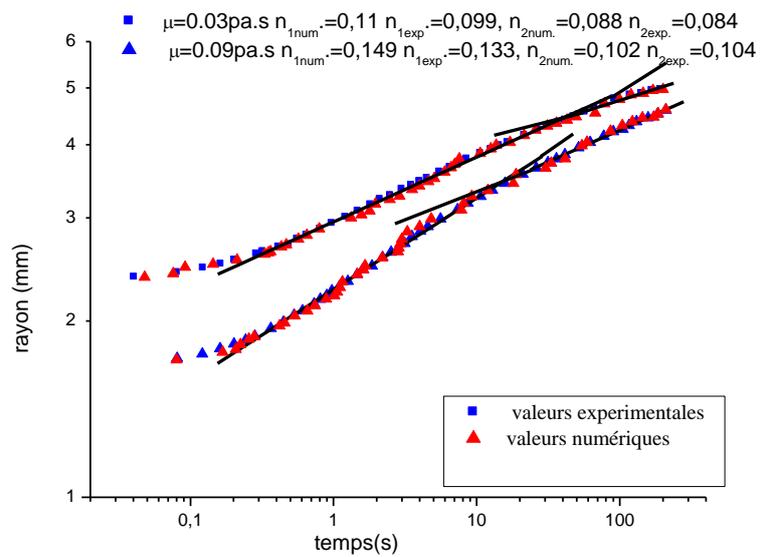


Figure IV.13 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

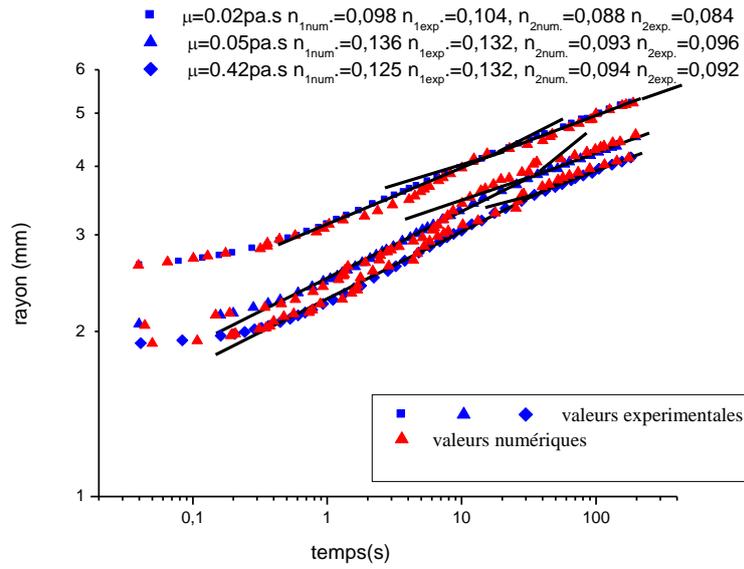


Figure IV.14 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

IV.3.5.3 Influence du volume ($\mu=1.15$ pa.s, $\sigma=64$ dyne/cm)

Le tableau IV.3 ci-dessous présente les valeurs expérimentales du volume V et du rayon initial r_0 des gouttes de mélange de glycérines pur en absence de tensioactifs.

V	r_0	n_1^{num}	n_1^{exp}	k_1^{num}	k_1^{exp}	n_2^{num}	n_2^{exp}	k_2^{num}	k_2^{exp}	n_3^{num}	n_3^{exp}	k_3^{num}	k_3^{exp}
60	3.436	0.064	0.074	4.07	4.11	0.12	0.139	3.895	3.892	0.10	0.108	4.07	4.006
45	3.086	0.081	0.087	3.63	3.663	0.12	0.131	3.55	3.589	0.104	0.106	3.80	3.666
35	2.633	0.073	0.086	3.26	3.409	0.134	0.127	3.31	3.295	0.095	0.103	3.50	3.421
27	2.576	0.065	0.077	3.09	3.117	0.129	0.14	2.88	3.048	0.089	0.099	3.23	3.185
24	2.443	0.06	0.070	2.81	2.830	0.126	0.137	2.75	2.808	0.091	0.105	3.09	2.876
20	2.263	0.092	0.080	2.64	2.696	0.128	0.141	2.69	2.651	0.101	0.104	2.84	2.748
15	2.308	0.101	0.104	2.91	2.557	0.086	0.080	3.09	3.16	/	/	/	/
12	1.834	0.096	0.105	2.8	2.36	0.068	0.074	3.31	3.201	/	/	/	/
8	1.707	0.096	0.102	2.34	2.14	0.076	0.073	2.61	2.626	/	/	/	/

Tableau IV.3: Paramètres d'étalement d'une goutte de glycérine à différents volume.

NB : [V]= μ l, [r_0]=mm, [k_i]=mm.s⁻ⁿ, i=1,2,3.

