

Simulation numérique de l'impact et de la solidification de plusieurs gouttes sur un substrat

Cédric LE BOT¹

¹Laboratoire TREFLE – Site ENSCPB
16 Avenue Pey Berland – 33607 Pessac Cedex
*(auteur correspondant : lebot@enscpb.fr)

Résumé - L'impact et la solidification de gouttes métalliques sur un substrat solide a fait l'objet de nombreuses études, tant d'un point de vue numérique qu'expérimental. L'objectif de telles études est de mieux comprendre comment se forment de fines couches métalliques sur une surface par pulvérisation de gouttelettes. Les propriétés des revêtements ainsi fabriqués dépendent des conditions d'impact tant d'un point de vue dynamique que thermique des particules fluides qui composent le spray. Le comportement dynamique et les transferts thermiques d'une goutte isolée ont été largement étudiés. Les expériences et les simulations numériques des différents auteurs ont permis d'interpréter de nombreux phénomènes tels que la déposition (splat), ou l'éclaboussement (splashing) en fonction des propriétés physiques de la goutte et du substrat et des conditions initiales d'impact. Malgré tout, de nombreuses questions demeurent présentes, tel que la contribution de l'angle de contact dynamique, qui reste encore mal maîtrisé. Plusieurs études numériques ont déjà été réalisées en 2D et en 3D afin de valider et étudier le comportement d'une goutte se solidifiant sur un substrat sec et lisse. Mais peu d'études numériques font état de l'impact de plusieurs gouttes. Nous proposons ainsi une étude numérique de l'impact de gouttes, les unes sur les autres, afin de déterminer l'évolution de leur morphologie et les transferts thermiques qui interviennent au cours du temps.

Nomenclature

C	fonction de phase	<i>Symboles grecs</i>	
C_p	capacité calorifique, $J.kg^{-1}.K^{-1}$	λ	conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$
f_s	fraction solide	μ	viscosité dynamique, $Pa.s$
L_i	distance entre deux gouttes, m	ρ	masse volumique, $kg.m^{-3}$
L_f	chaleur latente, $J.kg^{-1}$	σ	tension superficielle, $N.m^{-1}$
S_c	terme source, $W.m^{-3}$	<i>Indices et exposants</i>	
t	temps, s	s	substrat
T	température, K	g	goutte
V	vitesse, $m.s^{-1}$		

1. Introduction

L'impact de gouttes est un phénomène que l'on rencontre dans de nombreux domaines, soit d'origine naturelle, comme par exemple la pulvérisation d'engrais sur un champ, ou lors d'un procédé industriel, comme pour le cas des imprimantes à jet d'encre, ou le dépôt de revêtements fins métalliques pour améliorer les caractéristiques d'une surface (anti-corrosion, protection contre les chocs, etc). La fabrication de ces couches fines se fait par pulvérisation de gouttelettes [1] et leur contact à la surface provoque leur refroidissement et leur solidification. De nombreuses études ont été réalisées afin de comprendre les relations qui existent entre les conditions d'impact d'une goutte (la vitesse initiale, les propriétés physiques, les températures de goutte et de substrat, la rugosité du substrat...) et la forme finale de la goutte après impact [2]. Globalement, une goutte peut adopter deux comportements distincts. Dans le premier cas, lorsque l'impact est modéré - ce que l'on quantifie par le nombre de Sommerfeld faible [3] - l'impact de la goutte provoque son étalement sous forme de disque.

