

Simulation numérique de l'impact d'une goutte d'étain avec solidification

F. SARRET^a, C. LE BOT^b, S. VINCENT^b, J.-P. CALTAGIRONE^b, E. MEILLOT^a, L. BIANCHI^a

a. CEA DAM Le Ripault, F-37260 MONTS, France.

b. Université de Bordeaux 1, I2M, département TREFLE UMR 5985, F-33600 PESSAC, France.

Résumé :

Nous présentons la simulation numérique de l'impact d'une goutte d'étain avec solidification sur un substrat lisse en acier 304L. Ce cas a été traité dans la littérature, l'objectif est de valider notre modèle physique et nos méthodes numériques. Pour cela, nous utilisons une résolution directe des équations de Navier-Stokes par un modèle à 1-fluide en prenant en compte le caractère multiphasique, les transferts thermiques et le changement d'état de la goutte d'étain. Une méthode numérique couplant une résolution lagrangienne à une modélisation eulérienne est employée pour la première fois pour le traitement des termes d'advection dans les équations scalaires de suivi d'interface et d'énergie afin de limiter la diffusion numérique..

Abstract:

Numerical simulation of tin droplet impact with solidification onto a 304L steel substrate is presented. This case is studied in the literature; the aim of this paper is to validate our physical models and numerical methods. In this way, a direct Navier-Stokes equations resolution is investigated with a 1-fluid model taking into account multiphase flow, heat transfers and phase change. A numerical method is used combining lagrangian resolution with eulerian modeling in order to both solve heat convection and capture interface between liquid phase (droplet) and ambient gas.

Mots clefs : multiphasique, transferts thermiques, changement d'état, étalement et projection plasma.

1 Introduction

Le procédé de la projection plasma d'arc soufflé de poudres métalliques est couramment utilisé dans la réalisation de barrières thermiques par dépôt mince sur des pièces mécaniques. Les contraintes thermocinétiques de l'écoulement plasma rendent difficile l'observation expérimentale de la construction d'un revêtement. La simulation numérique à petite échelle permet alors de caractériser un tel dépôt. Les phénomènes physiques intervenant dans le procédé sont nombreux : turbulence, compressibilité, tension superficielle, mouillabilité, transferts thermiques et changement d'état. Nous développons un code de calcul prenant en compte les différents phénomènes physiques. Dans le cadre de la projection plasma, en considérant un diamètre de particule de poudre de 30 μm , nous estimons qu'une résolution de 26 mailles par diamètre initial de goutte permettra de réaliser l'empilement de quelques dizaines de particules dans un volume de simulation de 200 μm x 200 μm x 100 μm , soit pour un maillage régulier un total de 4,6 millions de points.

Afin de réaliser la simulation de la construction d'un dépôt, une étape préliminaire consiste à vérifier la validité des résultats sur un cas connu avec la même résolution de grille de calcul. Pour cela, nous simulons le cas expérimental de Pasandideh Fard *et al.* [1] qui est l'impact d'une goutte d'étain millimétrique en chute libre avec solidification sur un substrat en acier 304L. Le contact entre la goutte d'étain fondue et le substrat froid fait intervenir non seulement des phénomènes de capillarité (tension superficielle, mouillabilité) mais aussi la solidification par transferts thermiques. Dans cette étude, nous souhaitons vérifier que le code reproduise correctement les résultats expérimentaux avec un maillage relativement grossier (26 mailles par diamètre initial de goutte) pour envisager l'étude de la construction d'un dépôt dans les conditions de la projection plasma.

2 Modélisation

L'outil de simulation est basé sur la librairie Thétis (bibliothèque de modules de mécanique des fluides numérique), développé au laboratoire I2M. Une discrétisation en volumes finis sur un maillage cartésien décalé (pression/vitesse) en 3D est adoptée pour résoudre les équations de conservation. Les équations de conservation

sont discrétisées en temps de manière implicite. Ces méthodes sont détaillées et validées par des travaux antérieurs [2, 3].

