

# Modélisation individu centré de la condensation en gouttes : impact des paramètres opératoires sur les transferts

J. LETHUILLIER<sup>1,i</sup>, F. TOPIN<sup>1,2</sup>, P. LAVIEILLE<sup>1</sup>, M. MISCEVIC<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> LAPLACE, UMR CNRS-INP-UPS 5213, University of Toulouse, France

<sup>2</sup> IUSTI, UMR CNRS-AMU 7343, Aix-Marseille Université, France

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

**Résumé** - Un modèle de la condensation en gouttes basé sur le suivi de chaque individu a été développé avec une attention particulière portée sur la détermination de la distribution des gouttes de petites tailles. Typiquement, pour des rayons variant de quelques dizaines de nanomètres à quelques dizaines de micromètres, la distribution du rayon des gouttes varie sur 5 à 6 ordres de grandeur. Les transferts de chaleur sont essentiellement effectués au travers des gouttes dont le rayon est proche de la distance moyenne entre les sites de nucléation. Ce modèle a alors été utilisé pour faire une étude paramétrique sur les distributions de la taille des gouttes et les transferts de chaleur associés. Dans cette communication, l'analyse des effets de l'angle de contact dynamique et de la dimension de la surface ont été analysés.

**Mots-clés** : Condensation en goutte ; Modèle basé sur l'individu ; Coefficient de transfert ; Angle de contact dynamique ; longueur du substrat.

**Abstract** - An individual-based model of dropwise condensation was developed with particular attention paid to determining the distribution of small droplets. Typically, for radii varying from a few tens of nanometers to a few tens of micrometers, the drop radius distribution varies over 5 to 6 orders of magnitude. The heat transfers are essentially carried out through the drops whose radius is close to the average distance between the nucleation sites. This model was then used to make a parametric study on the drop size distributions and the associated heat transfers. In this communication, the analysis of the effects of the dynamic contact angle and the dimension of the surface have been analyzed.

**Keywords**: Dropwise condensation; Population balance model; Individual based model; Heat transfer; Parametric analysis.

## 1. Introduction

Il existe deux approches différentes permettant de déterminer la valeur du coefficient de transfert lors de la condensation en gouttes. L'approche généralement utilisée repose sur deux sous modèles : un modèle des transferts de chaleur au travers d'une goutte unique et un modèle de la distribution de la taille des gouttes. Celle-ci peut être déterminée de deux manières différentes : soit en utilisant une loi semi-empirique pour les gouttes observables expérimentalement, couplée à une équation de bilan pour les plus petites gouttes (notée PBM, "Population Balance Model"), soit en utilisant une approche numérique de type "lagrangienne" (notée IBM, "Individual Based Model"). Généralement l'approche utilisée dans la littérature est PBM car l'inconvénient de l'approche IBM est qu'elle nécessite des temps de calcul très importants pour déterminer la distribution de l'ensemble des tailles de gouttes (de quelques nanomètres à quelques millimètres). Néanmoins, l'approche PBM n'a pas été validée que ce soit expérimentalement ou numériquement pour les plus petites gouttes (inférieures à quelques microns). De ce fait, un modèle IBM a été développé avec une attention particulière portée sur la détermination de la distribution des gouttes de petites tailles.