Les figures (IV.15 jusqu'au IV.17) représentent l'évolution du rayon de la goutte en fonction du temps pour un volume variable de 8 à 60 μ l pour la glycérine pur et sans tensioactif .

L'approche numérique et expérimentale de l'évolution du rayon de la goutte en fonction du temps nous a permis d'avoir une moyenne d'erreur sur le coefficient n_1 égale à 0.009 ± 10^{-3} , pour le coefficient n_2 égale à 0.009 ± 10^{-3} et pour le coefficient n_3 égale à 0.007 ± 10^{-3} . Cette

moyenne montre bien que la moyenne d'erreurs sur les deux coefficients n_1 et n_2 est trop petite. De même pour les valeurs k_1 , k_2 et k_3 dont les moyennes d'erreurs respectives est de l'ordre de 0.146 ± 10^{-3} , 0.057 ± 10^{-3} et 0.104 ± 10^{-3} . D'où il y a concordance entre les valeurs expérimentales et numériques, comme le montre les figures (IV.15- IV.17).

On remarque une succession de trois régimes de différentes valeurs de l'exposant de la loi de puissance. Pour des volumes inférieurs ou égale $15 \mu\text{l}$, la moyenne de l'exposant n_1 expérimentale est égale à 0.103 et n_1 numérique est égale à 0.098 tandis que n_2 expérimentale est égale à $0,075$ et n_2 numérique est égale à 0.076 où le premier régime est le régime hydrodynamique et le deuxième est le régime asymptotique.

Et trois régime pour des volumes élevés où l'exposant n_1 expérimentale est égale à 0.078 et n_1 numérique est égale à 0.073 , n_2 expérimentale est égale à $0,134$ et n_2 numérique est égale à 0.126 tandis que n_3 expérimentale est égale à $0,103$ et n_3 numérique est égale à 0.104 .

Le premier régime correspond à l'état d'équilibre de la goutte c'est le régime asymptotique suivi par le régime moléculaire cinétique et enfin le régime hydrodynamique.

