

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE DE SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

par **Cédric LE BOT**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : Mécanique

**IMPACT ET SOLIDIFICATION DE GOUTTES METALLIQUES SUR UN
SUBSTRAT SOLIDE**

Soutenue le : 19 Décembre 2003

Après avis de :

MM. J-C. Batsale, Professeur, ENSAM, Bordeaux
J-P. Dumas, Professeur, LATEP, Pau

Rapporteur
Rapporteur

Devant la commission d'examen formée de :

MM. A. Vardelle, Professeur, SPCTS, Limoges
E. Arquis, Professeur, Université Bordeaux I
J-C. Batsale, Professeur, ENSAM, Bordeaux
J-P. Dumas, Professeur, LATEP, Pau
D. Delaunay, Directeur de Recherche CNRS, EPUN, Nantes
D. Gobin, Directeur de Recherche CNRS, FAST, Orsay

Présidente
Directeur
Rapporteur
Rapporteur
Directeur
Examineur

REMERCIEMENTS

Ce travail de recherche a été effectué au sein de deux laboratoires différents, mes deux points de chute, le laboratoire MASTER à l'ENSCP de Bordeaux et le laboratoire de thermocinétique à l'EPUN de Nantes.

Je remercie vivement Monsieur Eric Arquis pour m'avoir accueilli au MASTER et pour avoir encadré mes trois années de thèse. Ses conseils m'ont permis de ne pas me disperser et de recouvrir plusieurs domaines d'étude.

Je remercie également Monsieur Didier Delaunay pour m'avoir dirigé au laboratoire thermocinétique de Nantes. Nos discussions ont permis d'éviter que les questions multiples posées à froid ne restent figées.

Je tiens à remercier Messieurs Jean-Christophe Batsale, Professeur au LEPT de Bordeaux et Jean-Pierre Dumas Professeur au LaTeP de Pau qui m'ont fait l'honneur d'être rapporteurs de ce mémoire, et dont les remarques constructives ont beaucoup apporté à ce travail.

J'adresse mes sincères remerciements à Monsieur Dominique Gobin, directeur de recherches CNRS au FAST d'Orsay d'avoir accepté de juger ce travail, et à Madame Armelle Vardelle, Professeur au SPCTS de Limoges pour m'avoir fait l'honneur de présider mon jury de thèse.

Les interactions avec l'environnement sont déterminantes pour un épanouissement, un étalement sans rétraction, tant d'un point de vue scientifique que personnel. J'ai eu le plaisir pendant ces trois années d'être entouré de personnes remarquables qui y ont contribué. Je remercie vivement les permanents du laboratoire MASTER pour leur aide, Jean-Paul Caltagirone, Mejd Azaiez, Guy Defaye, Nicolas Régner, Serge Laugier, Stéphane Vincent avec qui j'ai eu beaucoup de plaisir à préparer les séminaires, David reungoat le "voisin" de bureau, Mohammed Rady dont j'ai beaucoup apprécié les conseils, Jean Toutain (concurrent de la FNAC) qui m'a beaucoup épaulé pendant ces trois années et avec qui j'ai passé de bonnes soirées, Stéphane Glockner qui a répondu à tant et tant de questions (parfois bien stupides, je le reconnais...), Bernard Duguay et Sandrine Cabos, qui percent les secrets du monde obscur de l'informatique, et Marie-Paule qui nous libère tous de la logistique. Malgré la difficulté d'arriver dans un milieu déjà formé, l'ambiance chaleureuse

m'a permis de me fondre rapidement parmi les thésards. J'ai ainsi une grande pensée pour les "anciens", Rémy, qui m'a encouragé dans mes débuts timides, Hugues et Jérôme, les locaux partis au loin (adeptes du tout ou rien...), Hadjira toujours pétillante et au verbe intarissable, Fred adepte du surf (bonne chance en Australie), Guiguite, roi des jeux de mots (je m'y suis d'ailleurs tenté dans ces pages afin de suivre tes traces...) et source de connaissances (spirituelles et spiritueuses). Leur accueil des nouveaux éléments mérite le terme de contact parfait (sans résistance)!