---

<sup>i</sup>Actuellement à CAP GEMINI Toulouse

## 2. Modèle individu-centré

### 2.1. L'algorithme dans ses grandes lignes

L'algorithme est composé d'un nombre important d'étapes qui ne peuvent pas être décrites dans cette communication. Nous en rappelons ci-après les lignes directrices. Le lecteur intéressé peut trouver la description détaillée de chacune des étapes dans la thèse de Jérémie Lethuillier [1]. Initialement, une goutte est placée sur chaque site de nucléation, en supposant que la position de ces sites reste la même pendant toute la durée de la simulation. La distribution de la taille des gouttes sera déterminée en suivant l'évolution de chacune des gouttes au cours du temps. Chaque goutte est caractérisée par son rayon de courbure  $r$ , les coordonnées de son centre ( $x$ ,  $y$ ) et plusieurs listes décrivant son voisinage. Une telle recherche de voisinage a déjà été mise en oeuvre par Hu et al. [2] et permet des gains notables de temps de calcul. Pendant le laps de temps où aucune coalescence ne se produit, l'évolution temporelle n'est pas discrétisée car la croissance de chaque goutte est connue à partir du modèle thermique décrit dans [3]. Ainsi, le pas de temps  $\delta t$  est calculé à chaque étape et correspond au temps qui s'écoulera avant le prochain évènement de coalescence. Si le temps écoulé avant la prochaine coalescence est inférieur à une valeur seuil  $\delta t_{min}$ , le pas de temps est imposé à cette valeur seuil. Ce  $\delta t_{min}$  a été choisi aussi petit que possible pour avoir une bonne résolution sur la distribution des gouttes de petites tailles, tout en conservant un temps de calcul raisonnable. Ensuite, les gouttes qui entrent en contact coalescent. Lorsqu'une coalescence se produit, celle-ci a lieu instantanément, le rayon de la goutte issue de cette coalescence est calculé par conservation du volume et sa position est déterminée en calculant le barycentre des centres de masse des gouttes impliquées dans la coalescence. Les gouttes atteignant la valeur imposée  $r_{max}$  sont mises en mouvement dans une direction imposée avec une vitesse imposée. Cette condition de départ des gouttes a été choisie afin d'être représentative du balayage induit par un mécanisme de renouvellement de la surface qui est nécessaire à l'obtention d'un régime permanent. Par exemple, ce mécanisme de renouvellement peut être lié à la gravité (cas d'une surface inclinée) ou à la présence d'un cisaillement (cas d'un flux gazeux imposé). Lorsque le centre d'une goutte atteint le bord de la surface, celle-ci disparaît instantanément. Les évènements de coalescence et de balayage ont pour effet de libérer une partie de la surface. En effet, la surface occupée par une goutte à l'issue d'une coalescence est inférieure à la somme des surfaces des gouttes impliquées dans cette coalescence. A l'issue de ces phénomènes, il est donc nécessaire de déterminer si des sites de nucléation sont de nouveau disponibles. Si un site de nucléation n'est pas occupé, une nouvelle goutte apparaît instantanément sur celui-ci avec un rayon compris entre  $r_{min}$  et  $r_{min} + \delta r(\delta t)$ . La simulation se poursuit jusqu'à atteindre le critère d'arrêt souhaité. La procédure a été validée en effectuant une comparaison avec des données de la littérature [4]. L'ensemble des références bibliographiques utilisées dans le développement de l'outil numérique peut être trouvé dans le mémoire de thèse de J. Lethuillier [1].

### 2.2. Exemple de résultat dans un cas de référence

L'étude est réalisée autour d'un cas de référence dont les paramètres sont reportés dans le tableau 1.

La figure 1 illustre les différentes étapes de la simulation avec cet ensemble de paramètres, le nombre de coalescences, de nucléations et le temps associé à chaque étape sont reportés dans le tableau 2. Sur la première figure (1.a), les gouttes viennent d'apparaître sur l'ensemble des sites de nucléation, de sorte qu'il n'y a pas encore eu de coalescences et 10000 nucléations (correspondant au nombre de sites simulés). Seulement dix millièmes de seconde plus tard,

Paramètres	Valeurs	Description
$\theta$ ( $^{\circ}$ )	85	Angle de contact dynamique
$r_{max}$ ( $\mu m$ )	65	Rayon critique de départ des gouttes
$\Delta T$ (K)	1	Sous refroidissement de la paroi
e (nm)	200	Epaisseur du traitement de surface
$k_e$ ( $W.m^{-1}.K^{-1}$ )	2	Conductivité thermique du traitement de surface
v ( $m.s^{-1}$ )	0.01	Vitesse de balayage des gouttes
$h_i$ ( $MW.m^{-2}.K^{-1}$ )	15.7	Coefficient de transfert à l'interface liq-vap
L ( $\mu m$ )	800	Arête de la surface (surface carrée)
$N_{ns}$	10000	Nombre de sites de nucléation
$N_s$ ( $m^{-2}$ )	$1.5625 \times 10^{10}$	Densité surfacique de sites de nucléation
$\delta t_{min}$ (s)	$10^{-5}$	Pas de temps minimum dans les simulations