La forme de galette finale s'appelle un splat. Par contre, pour un nombre de Sommerfeld plus élevé, des instabilités peuvent apparaître (gouttes secondaires, digitations,...). L'écrasement résulte en splashing qui donne à la goutte une forme finale en étoile. Les phénomènes physiques gouvernant ces comportements restent difficiles à analyser expérimentalement et numériquement, à cause des faibles échelles de temps et d'espace. On se propose dans cette étude de rester dans le cadre d'un écrasement résultant en un splat en supposant entre autres une vitesse d'impact faible. Des études expérimentales autour d'une goutte isolée [4] ont montré l'influence des paramètres sur la forme et le degré d'étalement du fluide, en tenant compte ou non de la solidification. Ces résultats ont mis en valeur l'importance de l'angle de contact entre le substrat et la goutte. Cependant, un angle dynamique reste difficile à introduire dans les modèles numériques utilisés. Des études numériques [5] ont également été réalisées et ont montré de nettes similitudes avec les résultats expérimentaux. Le présent travail est la continuité de travaux numériques réalisés sur l'impact d'une goutte d'étain ou d'indium et comparés à la littérature [5][6]. Les résultats ayant montré une bonne concordance avec des données numériques et expérimentales, l'objectif de cette étude est de déterminer le comportement dynamique et thermique de deux gouttes s'écrasant consécutivement l'une sur l'autre, afin de vérifier la morphologie de l'ensemble et d'étudier les interactions thermiques (solidification et refusion) entre les deux particules.

2. Modélisation mathématique

L'écoulement des gouttes, les transferts de chaleur et le suivi de la surface des gouttes en fonction du temps sont modélisés respectivement par les équations de mouvement avec prise en compte de la tension superficielle, l'équation de l'énergie avec un terme source pour modéliser la solidification et l'équation d'advection (système 1).

$$\begin{cases} \operatorname{div}(V) = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial V}{\partial t} + (V \cdot \nabla)V \right) = \rho g - \nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla V + \nabla'V)) + \sigma \kappa \delta n \\ \rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + V \cdot \nabla T \right) = \lambda \Delta T + S_c \\ C = 0 \quad \text{dans l'air ou le substrat} \\ C = 1 \quad \text{dans la goutte} \end{cases} \quad (1)$$

Ce système est résolu par un code numérique basé sur une discrétisation en volumes finis. La variable C (fonction de phase), qui prend pour valeur 1 dans la goutte et 0 hors de la goutte (air ou substrat) est résolue numériquement par une équation d'advection définie par l'équation (2) d'une manière continue.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \cdot \nabla C = 0 \quad (2)$$

La surface libre de la goutte est définie pour $0 < C < 1$. Les caractéristiques physiques dans chaque maille sont déterminées en fonction du taux de présence de chacun des fluides dans le volume de contrôle par une loi linéaire. Dans l'expression (3), Γ représente aussi bien la conductivité thermique que la capacité calorifique, la viscosité ou la masse volumique.

$$\Gamma = C\Gamma_{goutte} + (1-C)\Gamma_{air} \quad (3)$$

Les équations de conservation de masse et de quantité de mouvement sont résolues par un schéma hybride et une méthode de Lagrangien augmenté. L'équation d'advection est résolue par un schéma TVD et l'équation de l'énergie par un schéma centré. Le terme source de l'équation de l'énergie correspond à la chaleur dégagée (ou absorbée) lors de la solidification (ou de la fusion) des gouttes. Ce terme s'exprime par :

$$S_C = \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4)$$

Ce terme est résolu par une méthode itérative de point fixe sur la fraction solide f_s et a déjà été validé dans des travaux antérieurs [7]. Le terme source utilisé dans l'équation de l'énergie est exprimé sous la forme :

$$S_C = \rho C_p \frac{(T - T_f)}{\Delta t} \quad (5)$$

Une fois l'équation de l'énergie résolue avec ce terme source, la relation (4) fournit la valeur de la fraction solide f_s . Le critère d'arrêt $\varepsilon = |f_s^{k+1} - f_s^k|$ assure la convergence de la solution et la cohérence entre la valeur de la température et celle de f_s . La fraction solide vaut 1 dans les zones de goutte solidifiée et 0 dans les zones où la goutte est encore liquide et dans l'air et le substrat. Bien que la fraction solide soit physiquement discontinue (0 ou 1), la résolution numérique diffuse les valeurs de f_s sur une maille. Le front de solidification est alors déterminé numériquement dans les zones où $0 < f_s < 1$.