2.1 Équations de conservation

Nous utilisons une description déterministe des fluides multiphasiques compressibles en interaction avec un substrat comme détaillé par Vincent *et al.* [2]. La mise au point d'un modèle compressible répond aux besoins de modélisation des phénomènes dans la flamme plasma mais les problèmes traités ici sont incompressibles. La formulation est la suivante :

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{\chi_T} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\tilde{\rho} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \tilde{\rho} \mathbf{g} - \nabla \left(p - \frac{\tau}{\chi_T} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \nabla \cdot \left(\tilde{\mu} \cdot (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) \right) - \frac{\tilde{\mu}}{K} \mathbf{u} + \mathbf{F}_{TS} \quad (2)$$

$$\tilde{\rho} \cdot \tilde{c}_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T \right) = \nabla \cdot \left(\tilde{\lambda} \cdot \nabla T \right) - \frac{\beta T}{\chi_T} + S_m \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C = 0 \quad (4)$$

Où p est la pression, t le temps, \mathbf{u} la vitesse locale, χ_T le coefficient de compressibilité isotherme, $\tilde{\rho}$ la masse volumique, \mathbf{g} la gravité, $\tilde{\mu}$ la viscosité dynamique, τ le temps caractéristique pour les effets de compressibilité (pris égal au pas de temps de la résolution numérique du modèle), K le terme de Darcy pour prendre en compte le substrat solide, \mathbf{F}_{TS} un terme de tension de surface, \tilde{c}_p la capacité calorifique isobare, T la température, $\tilde{\lambda}$ la conductivité thermique, β le coefficient de compressibilité isobare, S_m un terme source prenant en compte le changement d'état et C la fonction de phase (valant 1 dans la goutte et 0 en dehors). Le coefficient de compressibilité de l'étain étant $\chi_{T, \text{étain}} = 0,44 \cdot 10^{-9} \text{ Pa}^{-1}$ et le pas de temps de la simulation étant de $1 \mu\text{s}$, le modèle revient à une expression incompressible dans notre cas.

En chaque point du domaine, les caractéristiques physiques notées $\tilde{\varphi}(\mathbf{M}, t)$ sont réactualisées en fonction de la proportion de chaque phase (air, étain liquide, étain solide et substrat) et des caractéristiques de celles-ci (notées, φ_{air} , φ_{liquide} , φ_{solide} et $\varphi_{\text{substrat}}$).

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{M}, t) = (1 - Q) \cdot \left((1 - C) \cdot \varphi_{\text{air}} + C \cdot (1 - f_s) \cdot \varphi_{\text{liquide}} + C \cdot f_s \cdot \varphi_{\text{solide}} \right) + Q \cdot \varphi_{\text{substrat}} \quad (5)$$

Où f_s représente la fraction d'étain solide (valant 1 dans l'étain solide et 0 en-dehors) et Q la présence du substrat (valant 1 dans le substrat et 0 en dehors). Les caractéristiques sont considérées constantes dans chaque phase.

2.2 Modélisation des effets capillaires

La modélisation d'écoulements multiphasique de fluides non miscibles nécessite de tenir compte des forces interfaciales (tensions de surface). La force de tension de surface entre l'étain liquide et l'air est modélisée à partir du modèle de force de surface continue présenté par Brackbill *et al.* [4], comme suit :

$$\mathbf{F}_{TS} = \sigma \kappa \mathbf{n}_i \delta_i \quad (6)$$

Où σ est la tension superficielle, κ la courbure locale de l'interface et $\mathbf{n}_i \delta_i$ la normale à l'interface.

Afin d'améliorer le calcul de la courbure, une fonction de phase régularisée, notée C^* , est définie. Elle est obtenue en résolvant une équation d'Helmholtz sur C comme proposée par Pianet *et al.* [5]. Les effets de mouillabilité résultent de la compétition des tensions de surface goutte/air, goutte/substrat et air/substrat. La prise en compte numérique de la mouillabilité est réalisée par l'adjonction d'un terme de pénalisation dans l'équation d'Helmholtz (équation 7) :

$$C = C^* - \nabla \cdot (D^* \cdot \nabla C^*) + B^* \cdot (C^* - C_\infty^*) \quad (7)$$