Tableau 1 : Valeurs des différents paramètres du modèle utilisées dans la configuration de référence

le nombre de coalescences est déjà supérieur à 50000 (Fig. 1.b). Sur la figure 1.c, certaines gouttes ont des tailles importantes et vont bientôt commencer à balayer la surface. Le nombre de coalescences est pratiquement égal à 900000 avant même qu'une goutte n'ait atteint le rayon critique  $r_{max}$ . Sur la figure 1.d, une goutte balaye la surface. Dans son sillage immédiat, on distingue une zone où les gouttes sont de très petites tailles, alors qu'à une distance plus grande (toujours dans le sillage de la goutte en mouvement), les gouttes sont visiblement plus grosses. On remarque également la présence de trois gouttes de tailles moyennes (en haut à droite de la figure) sur le point de coalescer. Sur l'image suivante (figure 1.e), ces trois gouttes ont coalescé, libérant une grande zone de la surface. De nombreuses nouvelles gouttes apparaissent alors sur la zone libérée. La figure 1.f, présente la répartition des gouttes sur la surface après le départ d'une grosse goutte de la surface (en bas à droite de l'image). Ce départ provoque également la libération d'un grand nombre de sites de nucléation. Durant moins d'une seconde de temps simulé, et malgré la petite taille de la surface ( $800\mu m \times 800\mu m$ ), plus de quatre millions de nucléations et cinq millions de coalescences ont eu lieu.

Figure 1	a	b	c	d	e	f
Temps (ms)	0	10.219	130.22	850.22	860.22	920.22
Nombre de Coalescences	0	50370	894056	5255074	5311115	5672958
Nombre de nucléations	10000	33569	679298	4149265	4193568	4488717

Tableau 2 : Nombre de coalescences et de nucléations à différents instants de la simulation.

La distribution  $n(r)$  de la taille des gouttes au régime permanent est déterminée en découpant l'espace des rayons en différentes classes de tailles de gouttes. A chaque pas de temps, le nombre de gouttes appartenant à chaque classe est déterminé, puis la moyenne temporelle de tous les pas de temps suivant le premier évènement de balayage est effectuée pour obtenir la distribution au régime permanent. Le calcul de la distribution moyenne en ne prenant en compte (de façon aléatoire) qu'une partie des données (dans l'optique de réduire ces corrélations temporelles), a mis en évidence l'indépendance des résultats aux corrélations temporelles. De la même manière, plusieurs découpages de l'espace des rayons ont été testés, les résultats obtenus montrent une insensibilité de la distribution de la taille des gouttes à ce paramètre. Une fois la distribution  $n(r)$  de la taille des gouttes déterminée, le flux de chaleur est obtenu en sommant