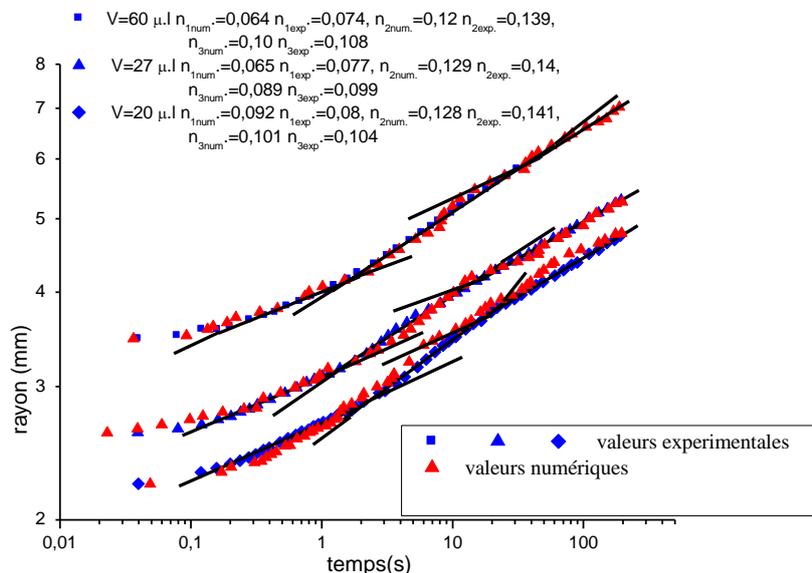


Figure IV.15 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

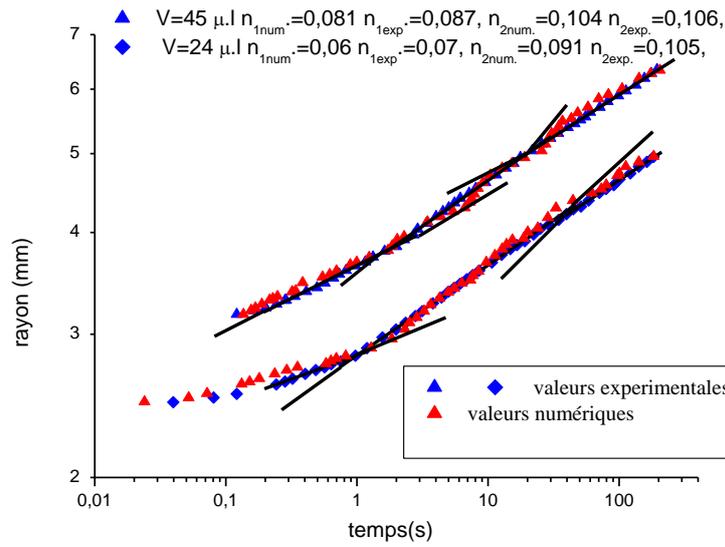


Figure IV.16 : Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

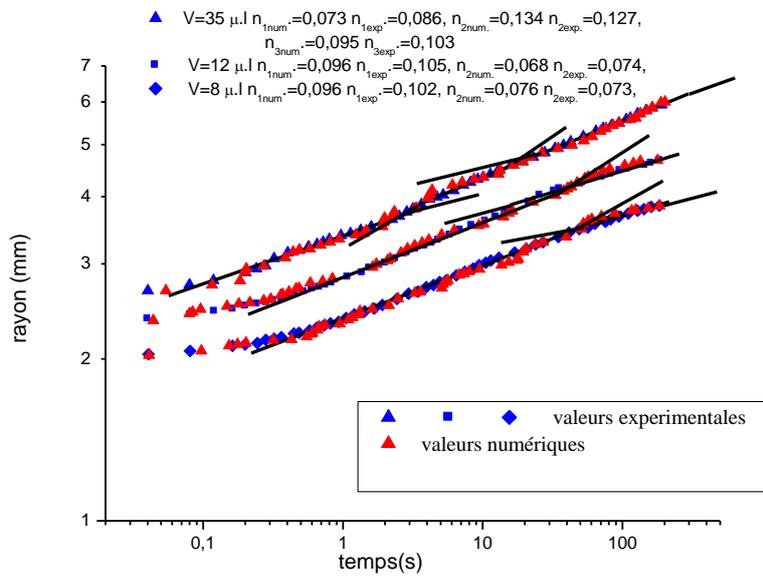


Figure IV.17: Évolution du rayon de la goutte en fonction du temps.
(En échelle log-log)

Conclusions
Générales

Conclusions Générales

La présente étude avait pour but la simulation de l'étalement d'une goutte de glycérine-eau en absence et en présence de tensioactif non ionique (Plantacare 2000) sur une surface solide (verre). L'outil de simulation numérique est le logiciel Ansys Fluent 12.0.16. Il nous a permis d'avoir :

- Une bonne maîtrise du logiciel Ansys Fluent sous sa dernière version.
- Application de la simulation des goutte comme modèle diphasique sous fluent, domaine peu exploré et exploité par les chercheurs que lors de ces 03 dernières années.
- Différents profils de la goutte en étalement en fonction du temps en concordance avec la réalité.

Ce qu'on peut tirer comme conclusion est comme suit :

1. Accord des résultats numériques sur l'évolution du rayon en fonction du temps avec la loi de Tanner[21]
2. Accord des résultats numériques sur l'évolution du rayon en fonction du temps avec les résultats expérimentaux [31]
3. Accords des résultats numériques avec ceux expérimentaux sur l'évolution du rayon en fonction du temps d'une goutte de glycérine-eau sans tensioactif avec une erreur de $n_1 = 0.0069$ et sur $n_2 = 0.0083$ pour une gamme de viscosité allant de $\mu = 0.02$ pa.s à $\mu = 1.15$ pa.s .
4. Accord avec les résultats expérimentaux sur l'existence d'une viscosité critique $\mu = 0.05$ pa.s à partir duquel le régime d'étalement change du régime hydrodynamique au régime asymptotique pour $\mu > 0.05$ pa.s et pour $\mu < 0.05$ pa.s le régime demeure asymptotique.
5. Accord des résultats numériques avec les résultats expérimentaux sur l'évolution du rayon en fonction du temps d'une goutte de glycérine-eau en présence de tensioactif avec une erreur de $n_1 = 0.0087$ et sur $n_2 = 0.003$ pour une gamme de viscosité allant de $\mu = 0.02$ pa.s à $\mu = 1.15$ pa.s .

6. Accord avec les résultats expérimentaux relatif à l'étalement d'une goutte de glycérine-eau en présence de tensioactif sur l'existence d'une viscosité critique $\mu=0.03$ pa.s à partir duquel le régime d'étalement change du régime moléculaire cinétique au régime hydrodynamique pour $\mu >0.03$ pa.s et pour $\mu \leq 0.03$ pa.s le premier régime c'est le régime hydrodynamique et le deuxième c'est l'asymptotique
7. Accords des résultats numériques sur l'évolution du rayon en fonction du temps d'une goutte de glycérine pur sans tensioactif avec une erreur de $n_1= 0.009$, sur $n_2= 0.009$ et sur $n_3= 0.007$ pour une gamme de volume allant de $V=8 \mu\text{l}$ à $V=60 \mu\text{l}$.
8. Accord avec les résultats expérimentaux sur l'existence d'un volume critique $V=15 \mu\text{l}$ à partir duquel le régime d'étalement change du régime hydrodynamique au régime asymptotique pour $V \leq 15 \mu\text{l}$ et trois régime d'étalement pour un volume $V > 15 \mu\text{l}$ à savoir le régime asymptotique, le régime moléculaire cinétique et enfin le régime hydrodynamique.