Les contacts ont été également simultanés par l'arrivée de nouveaux thésards en même temps que moi, avec qui j'ai passé tant de bons moments: Cendrille, experte de Lascaux (une maille à l'endroit, une maille à l'envers...) Boris, le marathon man, Damien le surfeur en milieu peu profond, Claude (bibille-cuve) le collègue de bureau, qui m'a supporté (dans les deux sens, tantôt l'un, tantôt l'autre...) et Pierre (on the wave), mon négatif en termes d'heures de sommeil nécessaires ($4 + 20 = 24h$).

Puis les années suivantes, de nouveaux thésards nous ont rejoint, Greg, toujours très calme et à l'humour percutant et Delphine, avec qui la pause du soir était un rituel qui me manquera beaucoup, Nirina, toujours souriant, même à 8h du matin, Aurélie (surtout ne perds pas courage), Stéphanie adepte de la salsa, Christophe Monsieur multi-bloc, Nico qui joue au Petit Chimiste, et les "p'tits nouveaux", Sylvain, Eric et Cyril que j'espère connaître davantage cette année. Je n'oublie pas Luigi et ses fabuleuses pâtes italiennes (Reviens vite faire un stage à Bordeaux!!!) et Bassel et sa bonne humeur.

L'accueil que l'on m'a réservé au laboratoire Thermocinétique de Nantes a également été très chaleureux. Je remercie vivement Cathy Castelain et Yvon Jarny avec qui j'ai eu beaucoup de plaisir à discuter lors de mes venues ou lors de congrès. J'ai eu également la chance de cotoyer les thésards du laboratoire, Jérôme, Anthony, les 3 Vincent, Yacine, Mustapha et Géraldine. A chacune de mes venues, j'ai toujours eu autant de joie de vous revoir.

Venir à Nantes était l'occasion d'utiliser plusieurs dispositifs expérimentaux. Jamais je n'aurais pu y arriver seul. Je remercie vivement les techniciens du laboratoire, Christophe, Gwen, Nicolas et Nicole d'avoir pris le temps et la patience de m'expliquer et de m'aider le fonctionnement des appareils. Votre expérience m'a beaucoup enrichi. Enfin, j'adresse un grand merci à Philippe Grandet pour toute son aide.

J'adresse un clin d'oeil à mes amis qui m'ont permis de garder les pieds sur terre: Marie-Noelle, Anne, Jean-Yves, Céline, Yoyo, Coco, Lolo, Angélique, Pierre, Rachel (désolé de ne pas tous vous citer, mais je pense à vous de tout coeur...). Enfin, j'ai une pensée parti-

culière pour Marie, Eric et P'tit Louis. Eric, j'ai été fier de soutenir ma thèse en ta présence.

Pendant ces trois ans, il m'a fallu avant tout une base solide sur laquelle je pouvais m'appuyer en toute circonstance. Ce substrat, je l'ai trouvé en ma famille, mes parents et mon frère Philippe, ainsi que Brigitte, qui m'ont soutenu et écouté. Mon cher Philippe, je ne peux qu'accepter mon titre de "râleur de l'année" !!!

A vous tous, je dédie ce mémoire, vous y avez tous contribué.