Où D^* un le coefficient de diffusion égal à $L_i \Delta h$ (avec Δh la dimension locale de la cellule et $L_i = 1$ la distance arbitraire choisie par l'utilisateur sur laquelle C est étalée de part et d'autre de l'isovaleur $C=0.5$ représentant l'interface), B^* un paramètre de pénalisation et C_∞^* la valeur à imposer à la paroi afin que l'angle de contact statique apparent θ_a soit correctement reproduit numériquement [6]. En remarquant que si $C_\infty^* = 0$ le matériau est non mouillant et si $C_\infty^* = 1$ le matériau est parfaitement mouillant, on estime les valeurs intermédiaires numériques de C_∞^* , par réalisation d'expériences numériques de dépôts de gouttes 2D/3D [6] sur des substrat de mouillabilité variée (différents C_∞^*). On mesure enfin l'angle de contact obtenu pour chaque cas afin d'en déduire une loi numérique pour C_∞^* :

$$C_\infty^* = 0,9944 \cdot e^{-\left(\frac{\theta_a - 1,237}{68,47}\right)^2} + 0,2122 \cdot e^{-\left(\frac{\theta_a - 81,81}{28,11}\right)^2} \quad (8)$$

La courbure locale de l'interface et la normale à l'interface sont estimées grâce à la fonction de phase régularisée telles que :

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla C^*}{\|\nabla C^*\|} \right) \text{ et } \mathbf{n}_i \delta_i = \nabla C^* \quad (9)$$

Ces variables sont alors injectées dans l'équation (6) afin de calculer plus finement le terme correspondant dans l'équation (2).

2.3 Modélisation du changement d'état

Le modèle consiste en une transition franche liquide/solide à la température de fusion T_f . Le changement d'état entraîne un dégagement (solidification) ou une capture (fusion) de chaleur latente L_f . L'interface liquide/solide est calculée à l'aide de la fraction solide f_s qui est définie par l'équation suivante :

$$\begin{cases} f_s = 1 \text{ si } T < T_f \\ 0 < f_s < 1 \text{ si } T = T_f \\ f_s = 0 \text{ si } T > T_f \end{cases} \quad (10)$$

La fraction solide f_s est déterminée par la résolution du terme source S_m de l'équation 3, correspondant à l'énergie libérée pendant la solidification ou capturée pendant la fusion, et définie comme suit :

$$S_m = -\rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (11)$$

Le terme source S_m n'est activé que dans les cellules où la fonction de phase C est supérieure à 0,9. La partie solidifiée est considérée comme un fluide avec une forte viscosité ($\mu = 19,2 \text{ Pa.s}$). Les masses volumiques de l'état liquide et solide sont supposées identiques, et les autres propriétés (conductivités thermiques, capacité calorifique) prennent des valeurs différentes pour l'état liquide et solide (tableau 1).

2.4 Méthode sous maille

Des travaux antérieurs [8] ont montré des résultats cohérents en utilisant une résolution directe des termes d'advection des équations de transport scalaire (phase, température) par des schémas hyperboliques TVD. Cependant, les résultats mettaient en avant une diffusion numérique importante sur des temps longs de simulation. L'obtention de résultats satisfaisant pour la validation de l'impact d'une goutte sur un dépôt demandait l'utilisation d'un maillage relativement fin comprenant 63 mailles par diamètre de goutte. L'utilisation de cette démarche numérique n'est pas envisageable pour la construction d'un dépôt en projection plasma pour lequel une vingtaine de points par diamètre de goutte au maximum pourra être mise en œuvre.

Dans le but de modéliser le plus fidèlement possible avec un maillage grossier les termes d'advections des équations scalaires, une méthode sous maille est utilisée consistant à résoudre de manière lagrangienne l'advection d'une quantité scalaire à l'aide de marqueurs, éliminant ainsi la diffusion numérique lors de l'advection. Introduite par Vincent *et al.* [9] pour advecter la fonction de phase, elle est généralisée à l'équation

de l'énergie avec changement de phase. Neuf marqueurs par cellule sontensemencés initialement avec une répartition aléatoire au sein des cellules. À chaque itération les marqueurs prennent pour valeur la quantité scalaire définie dans la cellule et sont advectés par le champ de vitesse calculé par l'équation de conservation de quantité de mouvement. Une étape de projection des valeurs des marqueurs est ensuite réalisée pour mettre à jour les variables scalaires dans le domaine eulérien. La suite de la résolution du modèle est réalisée en eulérien. Cette méthode est utilisée pour résoudre l'advection de la fonction de phase C équation (4) ainsi que pour la discrétisation du terme de convection de l'équation conservation de l'énergie (3).