L'étalement d'une goutte de glycérine-eau en présence ou non de tensioactif est du principalement au volume à la viscosité et dans le cas de la présence de tensioactif, le tensioactif joue un rôle prépondérant.

Ainsi donc, il s'avère que l'outil numérique est performant et efficace pour l'étude des étalements de gouttes en présence ou non de tensioactif sur différents substrats et permet de donner de bons résultats avec et la théorie et l'expérimental. Il parfois plus commode de faire une étude numérique sur des tensioactifs chers ou qui nuisent à la santé, puisque les résultats obtenus sont encourageants.

Annexe

Annexe 1

Démonstration de la loi de Tanner

Soit l'équation suivante :

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \quad (\text{A1.1})$$

L'intégration de l'équation (A.1) conduit à :

$$p = p_a + \rho g(h - z) - \sigma \left(\frac{\partial^2 h}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial h}{\partial r} \right) \quad (\text{A1.2})$$

Tenant compte de cette nouvelle expression de la pression on aura:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r h^3 \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{\rho g}{3\mu} h - \frac{\sigma}{3\mu} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial h}{\partial r} \right) \right] \right) \quad (\text{A1.3})$$

Cette équation (A1.2) caractérise bien le mouvement du corps central de la goutte, elle s'avère fautive au voisinage de la ligne triphasique. En effet, elle ne peut traduire l'inversion de courbure de l'interface liquide-gaz observée au voisinage de la ligne triphasique et résultant de la non adhérence du liquide sur le solide.

Par ailleurs, cette équation n'a pas de solution analytique simple. Pour contourner ce problème, Tanner [21] propose de restreindre l'étude au coin de la goutte près de la ligne triphasique. D'après le principe d'adhérence, le liquide ne pouvant se raccorder directement sur le solide, Tanner [21] suppose l'existence d'un film liquide de très faible épaisseur h_0 (assimilable à un film précurseur) et sur lequel le profil de la goutte se raccorde en mouillage total. On suppose par ailleurs être en régime pseudo-stationnaire, c'est-à-dire que le temps n'intervient que par le biais de la vitesse de la ligne triphasique $\dot{R} = \frac{dR}{dt}$.

Dans la zone étudiée (supposée de petite dimension devant R), il est possible de négliger la gravité et la variation de la courbure dans la direction tangentielle. On se ramène donc à un problème bidimensionnel. Il est ainsi possible de simplifier la relation (A1.2) et d'exprimer le gradient de pression par :

$$\frac{\partial p}{\partial r} = -\sigma \frac{\partial^3 h}{\partial r^3} \quad (\text{A1.4})$$

Avec :

$$u_r = - \left(hz - \frac{1}{2} z^2 \right) \frac{1}{\mu} \frac{\partial p}{\partial r} \quad (\text{A1.5})$$

En combinant ces deux dernières relations et en assimilant la vitesse de la ligne triphasique à la vitesse moyenne d'avancement du coin de la goutte, alors :

$$\dot{R} = \frac{1}{h} \int_0^h u_r dz = - \frac{h^2}{3\mu} \frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\sigma}{3\mu} h^2 \frac{\partial^3 h}{\partial r^3} \quad (\text{A1.6})$$

On peut ainsi écrire:

$$h^2 \frac{\partial^3 h}{\partial r^3} = 3Ca \quad (\text{A1.7})$$

En introduisant les variables adimensionnelles suivantes :

$$\eta = \frac{h}{h_0} \quad \text{et} \quad \xi = \frac{r}{r_0}$$

Où r_0 est une longueur caractéristique définie par $r_0 = \frac{h_0}{(3Ca)^{1/3}}$

Et en fixant arbitrairement l'origine du repère au point de raccordement entre le liquide et le solide, l'équation différentielle (A1.7) devient :

$$\eta^2 \frac{d^3 \eta}{d\xi^3} = -1 \quad (\text{A1.8})$$

Cette équation peut être intégrée en introduisant comme paramètre la dérivée seconde à l'origine .Tanner [21] montre ainsi que le profile présente un point d'inflexion pour $\eta_0'' < 1.283$.

Par ailleurs, l'angle de contact dynamique dépend de la pente au point d'inflexion η_i' :

$$\tan \theta_d (\approx \theta_d) = - \left(\frac{dh}{dr} \right)_i = (3Ca)^{1/3} \eta_i' \quad (\text{A1.9})$$

Quand $\eta_0'' < 1.283$, η_i' varie très peu ($\eta_i' \approx 2.2 \pm 0.3$), si bien que la relation (A1.9) peut s'écrire :

$$\theta_d = C(Ca)^{1/3} \quad (\text{A1.10})$$

Avec $C=3.4$.