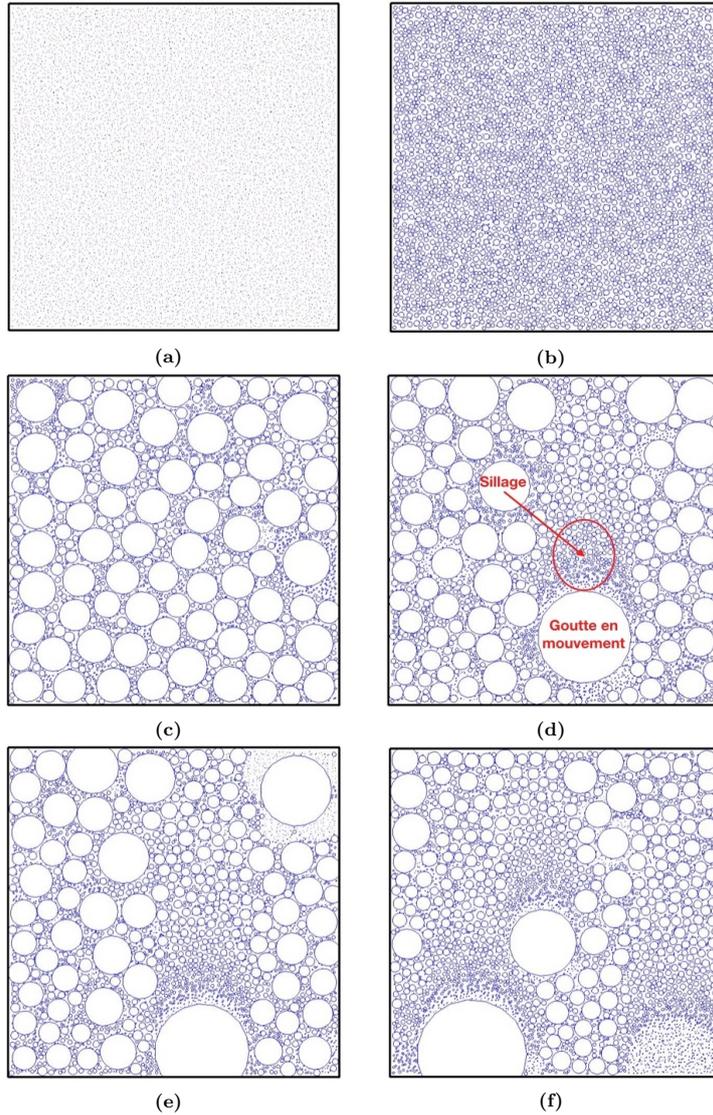


Figure 1 : Exemple de distribution spatiale des gouttes sur la surface à différents pas de temps dans la configuration de référence. Les valeurs du temps de simulation, du nombre de coalescences et de nucléations associées à chaque image sont reportées dans le tableau 2.

les contributions de chacune des gouttes :

$$Q = \int_{r_{min}}^{r_{max}} n(r)q(r)dr$$

où  $q(r)$  est le flux au travers d'une goutte unique de rayon  $r$ , obtenu à partir du modèle disponible dans la référence [3].

### 3. Analyse paramétrique

Dans cette section, on se concentre sur l'influence de divers paramètres de contrôle. Certains de ces paramètres influencent les transferts de chaleur au sein d'une goutte unique ( $\theta$ ,  $h_i$  et  $\Delta T$ ), alors que d'autres ont plutôt des effets géométriques (sur l'espace entre les sites pour  $r_e$  ou sur le mécanisme de balayage pour  $r_{max}$ ,  $v$  et  $L$ ). Afin de mieux comprendre l'influence de chaque paramètre, ils seront considérés indépendants les uns des autres (ce qui n'est pas forcément le

cas expérimentalement, par exemple  $\theta$  et  $r_{max}$  sont généralement couplés). L'étude sera réalisée autour du cas de référence présenté dans la section précédente. L'ensemble des valeurs des paramètres qui ont été testées sont reportées dans le tableau 3. Les résultats présentés dans cette communication seront focalisés sur l'analyse de l'influence de la mouillabilité et de la longueur du substrat.

Paramètres	Valeurs	Description et commentaires
$\theta$ ( $^\circ$ )	45-65-85-110-130-150	Angles dynamiques
$r_e$ ( $\mu m$ )	0.5-1-2-4-8	Distance moyenne entre deux sites de nucléation successifs - Equivalent à $N_s = 10^{12}$ ; $2.5 \cdot 10^{11}$ ; $6.25 \cdot 10^{10}$ ; $1.56 \cdot 10^{10}$ ; $3.9 \cdot 10^9 m^{-2}$ (40 000 sites de nucléation simulés pour $r_e = 0.5 \mu m$ )
$r_{max}$ ( $\mu m$ )	65-130-260	Rayon de départ des gouttes
$\alpha$	0.01-0.1-1	Coefficient de condensation - Equivalent à un coefficient d'échange à l'interface $h_i = 7.89 \cdot 10^4$ ; $8.27 \cdot 10^5$ ; $1.57 \cdot 10^7 W.m^{-2}.K^{-1}$
$\Delta T$ (K)	0.5-1-2-5-10	Sous refroidissement
$v$ ( $m.s^{-1}$ )	0-0.005-0.01-0.05-0.1	Vitesse de balayage Dans le cas où la vitesse de balayage est nulle, les gouttes sont éliminées dès qu'elles atteignent $r_{max}$ .
L ( $\mu m$ )	360 à 3600	Longueur de la surface (Largeur fixée à $360 \mu m$ )

Tableau 3 : Valeurs des différents paramètres du modèle pour l'étude paramétrique.