Ab imo pectore

Sommaire

| | |
|--|-----------|
| Nomenclature | 1 |
| Introduction | 5 |
| 1 Etat de l'art | 9 |
| 1.1 Hydrodynamique de l'impact de gouttes | 9 |
| 1.1.1 Paramètres du système | 9 |
| 1.1.2 Les différents types d'impact selon la nature du substrat | 14 |
| 1.1.3 Nombres adimensionnels | 17 |
| 1.1.4 Le degré d'étalement maximal d'une goutte | 18 |
| 1.2 Echanges thermiques lors de l'impact | 22 |
| 1.2.1 Influence des transferts thermiques | 22 |
| 1.2.2 Résistance thermique de contact | 23 |
| 1.2.3 La résistance par constriction | 25 |
| 1.2.4 La résistance thermique de contact lors de l'impact d'une goutte . . | 29 |
| 1.3 La solidification | 31 |
| 1.3.1 Notions sur la solidification | 31 |
| 1.3.2 La solidification d'une goutte de métal | 36 |
| 2 Résolution numérique | 41 |
| 2.1 Les équations du problème : méthodes numériques | 41 |
| 2.1.1 Modèle à un fluide | 42 |
| 2.1.2 Modélisation de la tension de surface | 43 |
| 2.1.3 Modélisation du substrat | 45 |
| 2.1.4 Méthodes numériques de résolution | 46 |
| 2.1.5 Méthodes numériques de l'équation d'advection | 50 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 2.1.6 | Equation de l'énergie | 53 |
| 2.1.7 | Description de la méthode | 54 |
| 2.2 | Cas de validation | 56 |
| 2.2.1 | Validation de l'impact d'une goutte | 56 |
| 2.2.2 | Problème de Neumann | 60 |
| 2.2.3 | Fusion d'un domaine solide dans un bain liquide | 62 |
| 2.3 | Conclusion du chapitre | 66 |
| 3 | Résultats numériques | 67 |
| 3.1 | Impact simultané de gouttes identiques | 67 |
| 3.1.1 | Influence du nombre de Reynolds sur l'impact simultané de gouttes | 70 |
| 3.1.2 | Influence du nombre de Weber sur l'impact simultané de gouttes . . | 73 |
| 3.1.3 | Influence de la distance entre gouttes sur l'impact simultané de gouttes | 75 |
| 3.1.4 | Influence du nombre de Stefan | 76 |
| 3.2 | Impacts consécutifs de gouttes identiques | 83 |
| 3.2.1 | Impacts consécutifs de couches sans dynamique | 83 |
| 3.2.2 | Résultats de l'impact | 85 |
| 3.2.3 | Prise en compte des phénomènes hydrodynamiques | 100 |
| 3.3 | Conclusion du chapitre | 107 |
| 4 | Analyse expérimentale | 111 |
| 4.1 | Contact brusque de deux milieux | 112 |
| 4.1.1 | Dispositif expérimental | 112 |
| 4.1.2 | Méthodes inverses | 116 |
| 4.1.3 | Résultats de la méthode de Beck | 120 |
| 4.1.4 | Résultats du contact brusque | 128 |
| 4.2 | Cinétique de changement de phase: principe de la calorimétrie | 134 |
| 4.2.1 | Réglages de la DSC | 135 |
| 4.2.2 | Expériences sur un échantillon d'indium | 135 |
| 4.2.3 | Modélisation de la cristallisation | 137 |
| 4.2.4 | Résultats numériques | 145 |
| 4.3 | Conclusion du chapitre | 147 |
| | Conclusion | 149 |

| | |
|---|------------|
| Annexes | 153 |
| A Expression analytique du contact brusque de deux milieux semi-infinis en contact imparfait | 153 |
| Annexes | 153 |
| B Algorithme de surfusion selon le modèle micro-macroscopique | 157 |
| Bibliographie | 159 |

Nomenclature

Lettres Latines

| | | |
|-------|--|--|
| a | : diffusivité thermique | $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ |
| C_P | : capacité calorifique massique à pression constante | $\text{m}^2.\text{s}^{-2}.\text{K}^{-1}$ |
| D | : diamètre de goutte | m |
| D_g | : distance entre deux gouttes voisines | m |
| D_i | : diamètre initial de goutte | m |
| E_c | : énergie cinétique | N.m |
| E_p | : énergie potentielle | N.m |
| F_o | : Nombre de Fourier thermique | <i>adim.</i> |
| f_s | : fraction solide | <i>adim.</i> |
| g | : accélération de la pesanteur | m.s^{-2} |
| h | : hauteur de goutte | m |
| H | : enthalpie | J |
| K | : nombre de Sommerfeld | <i>adim.</i> |
| m | : masse | kg |
| Oh | : nombre d'Ohnesorge | <i>adim.</i> |
| P_e | : nombre de Peclet | <i>adim.</i> |
| P_r | : nombre de Prandtl | <i>adim.</i> |

| | | |
|------------|---|----------------|
| r | : rayon de goutte | m |
| R_a | : nombre de Rayleigh | <i>adim.</i> |
| R_e | : nombre de Reynolds | <i>adim.</i> |
| R_{TC} | : résistance thermique de contact | $K.m^2.W^{-1}$ |
| S_c | : terme source ou puits de changement de phase | $W.m^{-3}$ |
| Ste | : nombre de Stefan | <i>adim.</i> |
| T | : température | K |
| T_{cons} | : température de consigne de DSC | K |
| t | : temps | s |
| u_i | : composante de la vitesse instantanée suivant i | $m.s^{-1}$ |
| V | : volume | m^3 |
| V_i | : vitesse d'impact | $m.s^{-1}$ |
| v_{ref} | : vitesse de refroidissement en DSC | $K.min^{-1}$ |
| W_e | : Nombre de Weber | <i>adim.</i> |
| x_i | : coordonnée cartésienne suivant la direction i x,y,z | m |
| z | : altitude | m |