Dans ce modèle, on suppose que les gouttes sont suffisamment petites pour pouvoir négliger la gravité .on peut donc assimiler leur forme à une calotte sphérique dont le volume est :

$$V = \frac{\pi R^3 (1 - \cos \theta_d)(2 + \cos \theta_d)}{3 (1 + \cos \theta_d) \sin \theta_d} = \frac{\pi R^3}{4} \theta_d \quad (\text{A1.11})$$

Soit :

$$V = \frac{\pi C R^3}{4} \left(\frac{\mu}{\sigma} \frac{dR}{dt} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{A1.12})$$

L'intégration de la relation (A1.12) en prenant $C=3.4$ et en négligeant $R(t=0)$ devant R fournit :

$$R(t) = 0.94 \left(\frac{\sigma V^3 t}{\mu} \right)^{0.1} \quad (\text{A1.13})$$

Dans le cas du régime purement capillaire ($Ca \ll 1$ et $Bo \ll 1$), le rayon à la base de la goutte varie comme t à la puissance $1/10$.

Pour des fluides newtoniens non volatils s'étalant sur des surfaces solides lisses homogènes, les résultats expérimentaux bien représentés par une loi de puissance qui décrit l'évolution temporelle du rayon R à la base de la goutte, soit :

$$R(t) = kt^n$$

Annexe 2

Loi d'étalement d'une goutte liquide sur un substrat solide caractéristique du régime moléculaire cinétique

La force de la ligne de contact est:

$$F_W = 2\sigma(\cos \theta_{eq} - \cos \theta) \quad (A2.1)$$

Avec θ et θ_{eq} sont les angles de contact dynamique et l'équilibre cas.

λ est supposé être la distance entre sites d'adsorption sur la surface solide

La vitesse de la ligne mouillage est alors:

$$U = \frac{dR}{dt} = 2\kappa^0 \lambda \sin h \left[\sigma(\cos \theta_{eq} - \cos \theta) \frac{\lambda^2}{2k_B T} \right] \quad (A2.2)$$

où k_B est la constante de Boltzmann et T la température absolue.

À faibles vitesses U , si l'argument de la fonction \sinh est faible, Eq. (A2.2) se réduit à sa forme linéaire:

$$U = \frac{dR}{dt} = \frac{\kappa^0 \lambda^3}{k_B T} \sigma(\cos \theta_{eq} - \cos \theta) = \frac{\sigma(\cos \theta_{eq} - \cos \theta)}{\zeta} \quad (A2.3)$$

Où,

$$\zeta = \frac{\kappa_B T}{k^0 \lambda^3}$$

est le coefficient de frottement en ligne de mouillage. Pour de petits angles, nous obtenons $\cos \theta \approx 1 - \frac{\theta^2}{2}$ (conduisant à $U \propto \theta^2$). En supposant que le chute comme une calotte sphérique, on trouve:

$$U = \frac{dR}{dt} \approx \frac{8V^2 \sigma}{4\zeta \pi^2} \left(\frac{1}{R^6} \right) \quad (A2.4)$$

Après l'intégration, on aura,

$$R(t) \approx \left(\frac{56V^2 \sigma}{4\zeta \pi^2} \right)^{\frac{1}{7}} t^{\frac{1}{7}} \quad (A2.5)$$

Annexe 3

Méthode graphique de génération du profil de la goutte utilisant l'équation de Bashforth et Adams [9]

En normant l'équation de Bashforth et Adams par rapport à la longueur caractéristique b , on obtient :

$$\frac{1}{Rc} + \frac{\sin \varphi}{\bar{X}} = 2 + \beta \cdot \bar{Z} \quad \text{Ou} \quad R\bar{c} = \frac{Rc}{b}, \bar{X} = \frac{x}{b} \text{ et } \bar{Z} = \frac{z}{b} \quad (\text{A3.1})$$

Le principe du calcul consiste à construire le profil point par point en partant de l'apex M_0 où le rayon de courbure normé est $\bar{R}_{c,0} = 1$ et en décrivant des arcs de cercle de rayon $\bar{R}_{c,n}$ et d'ouverture $\Delta\varphi$ (figure A3.1). on choisit au préalable la valeur du facteur de forme β et de l'incrément $\Delta\varphi$ de l'angle φ (de l'ordre de $0,01^\circ$).