### 3.1. Influence de l'angle de contact dynamique

Les distributions de la taille des gouttes obtenues pour chaque angle de contact sont reportées sur la figure 2.a. Pour les grosses gouttes ( $>10 \mu m$ ), la distribution est quasi identique quel que soit  $\theta$ . En revanche, on observe d'importantes variations sur les petites gouttes (jusqu'à un ordre de grandeur entre les résultats obtenus avec  $\theta$  égal à  $45^\circ$  ou à  $150^\circ$ ). Plus la surface est

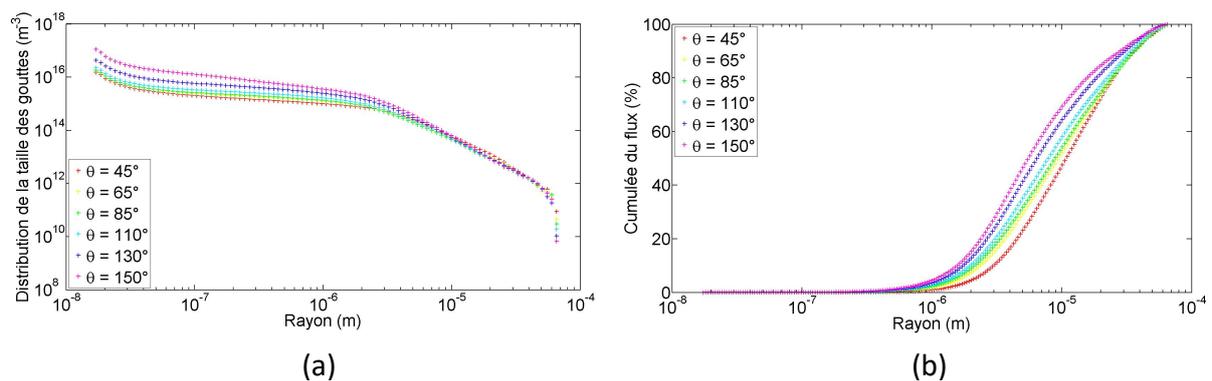


Figure 2 : (a) Distributions de la taille des gouttes et (b) cumulées du flux de chaleur réduit obtenues à partir de l'approche IBM pour différentes valeurs d'angle dynamique.

hydrophobe et plus les courbes sont translatées vers le haut. Cela s'explique par le fait que les cinétiques de croissance des gouttes sont plus lentes dans les cas hydrophobes, notamment pour les plus petites gouttes, elles passent donc plus de temps dans ces classes de tailles. De plus,