3. Simulation numérique

3.1. Validation de la simulation

L'impact de plusieurs gouttes est un phénomène complexe et encore peu abordé. Afin de s'assurer de la pertinence des résultats, une première étude a été réalisée sur l'impact et la solidification d'une goutte isolée, et comparée à la littérature. Dans cette configuration, on considère un domaine de dimensions 10cm × 10cm × 10cm contenant une goutte d'étain initialement sphérique de diamètre D, de vitesse d'impact V_i et de température homogène T_i . Cette goutte est en contact avec un substrat d'acier d'épaisseur e et de température initiale T_s . Les propriétés physiques des matériaux sont décrites dans le tableau 1. La tension superficielle est de $\sigma = 0.526 \text{ N/m}$.

Matériau	λ $W.kg^{-1}.K^{-1}$	ρ $kg.m^{-3}$	C_p $J.kg^{-1}.K^{-1}$	μ $Pa.s$
Substrat	14,9	7900	477	---
Etain liquide	33,6	6970	244	1.10^{-3}
Etain solide	62,2	6970	244	---

Tableau 1 : Propriétés des matériaux

Les conditions limites de ce domaine sont de type symétrie sur les conditions latérales, si bien que seul un quart de goutte est modélisé afin de limiter la taille mémoire et le temps de calcul. La face inférieure est une condition limite de type paroi (vitesse nulle) et correspond à une température imposée de 25°C. La face supérieure est une condition limite libre et adiabatique. Le schéma (Fig. 1) résume cette configuration. Le pas de temps est choisi égal à $\Delta t = 10^{-4}$ s et le maillage est constant de $80 \times 80 \times 80$. Les résultats de la figure 2 montrent une concordance de nos résultats (Fig 2. a)) avec les résultats expérimentaux (Fig 2. b)) issus de la littérature [8]. La goutte s'étale sur le substrat, et se rétracte par action de la tension superficielle, créant un jet ascendant. La solidification modifie ce comportement en limitant l'étalement de la goutte. Cette validation a été complétée [5] par des comparaisons de degrés d'étalement obtenus numériquement avec ceux de la littérature [8].

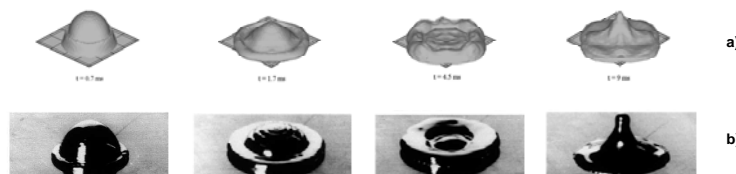


Figure 2 : Comparaison de : a) résultats expérimentaux ([8]) et b) résultats numériques

3.2. Impact de plusieurs gouttes

L'impact de plusieurs gouttes sur un substrat est complexe à étudier du fait du nombre très élevé de configurations possibles : impacts simultanés, décalés dans le temps ou l'espace... Nous proposons ici une configuration particulière : il s'agit d'une première goutte s'écrasant sur une surface. Une fois solidifiée et revenue à température ambiante, une deuxième goutte s'écrase sur la précédente avec un décalage des points d'impact entre les deux gouttes de distance L_i . Cette configuration permet de comparer nos résultats à la littérature [9]. Les caractéristiques des matériaux utilisés sont décrites dans le tableau 1.

D'un point de vue du modèle, la configuration numérique est composée d'une boîte de 20mm de côté par 20mm de haut. Un substrat (d'acier) est modélisé par un obstacle de 6,4mm d'épaisseur et de perméabilité très faible, si bien que la goutte ne peut le pénétrer. La première goutte (étain) de $1,1 \cdot 10^{-3}$ m de rayon, de vitesse $V=2,5 \text{ m.s}^{-1}$ et de température initiale $T=240^\circ\text{C}$ se situe à l'instant $t=0\text{s}$ au contact de ce substrat. La simulation permet de simuler son étalement au cours du temps. Une fois cette goutte étalée, refroidie et solidifiée, une deuxième goutte de mêmes rayon, vitesse d'impact, température et matériau s'écrase sur la précédente, non pas juste au dessus, mais légèrement décalée. En effet, les points d'impact des deux gouttes sont distants de $d=3\text{mm}$ (voir figure 1)