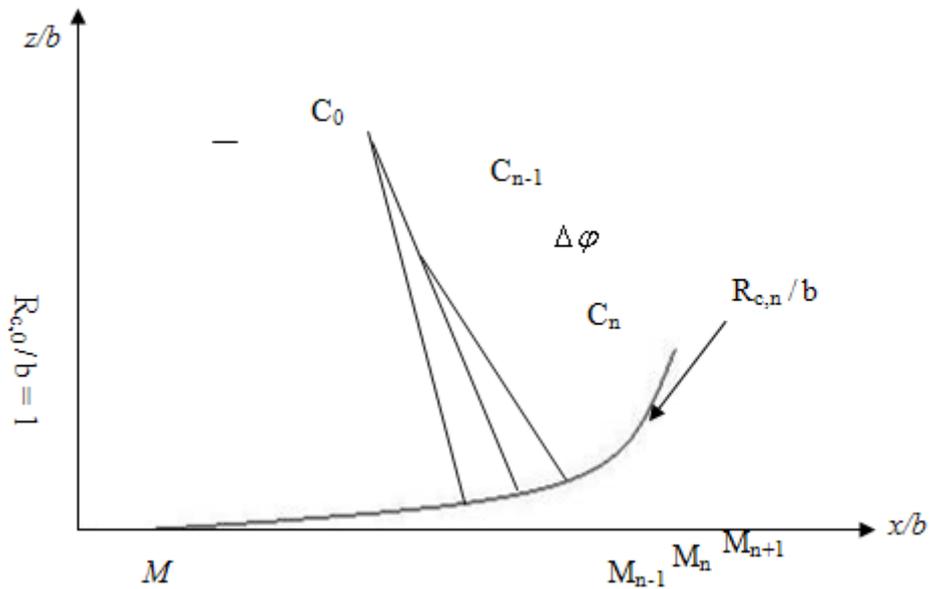


Figure A3.1 : profil d'un ménisque à symétrie axiale

On procède alors par récurrence :

➤ **Initialisation des variables :**

$$\bar{X}_o = 0; \bar{Z}_o = 0; \varphi_o = 0; \bar{R}_{c,o} = 1; \bar{X}_{co} = 0; \bar{Z}_{co} = 1$$

➤ **Rang (n-1) :** les variables $\bar{X}_{n-1}; \bar{Z}_{n-1}; \varphi_{n-1}; \bar{R}_{C,n-1}; \bar{X}_{cn-1}$ et \bar{Z}_{cn-1} sont connues.

➤ **Range n :** le point M_n est obtenu par rotation du point M_{n-1} autour du centre C_{n-1} selon un angle $\Delta\varphi$, d'où les équations suivantes :

$$\bar{X}_n = \bar{X}_{cn-1} + (\bar{X}_{n-1} + \bar{X}_{cn-1}) \cos(\Delta\varphi) - (\bar{Z}_{n-1} - \bar{Z}_{cn-1}) \cdot \sin(\Delta\varphi) \quad (A3.2)$$

$$\bar{Z}_n = \bar{Z}_{cn-1} + (\bar{Z}_{n-1} + \bar{Z}_{cn-1}) \cos(\Delta\varphi) + (\bar{X}_{n-1} - \bar{X}_{cn-1}) \cdot \sin(\Delta\varphi) \quad (A3.3)$$

L'incrémentation de φ :

$$\varphi_n = \varphi_{n-1} + \Delta\varphi \quad (A3.4)$$

Calcul de $\bar{R}_{c,n}$ selon la relation de Bashforth et Adams normée :

$$\bar{R}_{c,n} = \frac{1}{2 + \beta \cdot \bar{Z}_n - \frac{\sin(\varphi_n)}{\bar{X}_n}} \quad (A3.5)$$

Calcul des coordonnées du nouveau centre C_n en écrivant que :

$$\overrightarrow{C_{n-1}C_n} = \frac{\bar{R}_{c,n-1} - \bar{R}_{c,n}}{\bar{R}_{c,n-1}} \overrightarrow{C_n - 1M_n} \quad (A3.6)$$

Ménisques cylindriques

Dans ce cas, un des rayons de courbure principaux est infini. L'équation de Laplace (I.3) se simplifie donc en :

$$\Delta p = \frac{\sigma}{R_c} \quad (\text{A3.7})$$

en un point de l'interface situé à une distance infinie du ménisque, l'interface est plane donc les deux rayons de courbure y sont infinis : la pression est donc égale de part et d'autre de l'interface, soit p_0 (figure A3.2) .