dans le cas super hydrophobe ( $150^\circ$ ), de petites gouttes peuvent exister sous les plus grosses, cela implique par exemple des cas où le nombre de gouttes présentes sur la surface est plus grand que le nombre total de sites de nucléation (par exemple lors de la coalescence entre deux gouttes centrés sur leur site, la goutte résultante se positionne entre les 2 sites de nucléation ce qui permet de créer deux nouvelles gouttes en plus de la goutte résultant de la coalescence). Malgré le fait que le nombre de petites gouttes est plus faible dans les configurations hydrophiles, le modèle prédit une forte augmentation du transfert de chaleur global (sa valeur est pratiquement 3 fois plus élevée pour  $\theta = 45^\circ$  que pour  $\theta = 150^\circ$ ). Pour un rayon de goutte donné, le volume de la goutte (et donc l'épaisseur de la couche liquide) est beaucoup plus faible en configuration hydrophile. En conséquence, la résistance thermique par conduction au sein du liquide est plus faible, et le flux de chaleur est donc plus élevé. Comme la distribution de la taille des gouttes, ainsi que les transferts de chaleur au sein d'une goutte unique sont modifiés par la valeur de l'angle dynamique, la contribution de chaque taille de goutte au flux de chaleur global l'est également (figure 2.b). Quel que soit l'angle  $\theta$ , pour ces valeurs de  $N_s$  et  $r_{max}$ , les gouttes plus petites que  $1 \mu m$  ont un rôle négligeable dans le flux de chaleur global même dans le cas le plus hydrophobe (inférieur à 5%). Malgré leur grand nombre, la contribution individuelle de chacune de ces gouttes est tellement faible que la somme de celles-ci reste négligeable. L'essentiel du flux est toujours transféré par les gouttes de rayon compris entre 1 et  $10 \mu m$  (environ 50 % pour  $\theta = 45^\circ$  et plus de 70 % pour  $\theta = 150^\circ$ ). Pour les configurations hydrophiles, le flux évacué par les gouttes supérieures à  $10 \mu m$  augmente significativement, du fait que la résistance de conduction est d'autant plus faible que la surface est hydrophile.

### 3.2. Influence de la longueur du substrat

L'objectif de cette section est de quantifier l'effet de la longueur de la surface (dans le sens du balayage) sur les résultats. Dans ce but, des simulations ont été réalisées dans la configuration de référence avec une largeur fixe ( $360 \mu m$ ) et une longueur de surface qui varie d'un facteur 1 à 10. La longueur des surfaces est donc comprise entre  $360 \mu m$  et  $3.6 mm$ .

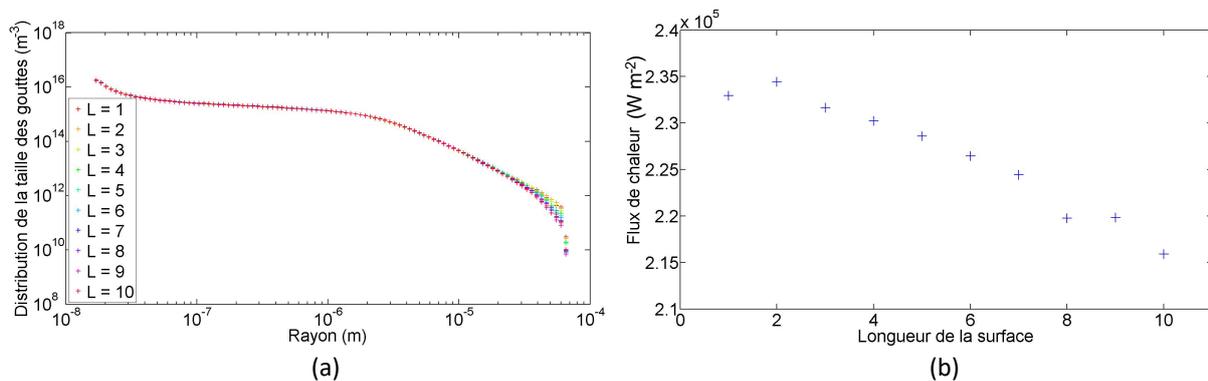


Figure 3 : (a) Distributions de la taille des gouttes et (b) flux de chaleur globaux obtenus à partir de l'approche IBM pour différentes longueurs de surface.

La répercussion sur les distributions est présentée sur la figure 3.a. Les distributions sont strictement identiques jusqu'à  $r \approx 20 \mu m$ . Au delà de cette taille, plus la surface est longue et plus la distribution est translatée vers le bas. Cette différence de comportement est due au fait que la distance moyenne nécessaire pour qu'une goutte qui balaye atteigne le bas de la surface est d'autant plus importante que la surface est longue. De ce fait, celle-ci va devenir de plus en plus grande à mesure qu'elle rencontre d'autres gouttes sur son passage. L'espace qu'elle occupe

n'est plus disponible pour d'autres gouttes de tailles intermédiaires. De plus, les zones situées en bas de la surface ne vont plus pouvoir "créer" des gouttes jusqu'à la taille  $r_{max}$  de façon aussi fréquente que sur la partie haute de la surface. Le flux de chaleur a tendance à légèrement diminuer avec l'augmentation de la longueur de la surface (figure 3.b), ce qui n'est pas étonnant, du fait que le nombre d'individus dans les classes de rayon supérieur à  $20 \mu m$  est inférieur dans les cas où la surface est plus longue (le reste de la distribution n'étant pas modifié).