Lettres grecques

| | | |
|-----------|--|----------------------|
| α | : fraction cristalline | <i>adim.</i> |
| β | : coefficient de compressibilité | K^{-1} |
| θ | : angle de contact | $^\circ$ |
| κ | : courbure | m^{-1} |
| λ | : conductivité thermique | $kg.m.s^{-3}.K^{-1}$ |

| | | |
|-------------|--|----------------------------------|
| μ | : viscosité dynamique | $\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ |
| ν | : viscosité cinématique $\nu = \mu/\rho$ | $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ |
| ξ | : solution d'équation transcendante | <i>adim.</i> |
| ξ_{max} | : degré d'étalement maximal | <i>adim.</i> |
| ρ | : masse volumique | kg.m^{-3} |
| σ | : coefficient de tension interfaciale | N.m^{-1} |
| τ | : échelle de temps caractéristique | s |

Indices et exposants

| | |
|------------|--|
| <i>air</i> | : relatif à l'air |
| <i>g</i> | : relatif à la goutte |
| <i>i</i> | : valeur initiale |
| <i>min</i> | : valeur minimum |
| <i>max</i> | : valeur maximum |
| <i>num</i> | : valeur obtenue par voie numérique |
| <i>ren</i> | : relatif à la position de rencontre de deux gouttes |
| <i>sub</i> | : relatif au substrat |
| <i>th</i> | : valeur obtenue par voie théorique |

Introduction générale

L'impact de gouttes sur une surface solide ou liquide avec changement de phase est un problème que l'on rencontre dans un grand nombre d'applications, et suscite un intérêt grandissant dans la recherche en mécanique des fluides. L'écoulement multiphasique de ces particules fluides dans un fluide ambiant et les changements d'état liquide-solide-gaz sont complexes et varient en fonction des conditions d'impact. Selon la nature du problème, l'étude de ces phénomènes permet de souligner les avantages qu'implique l'impact des particules (peinture métallisée des automobiles par exemple) ou les inconvénients que cela génère (impact et solidification de gouttes d'eau sur les ailes d'avion qui alourdissent la structure).

Parmi tous les phénomènes qui font intervenir l'impact de gouttes sur une surface, la fabrication de revêtements par pulvérisation ou par plasma sont des procédés industriels très utilisés. Ce type de procédé se retrouve d'ailleurs dans de nombreux domaines, comme par exemple des imprimantes à jet d'encre, des produits d'entretien courants, ou encore des peintures de voitures. Toutes ces utilisations ont pour objectif commun de recouvrir une surface par un matériau avec un minimum de matière et une faible épaisseur régulière, afin d'en assurer l'isolation, de meilleures propriétés ou simplement l'esthétique du produit final. Les films fins qui sont créés par pulvérisation sont de nature et fonctions diverses et variées et font l'objet d'attention particulière sur des caractéristiques communes: la porosité du revêtement, l'adhérence à la paroi, le relief du film (film lisse ou rugueux), et l'homogénéité du matériau. Cela nécessite une reproductibilité fiable du recouvrement de matière sur la surface concernée, en optimisant au mieux les paramètres du processus de fabrication.

La réalisation de revêtements par pulvérisation de fines gouttelettes sur la surface à recouvrir est sujet à de plus en plus de recherches. Afin de comprendre la morphologie

du revêtement, il est intéressant d'examiner les phénomènes dynamiques et thermiques à l'échelle des gouttes qui vont créer la fine couche. Ces particules initialement liquides s'écrasent sur le substrat, s'étalent ou éclatent, se refroidissent à son contact et se solidifient au cours d'une durée plus ou moins longue en fonction de la fréquence et des conditions d'impact. La physique qui s'articule autour du comportement d'écrasement d'une goutte reste encore de nos jours mal maîtrisée, même si beaucoup d'études, expérimentales et numériques, ont permis d'améliorer la compréhension de l'écoulement de la particule liquide. Les interactions entre plusieurs gouttes, s'écrasant simultanément sur la paroi l'une à côté de l'autre ou bien l'une après l'autre mais au même point d'impact posent quant à elles encore beaucoup de questions, puisqu'elles vont modifier la morphologie par rapport à l'impact d'une goutte isolée. Ainsi, après l'impact de plusieurs couches successives, les gouttes s'écrasent non plus sur un substrat sec, mais sur un film totalement ou partiellement liquide. L'écoulement en est fortement modifié.