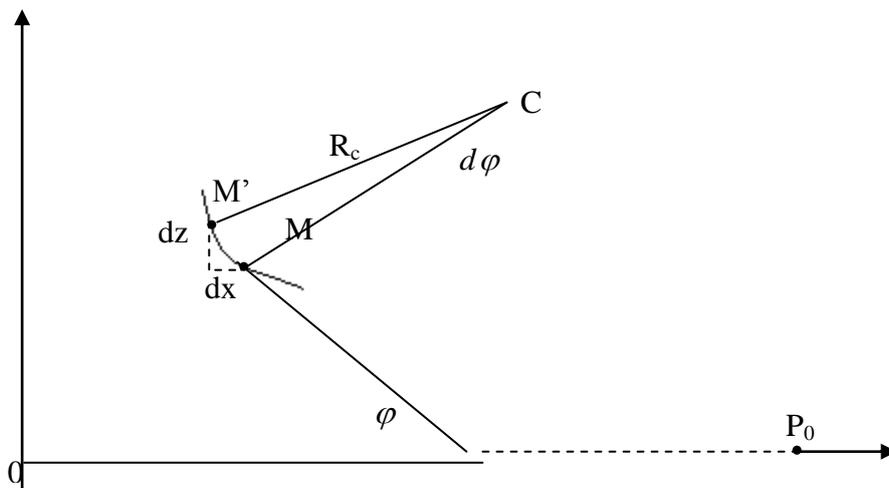


Figure A3.2 : profil d'un ménisque cylindrique

Au point M, la différence de pression de part et d'autre de l'interface est :

$$\begin{aligned} \Delta p_M &= p_{M,int} - p_{M,ext} \\ &= (p_0 - \rho_{liq} \cdot g \cdot Z) - (p_0 - \rho_{gaz} \cdot g \cdot Z) \\ &= (\rho_{liq} - \rho_{gaz}) \cdot g \cdot Z \end{aligned}$$

D'où la relation :

$$(\rho_{liq} - \rho_{gaz}) \cdot g \cdot Z = \sigma / R_c \quad (\text{A3.8})$$

Soit M' un point infiniment voisin de M . En notant l'abscisse curviligne, on peut écrire :

$$MM' = ds = R_c \cdot d\varphi \approx \frac{dz}{\sin \varphi} \quad (\text{A3.9})$$

L'intégration de la relation (A3.9) conduit à :

$$z = \pm a \sqrt{1 - \cos \varphi} \quad (\text{A3.10})$$

Ou $a = \sqrt{\frac{2\sigma}{(\rho_{liq} - \rho_{gaz})g}}$ est appelé longueur capillaire.

De même, on peut écrire que $ds \approx \frac{dx}{\cos \varphi}$, d'où :

$$dx = \pm \frac{a \cos \varphi}{2 \sqrt{1 - \cos \varphi}} d\varphi = \pm a \left(\frac{1 - 2 \sin^2(\varphi/2)}{\sqrt{2} \cdot \sin(\varphi/2)} \right) d(\varphi/2) \quad (\text{A3.11})$$

L'intégration de la relation (A3.11) conduit à :

$$x = \pm a \left(\sqrt{1 + \cos \varphi} + \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{\sqrt{1 - \cos \varphi}}{\sqrt{2} + \sqrt{1 + \cos \varphi}} \right) + \text{cst} \quad (\text{A3.12})$$

References

- [1] H. Alla, S. Freifer , C. Medjellel.
"Contribution au Phénomène de Mouillabilité en presence D'un tensioactif anionique «SDS»et non ionique«C₁₁E₅» ".
19ème Congrès Français de Mécanique, *Marseille*, (24-28 août 2009).
- [2] A.W. Adamson.
" Physical chemistry of surface "
Ed.John Wiley et sons 2 éd. (1981)
- [3] J. Bico
"Mécanismes d'imprégnation : Surfaces texturées, Bigouttes, Poreux".
Thèse de Doctorat, *Université de Paris VI* ,(2000).
- [4] A. Berthode.
"J.Chem .Phys."1983, 80, n °5.
- [5] S.E. Chitour.
" Chimie des surfaces introduction a la catalyse "
O.P.U .*Alger*. (1981).
- [6] D. A. Tremblay
« Caractérisation de la mouillabilité dynamique et du transfert de chaleur lors de l'initiation de la solidification de l'aluminium ».
Mémoire de projet de fin d'étude .*Université du Québec* (2009).
- [7] T.Young
"Essay on the cohesion of fluids" Phil. trans,(1805)
- [8] H.Alla
"Détermination des différents profils d'une goutte posée sur une paroi inclinée"
Mémoire de Magister, *Université des sciences et de la technologie d'Oran* (1996).
- [9] H.Alla.
" Modélisation et Simulation de l'étalement d'une goutte fluide Sur un plan horizontal"
Thèse de doctorat. *Université des sciences et de la technologie d'Oran* (2006).
- [10] J. F.El Hajjar
"Simulation d'écoulements liquides sur des surfaces solides pour l'animation en synthèse d'images"
Thèse de Doctorat, *Université de Limoges*, (2008).