3 Impact d'une goutte d'étain avec solidification

3.1 Paramètres de la simulation

Une goutte d'étain sphérique et fondue, de diamètre initial $D_0=2,7$ mm, atteint le substrat à la vitesse $V_0=1$ m.s⁻¹. Le substrat est maintenu à 25°C. Initialement l'air ambiant et la goutte sont à la température $T_0=240$ °C. Dans notre simulation, des conditions limites adiabatiques à vitesse nulle sont appliquées sur les limites latérales et supérieures du domaine de calcul. Dans la zone d'impact un maillage régulier est utilisé avec un pas d'espace de 105 µm représentant ainsi une résolution d'environ 26 mailles par diamètre initial de goutte, soit un ensemble de 685 000 points de calcul. Le pas de temps de la simulation est de 1 µs. Le substrat est représenté sur une épaisseur de 3 mailles par une méthode de pénalisation présentée par Khadra *et al.* [10].

Composantes	Conductivité thermique, λ (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)	Masse volumique, ρ (kg.m ⁻³)	Capacité calorifique, c_p (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	Viscosité dynamique, μ (Pa.s)	Tension superficielle, σ (N.m ⁻¹)
Substrat acier	14,9	7 900	477	-	-
Etain liquide	33,6	6 970	244	$1,92 \cdot 10^{-3}$	0,5
Etain solide	62,2	6 970	244	10^6	-
Air	0,0263	1,18	1006	$1,85 \cdot 10^{-5}$	-

Chaleur latente de fusion (étain) : $L_f=59,2 \times 10^3$ J.kg⁻¹ ; Température de fusion (étain) : $T_f = 232$ °C
 Angle de contact statique apparent $\theta_a=120$ ° [7].

TAB. 1 – Propriétés physiques des matériaux.

3.2 Degré d'étalement maximal

Le degré d'étalement maximal ξ_{\max} est un paramètre de validation pour notre simulation et s'exprime comme suit :

$$\xi_{\max} = \frac{D_{\max}}{D_0} \quad (12)$$

Où D_0 est le diamètre de la goutte avant impact et D_{\max} le diamètre maximal du contact entre la goutte et le substrat.

Expérimentalement, le degré maximal d'étalement obtenu par Pasandideh-Fard *et al.* [1] a pour valeur 2,10 (figure 3). Analytiquement, par un bilan d'énergie, Pasandideh-Fard *et al.* [10] expriment (équation 13) le degré d'étalement maximal ξ_{\max} en fonction des paramètres de la goutte avant l'impact en négligeant les effets compressibles.

$$\xi_{\max} = \sqrt{\frac{We + 12}{3(1 - \cos \theta_{a,\max}) + 4 \frac{We}{\sqrt{Re}} + We \sqrt{\frac{3 Ste}{4 Pe}}}} \quad (13)$$

Où We est le nombre de Weber, Re le nombre de Reynolds, Ste le nombre de Stefan et Pe le nombre de Peclet, $\theta_{a,\max}$ l'angle de contact apparent au moment où l'étalement est maximal. Les travaux expérimentaux de Pasandideh-Fard *et al.* [11] ont montré que l'angle de contact apparent au maximum d'étalement $\theta_{a,\max}$ vaut 140°.

Nombre de Reynolds	Nombre de Weber	Nombre de Stefan	Nombre de Peclet
$Re = \frac{\rho \cdot V_0 \cdot D_0}{\mu}$	$We = \frac{\rho \cdot V_0^2 \cdot D_0}{\sigma}$	$Ste = \frac{c_p \cdot \Delta T}{L_f}$	$Pe = \frac{\rho \cdot V_0 \cdot D_0 \cdot c_p}{\lambda}$
9 801,56	37,64	0,85	136,24

TAB. 2 – Paramètres de similitudes à l'instant initial.

Les paramètres de similitudes du problème sont calculés (tableau 2) à partir des propriétés physiques (tableau 1), de la vitesse et du diamètre de la goutte initiale. Cela aboutit à un degré d'étalement maximal de 2,3 soit un écart relatif d'environ 10% à la valeur expérimentale. Alavi *et al.* [11] réalisent par une simulation 2D/axisymétrique de la formulation incompressible des équations de Navier-Stokes ce même cas et obtiennent un degré maximal d'étalement de 1,9 (figure 3), soit un écart relatif d'environ 10% à la valeur expérimentale comme la démarche analytique.