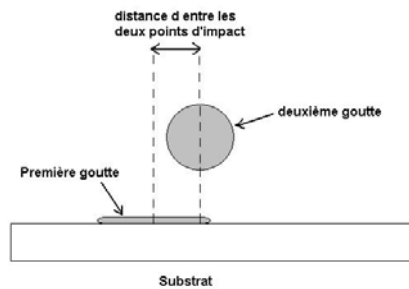


Figure 1 : Représentation de la configuration (deux gouttes décalées)

Le pas de temps est de $\Delta t=10^{-5}\text{s}$ et le maillage est de $150 \times 150 \times 105$. Ce maillage conséquent est nécessaire pour avoir une bonne description des formes des deux gouttes. Les conditions limites latérales correspondent à des parois adiabatiques (vitesse nulle), la condition limite haute est de type Neumann et adiabatique, la condition limite inférieure est une paroi à température imposée $T=25^\circ\text{C}$. Le substrat étant modélisé par un milieu de perméabilité très faible, seule la conduction thermique intervient. La température du substrat, simplement initialisée, évolue librement au cours du temps. L'impact de la première goutte montre un comportement de splat, la forme finale solidifiée est donc un disque sur lequel vient s'écraser la seconde goutte. Le point d'impact de cette seconde particule n'étant pas confondu avec le centre de la précédente goutte, l'étalement de la seconde n'est pas symétrique.

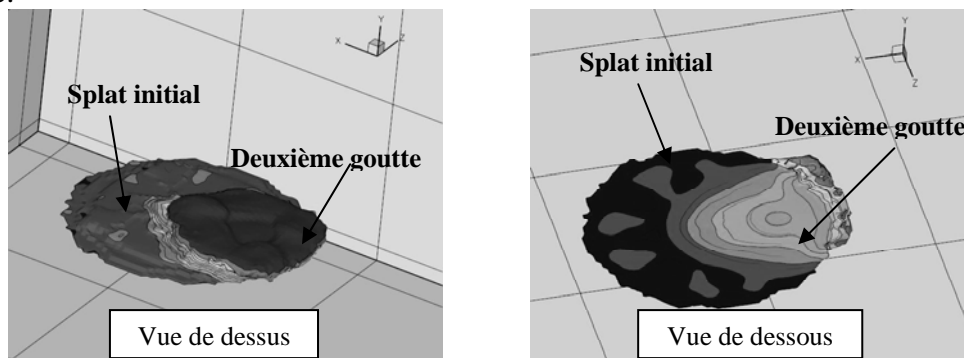


Figure 2 : Champ de température des deux gouttes vues de dessus (à gauche) et de dessous (à droite)

L'analyse du champ de température montre que l'impact de la deuxième goutte transmet de la chaleur au précédent splot, ce qui provoque une refusion partielle. De cette manière, l'étalement de la deuxième particule n'est pas réalisé sur un substrat sec mais sur une zone liquide au repos, ce qui limite localement le mouvement du métal avant sa solidification. Ainsi, le métal encore liquide atteignant le splot s'étale peu alors que la partie de la goutte en contact direct avec le substrat se comporte comme dans le cas d'un impact de goutte isolée : le fluide s'étale de manière circulaire. Cela provoque une morphologie que l'on peut observer sur la figure 3. Cette forme est comparable aux résultats qui sont présentés en référence [9], où figurent des résultats expérimentaux.