- [11] X. Noblin
« Mouillage et Démouillage Inertiels : Triplons, Flaques vibrées, Ondes de chocs »
Thèse de Doctorat, *Université de Paris VI*, (2004).
- [12] B. Bounacer.
"Etude physico- chimique et structurale d'un tensioactif fluoré ".
Mémoire de magister, *Université d'Oran*, (1994).
- [13] S.C.Muller et R.P.Hel.
"Solution behaviour of surfactants "
2^{ème} vol. Ed. Plunum Press. (1982)
- [14] K. Shinoda.
"Bull. Chem .Soc ".Japon 26, 101 (1953).
- [15] E.A Dennis , A.A ribeiro , M.F.Roberts et R.J.Rebson .
"Solution chemistry of surfactants "
2^{ème} vol. Ed . Plunum Press. (1979)
- [16] D.F. Evans et H .Wennerstrom .
"The colloidal domain ".New York, Wiley 303-335.(1995)
- [17] C.E. Chitour.
"Physico-chimie des surfaces ".2^{ème} éd. O.P.U .Alger. (2004).
- [18] F. Hansali.
"conductivité et tension superficielle des mélanges de tensioactifs dans l'eau "
Mémoire de Magister Université d'Oran (2004).
- [19] S.Boukefoussa.
"Synthèse d'un Tensioactif Polyéthoxyles A Base De Poxy Catalysé Par la
Magnite H⁺".
projet de fin d'étude. *Université des sciences et de la technologie d' Oran* (2007)
- [20] H.E.Huppert.
"the propagation of two dimensional and axisymmetric viscous gravity currents over
rigid horizontal surface".
j.fluid mech ;121;43-58(1958).
- [21] L.H.Tanner
"The spreading of silicone oil drops on horizontal surfaces ".
Journal of phys.D,12,1473-1484,(1979).
- [22] G.Friz.
"Über den Dynamischen Randwinkel im Fall der Vollständigen Benetzung".
Zeit.fur angew.
Physic,19,374,(1965).

- [23] A.Mamur.
"Equilibrium And Spreading Of Liquid On Solid Surfaces». *Adv.ColloidInterface Sci*,19,75-102,(1983).
- [24] B.D.Summ ,V.M.Samsonov.
"Concept Of Rehbinders School And Modern Theories Of Spreading ". *Colloid surfaces* ,A-160,63-77,(1999).
- [25] T.D. Blake, J.M. Haynes.
J. Colloid Interface Sci. 30 (1969) 421.
- [26] M.J.de Ruijter,J.De Coninck,G.Oshanin.
"Droplet Spreading: Partial Wetting Regime Revisited". *Langmuir*, 15,2209-2216,(1999).
- [27] F. Brochard-Wyart, P.G. de Gennes.
Adv. Colloid Interface Sci. 39 (1992) 1.
- [28] M.J. de Ruijter, M. Charlot, M. Voué, J. De Coninck.
Langmuir 16 (2000) 2363.
- [29] L.M.Hocking .
"Sliding And Spreding Of Thin Drop By Gravity And Capillarity". *Mech.Appl.Maths*,36(1),55-69, (1983).
- [30] V. Mathieu,
Thèse Ph.D., University of Nancy (*France*), 2002.
- [31] T.R. Carmes, V. Mathieu, A Gigante
«Experimental contribution to the understanding of the dynamics of spreading of Newtonian fluids: Effect of volume, viscosity and surfactant »
Journal of Colloid and Interface Science 344 180–197 (2010) .
- [32] Help Fluent, User guide (2003).
- [33] Fluent.Ansys 12.0,16. Users's guide.
- [34] D. Fedala
« Manuel de maillage sous Gambit et de simulation sous Fluent applications »
Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique des Fluides Interne ENSAM, *CER,Paris*.
- [35] B. Ramaswamy, M. Kawahara
« Lagrangian finite element analysis applied to viscous free surface fluid flow»
Int. J. Numer. Methods Fluids vol 7,p.953-948,1987.

- [36] R. G. Prashant, V. V. Ranade, and V. C. Raghunath,
« Dynamics of Drop Impact on Solid Surface: Experiments and VOF Simulations , »
Wiley InterScience (January 2005).
- [37] H .Boudiaf,
« Contribution à l'étude d'un écoulement turbulent homogène et isotropes dans les canaux
à surface libre »,
Mémoire de magister, *université de Batna*, (2009).
- [38] H.ALLA-M . BENYETTOU
"Modélisation et Simulation numérique de l'étalement d'une goutte fluide sur un plan
horizontal". *Journal Français de Rhéologie*, Octobre, 2004.
- [39] H Alla , A Semma, M. El Ganaoui
"Numerical study of the spreading drop on a solid surface by using a Lattice Boltzmann
approach",*Proceedings of 3ICAPM,3st International Conference on Applications of
Porous Media*.
May 29–June 3, 2006, Marrakech, MOROCCO.
- [40] H.ALLA-M.BENYETTOU-M.El Ganaoui
"Numerical investigation of a drop/surface interaction",*13th international Heat Transfert "*,
Conference , 13-18 August 2006, sysdney, Australia.