Pour mieux comprendre l'effet de la longueur de la surface (dans le sens du balayage) sur les résultats, une analyse par zone a été réalisée dans le cas où la longueur a été multipliée par 10 (3.6 mm). Le découpage en zones de tailles égales est représenté sur la figure 4.

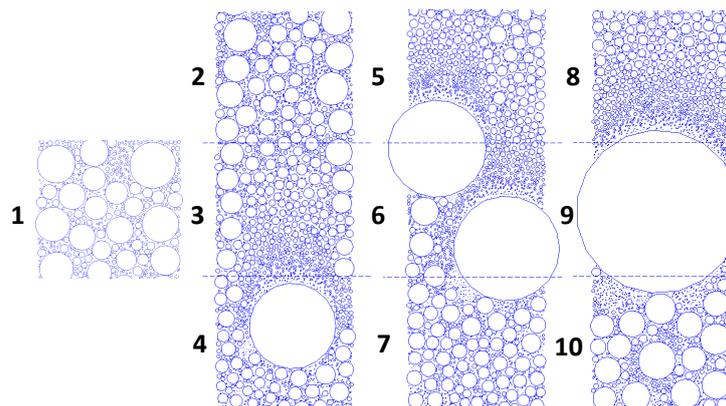


Figure 4 : Vue des gouttes à un instant arbitraire lors de la simulation IBM d'une surface de  $360 \mu m \times 3.6 mm$ . Les lignes pointillées correspondent au découpage de la surface selon la longueur ; la zone 1 est le haut de la surface et la 10, le bas.

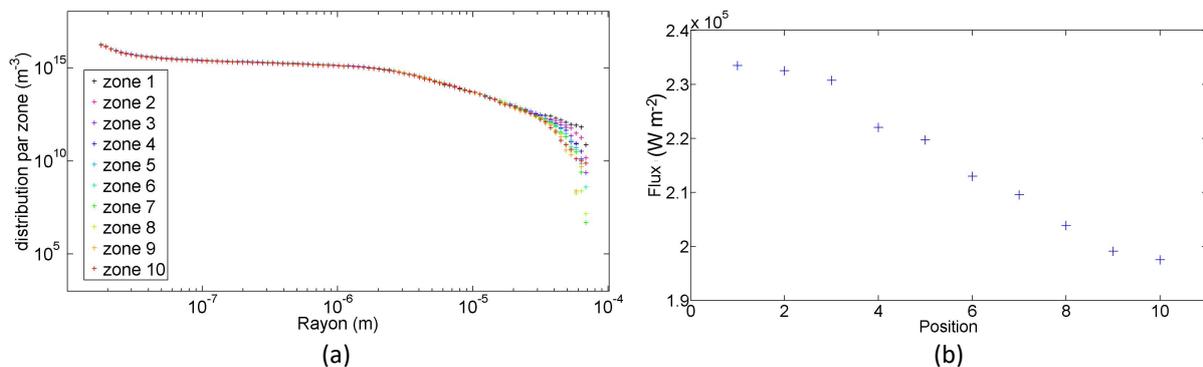


Figure 5 : (a) Distributions de la taille des gouttes obtenues sur chaque zone de la surface. La zone 1 correspond à la zone située en haut de la surface et la zone 10 à celle située en bas de la surface. (b) Evolution du flux de chaleur calculé sur chaque zone de la surface en fonction de la position.