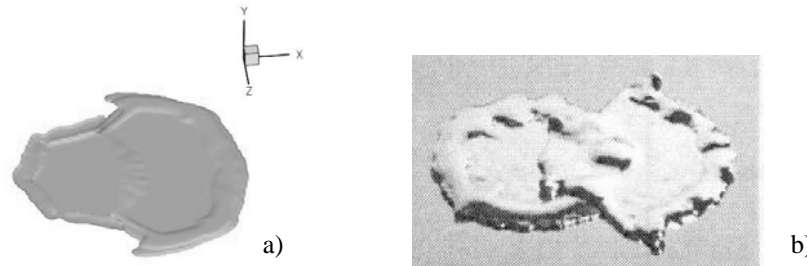


Figure 3 : *Forme finale des deux gouttes : a) numérique b) expérience de référence [9]*

L'évolution des températures de substrat en dessous de l'impact des gouttes montre également que les échanges thermiques entre la première goutte et le substrat n'ont pas la même allure que lors de l'impact de la deuxième particule fluide. La figure 4 montre l'évolution des températures dans le substrat en dessous du point d'impact de chaque goutte en fonction du temps. Afin de comparer les deux évolutions, l'échelle de temps est prise entre $t=0s$ (instant d'impact de la première goutte OU instant d'impact de la seconde goutte) et $t=1,5 \cdot 10^{-3}s$ (temps d'étalement de la première goutte OU temps d'étalement de la seconde goutte sur la précédente). Ces températures sont prises soit au niveau de la surface du substrat ($z=0$), soit à une cote z en dessous de la surface du substrat.

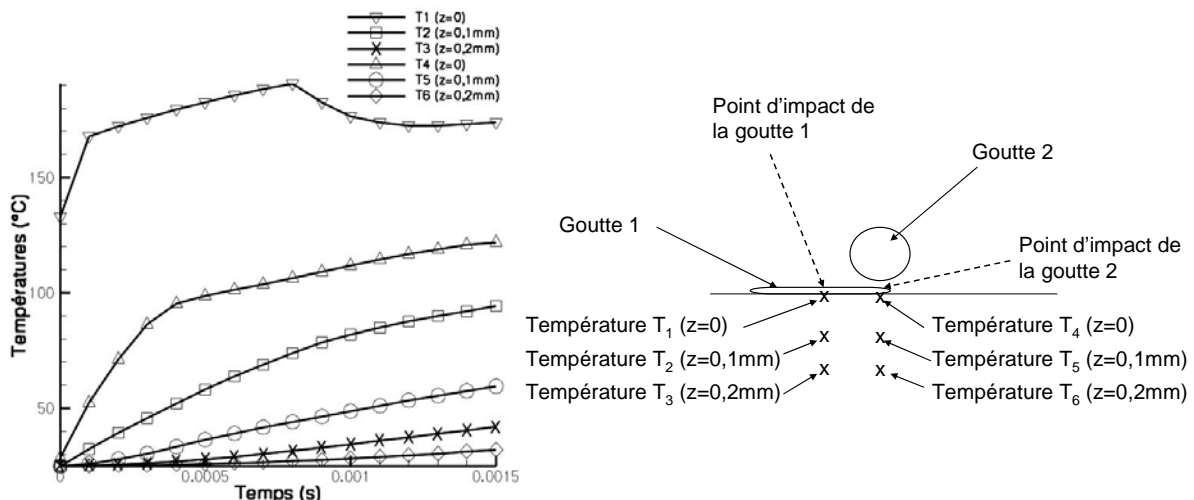


Figure 4 : *Températures du substrat en fonction du temps et schéma explicatif*

Lors de l'impact de la première particule, on remarque en effet que la température du substrat T_1 augmente dès le contact, conformément à des travaux antérieurs [7]. Lorsque la solidification s'achève, la température de substrat diminue par relaxation du système. Une fois ce système revenu à une température de $25^\circ C$, l'impact de la deuxième goutte (retour à $t=0$ en figure 4) provoque une remontée de la température du substrat (T_4 , T_5 et T_6 , figure 4). Cependant, cette augmentation est moins prononcée que précédemment. Une partie de l'énergie disponible dans la deuxième goutte va contribuer à la refusion partielle de la