3.3 Résultats

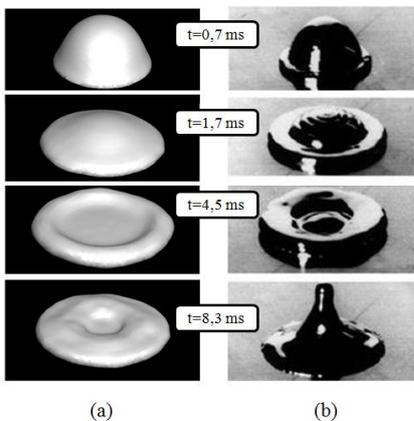


FIG. 1 – Comparaison entre la simulation (Thétis) et l'expérience [1]

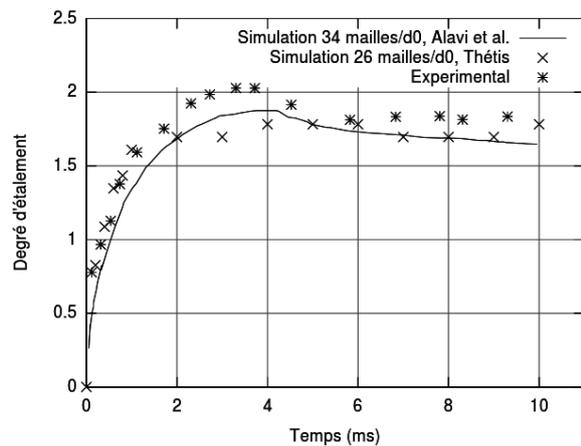


FIG. 2 - Évolution du degré d'étalement avec comparaison à l'expérience [1] et à la simulation [11]

L'impact est simulé durant 10 ms. Le temps $t=0$ ms correspond au début de l'étalement de la goutte sur le substrat. L'évolution temporelle de l'étalement est comparée aux résultats expérimentaux (figures 1 et 2). Une phase d'étalement est observée jusqu'au temps $t=2$ ms où le degré maximal d'étalement atteint est de 1,7. On remarque que la dynamique de l'étalement ainsi simulé coïncide avec les résultats expérimentaux. Expérimentalement, un degré maximal d'étalement de 2,05 est atteint puis il en suit une étape de rétraction avec une convergence vers un degré d'étalement asymptotique de 1,8. Les résultats de simulations ne présentent pas cet extremum, en effet, le degré d'étalement tend vers une asymptote de valeur 1,7. Le comportement asymptotique est correctement simulé. L'absence du phénomène de rétraction peut être expliquée par la nature du contact goutte/substrat qui est considéré parfait dans la simulation. La résistance thermique est estimée à $5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{W}^{-1}$ [1], elle est négligée dans notre simulation. Ainsi la solidification est plus rapide que dans l'expérience. Ceci est observée sur les figures 1 et 3 où nous constatons que la goutte étalée forme une lamelle qui est presque entièrement solidifiée au-delà de $t=8,3$ ms alors que la vue expérimentale au temps 8,3 ms (figure 1) présente une forme conique due à une dynamique de rétraction de la goutte liquide.

La puissance thermique P_{th} fournie par l'échange thermique entre la goutte et le substrat au travers de la surface S de contact goutte/substrat est exprimée dans l'équation (14).

$$P_{th} = \iint_S \lambda \frac{dT}{dy} dS \quad (14)$$

L'évolution de la puissance thermique est tracée sur la figure 3 et présente une croissance jusqu'à un maximum de 260W au temps $t=2$ ms, moment où l'étalement est maximal. Jusqu'à $t=5$ ms la puissance thermique échangée reste constante avec une surface d'échange qui reste identique. Des transferts thermiques à la fois convectifs (dû à l'étalement) et conductifs (dû au contact) se produisent entre la goutte et le substrat. On constate qu'entre les temps 2 ms et 5 ms l'étain liquide est en mouvement d'étalement sur une couche d'étain solidifié jusqu'à former un bourrelet périphérique. L'épaisseur de la lamelle au centre est de 0,4mm avec 0,2mm d'épaisseur solidifiée.

Au temps $t=5\text{ms}$, l'énergie cinétique de l'étalement est compensée par les effets capillaires et par la dissipation en solidification (équivalent à une dissipation visqueuse). Au-delà, les effets capillaires tendent à rétracter le reste d'étain liquide vers le centre de l'impact tout en dissipant l'énergie par la solidification, ainsi, naturellement la puissance thermique échangée entre la goutte et le substrat décroît vu que la quantité d'étain liquide diminue.