On notera 1 la zone située tout en haut de la surface et 10 celle qui se trouve tout en bas. On remarque bien la grande différence de tailles des gouttes qui balayent la surface, avec une goutte qui balaye dans la 4ème zone de taille légèrement supérieure à  $r_{max}$ , alors que la goutte qui balaye dans la 9ème zone occupe pratiquement l'intégralité de celle-ci. A partir de cette simulation, la distribution de la taille des gouttes a été déterminée dans chaque zone de la surface

et les résultats sont représentés sur la figure 5.a. En dessous de  $20 \mu m$ , les différentes distributions sont pratiquement identiques. Au delà, les zones supérieures de la surface présentent des nombres de gouttes plus importants. Comme décrit précédemment, le fait que des gouttes arrivent des zones supérieures et balayent les zones inférieures avec des tailles d'autant plus grandes que la zone considérée est vers le bas de la surface, implique qu'il est moins probable que des gouttes de tailles proches de  $r_{max}$  existent sur les surfaces inférieures. Par exemple, lors de cette simulation, 12 gouttes ont atteint la taille  $r_{max}$  dans la zone 1 alors que seulement 3 gouttes l'ont atteinte dans la zone 10 (de plus celles-ci l'ont atteint au début de la simulation lorsque les gouttes des surfaces supérieures n'étaient pas encore arrivées dans cette zone). A partir des distributions des tailles des gouttes de chaque zone, le flux de chaleur évacué par chacune d'entre elle a été déterminé et les résultats sont reportés sur la figure 5.b. Il s'agit donc ici de flux "locaux", le flux global étant égal à la valeur présentée précédemment dans le cas  $L=10$ . Celui-ci est plus important sur les zones supérieures et décroît à mesure que l'on descend sur la surface. Le comportement de la courbe est relativement similaire à celle qui présentait l'influence de la longueur sur le flux de chaleur global. La décroissance est quasi-linéaire lorsque l'on considère les zones de plus en plus basses, le flux de chaleur étant entravé par les plus grosses gouttes à mesure que l'on descend sur la surface.

#### 4. Conclusion

- Les paramètres qui influencent les transferts de chaleur au sein d'une goutte unique (i.e.  $\theta$ ,  $\alpha$  et  $\Delta T$ ) jouent un rôle majeur sur la distribution de la taille des gouttes. Plus la croissance est rapide et plus la valeur du flux de chaleur global est élevée. Il est important de noter toutefois que pour le sous-refroidissement  $\Delta T$ , l'augmentation du flux de chaleur global va de pair avec une diminution du nombre de gouttes du fait que le rayon des gouttes qui quittent la surface est également plus élevé. De ce fait, la valeur du coefficient de transfert est plus faible dans le cas où le sous-refroidissement est élevé.
- Les paramètres qui affectent le balayage (i.e.  $r_{max}$ ,  $v$  et  $L$ ) ont un effet principalement sur le flux de chaleur : plus les gouttes atteignent des tailles élevées (soit parce que leurs temps de trajet pour atteindre le bord de la surface est plus long, soit parce qu'elles sont mises en mouvement à des tailles plus élevées) et plus le flux de chaleur global est dégradé.
- Le paramètre  $N_s$  est particulier, celui-ci n'affecte ni les dynamiques de croissance, ni le balayage. Il est pourtant celui qui modifie le plus la distribution de la taille des gouttes en modifiant la distance moyenne entre les sites de nucléation.

#### Références

- [1] J. Lethuillier. *Condensation en gouttes : du comportement individuel au transfert de chaleur à l'échelle d'une population*. Thèse de l'Université de Toulouse, 2021.
- [2] Z. Hu, Z. Yuan, H. Hou, F. Chu, and X.M. Wu. Event-driven simulation of multi-scale dropwise condensation. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 167 :120819, March 2021.
- [3] J. Lethuillier, M. Miscevic, P. Lavieille, P. Lavieille, and C. Coustet. Comprehensive correlation for the prediction of the heat transfer through a single droplet in dropwise condensation regime. *Applied Thermal Engineering*, 209, 2022.
- [4] K. Stevens, J. Crockett, D. Maynes, and B. Iverson. Simulation of drop-size distribution during dropwise and jumping drop condensation on a vertical surface : Implications for heat transfer modeling. *Langmuir*, 35(39) :12858–12875, September 2019.