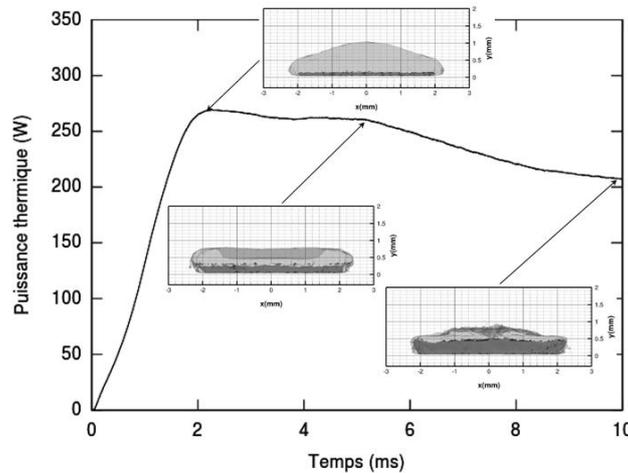


FIG. 3 - Évolution de la puissance thermique fournie par la goutte au substrat. La fraction solide est représentée en noir et en gris la fraction liquide.

4 Conclusion

Un modèle 1-fluide pour la représentation des écoulements multiphasiques, basé sur une approche domaines fictifs, couplé à une méthode numérique originale Eulérienne/Lagrangienne de traitement des termes d'advections des équations scalaires, a été mis en place pour la simulation de l'impact avec solidification d'une goutte d'étain sur un substrat lisse. Les résultats obtenus montrent que ce modèle et ces méthodes pourront être appliqués à l'impact successif de particules dans les conditions de la projection plasma. Les paramètres du gaz environnant ont été obtenus par une étude préliminaire en appliquant le code de calcul Thétis pour simuler l'impact d'un jet de plasma instationnaire sur un substrat mobile en utilisant les caractéristiques compressibles du même modèle 1-fluide.

References

- [1] M. Pasandideh-Fard, S. Chandra, J. Mostaghimi, A three-dimensional model of droplet impact and solidification, *Heat Mass Transfer*, 45, 2229–2242, 2002.
- [2] S. Vincent, T.N. Randrianarivelo, G. Pianet et J.-P. Caltagirone, Local penalty methods for flows interacting with moving solids at high Reynolds numbers, *Comput. Fluids*, 36, 902-913, 2007.
- [3] J.-P. Caltagirone, S. Vincent, C. Caruyer, A multiphase compressible model for the simulation of multiphase flows, *Comput. Fluids*, 50, 24-34, 2011.
- [4] J. U. Brackbill, D. B. Kothe et C. Zemach, A Continuum Method for Modeling Surface Tension. *Comput. Physics*, 100, 335-354, 1992.
- [5] G. Pianet, S Vincent, J. Leboi, J.-P. Caltagirone, and M. Anderhuber, Simulating compressible gas bubbles with a smooth volume tracking 1-fluid method. *Mult. Flow*, 36, 273-283, 2010.
- [6] J. Leboi, Dégivrage des pompes à chaleur sur l'air : influence de la mouillabilité des ailettes d'échangeurs extérieurs et contrôle des flux hydriques lors du givrage et du dégivrage, Thèse de doctorat, Université de Bordeaux 1, 2012.
- [7] M. Pasandideh-Fard, R. Bhola, S. Chandra et J. Mostaghimi, Deposition of tin droplets on a steel plate: simulations and experiments, *Heat Mass Transfer*, 41, 2929–2945, 1998.
- [8] C. Le Bot, E. Arquis, Coating of substrates by metal deposit: study of the rapid solidification during impact of droplets, *Eurotherm 82, Num. Heat Transfer*, 215-226, 2005.
- [9] S. Vincent, G. Balmigère, J.-P. Caltagirone, E. Meillot Eulerian–Lagrangian multiscale methods for solving scalar equations – Application to incompressible two-phase flows, *Comput. Phys.*, 229, 73-106, 2010.
- [10] K. Khadra, P. Angot, S. Parneix, J.P. Caltagirone, Fictitious domain approach for numerical modelling of Navier–Stokes equations, *Numer. Meth. Fluids*, 34, 651-684, 2000.
- [11] S. Alavi, M. Pasandideh-Fard, and J. Mostaghimi, Simulation of Semi-Molten Particle Impacts Including Heat Transfer and Phase Change. *J. Therm. Spray Techn.*, 21, 1278-1293, 2012.