La reproductibilité expérimentale des phénomènes est difficile à mettre en oeuvre: Le contrôle du nombre de particules, de leur dimension et de leur vitesse est difficile à maîtriser, en particulier lorsque l'impact concerne plusieurs particules à la fois. De plus, dans ce dernier cas, l'examen de plusieurs gouttes supposerait un matériel très important, sans pour autant faciliter le suivi de chacune des gouttes. C'est alors une information statistique qui découle de ce type d'étude. La prédiction de la structure du revêtement et de sa durée de vie est donc difficile à déduire de considérations expérimentales. C'est pourquoi l'outil numérique devient rapidement indispensable pour élargir l'horizon d'études sur ce domaine. La simulation numérique se doit alors de respecter les phénomènes entrant en jeu lors de l'impact d'une ou plusieurs gouttes, en s'assurant que les hypothèses de configuration initiale (taille, géométrie des gouttes par exemple) restent valides et soient comparables à des techniques expérimentales.

L'objectif de la présente étude consiste donc à examiner à l'échelle des particules fluides les phénomènes dynamiques et thermiques qui interviennent lors de l'impact de gouttes sur un substrat, et d'étudier l'influence des conditions de process sur la formation du film fin final. Ce travail, pour sa partie numérique, est réalisé au laboratoire de Modélisation Avancée des Systèmes Thermiques et Ecoulements Réels de l'ENSCP, Bordeaux I (à l'aide du code de calcul AQUILON). En parallèle, des essais expérimentaux sont effectués au Laboratoire Thermocinétique de l'Ecole Polytechnique de l'Université de Nantes afin

de confronter les résultats numériques à des résultats expérimentaux.

La première partie de ce travail est donc de se familiariser avec le code: l'objectif est de décrire les méthodes de résolution numérique des équations en jeu et de valider l'écoulement que l'on obtient en comparant l'hydrodynamique d'une goutte isolée avec des résultats obtenus par diverses sources. Les résultats, en terme de nombres adimensionnels et de morphologie de la matière à la fin de l'impact, permettent de s'assurer de la validité des méthodes numériques employées, sous différentes configurations (axisymétrie, domaine 3D...).

En deuxième partie, le code numérique est employé afin de simuler l'impact de plusieurs gouttes dans deux configurations distinctes. La première consiste en l'impact simultané de gouttes identiques sur le substrat afin d'observer les phénomènes dynamiques et thermiques lors de la rencontre de particules voisines en fonction des paramètres initiaux (vitesse, température...) et d'étudier l'influence du changement de phase sur la morphologie du film fin créé. Dans la deuxième configuration, d'autres gouttes sont ajoutées et s'écrasent sur les précédentes à fréquence constante. Il s'agit donc de l'étude de trains de gouttes identiques dont les points d'impact sont équidistants les uns des autres. De la même manière que précédemment, l'étude porte sur l'influence des paramètres initiaux et du changement de phase sur la structure du film fin réalisé.

En dernière partie, des études expérimentales sur le comportement thermique des matériaux sont effectuées au laboratoire Thermocinétique de l'École Polytechnique de l'Université de Nantes afin de compléter les résultats numériques obtenus. Certains comportements, comme la cinétique de solidification ou bien la qualité du contact thermique entre le substrat et les gouttes restent encore difficiles à modéliser numériquement. L'étude de ces phénomènes permettra donc de confirmer ou infirmer les hypothèses utilisées lors des simulations numériques et de proposer dans ce dernier cas différentes solutions pour améliorer la modélisation.

Chapitre 1

Etat de l'art

Les phénomènes qui gouvernent l'impact de gouttes, les échanges thermiques entre la particule fluide chaude et le substrat froid, et la solidification sont complexes et interviennent dans la même échelle de temps. Chacun de ces aspects sera présenté séparément afin de mieux distinguer leur influence sur l'impact et l'étalement des gouttes.

1.1 Hydrodynamique de l'impact de gouttes

Dans cette partie, nous nous intéressons aux phénomènes liés à l'écoulement de la goutte. Les caractéristiques des matériaux en présence (goutte, fluide ambiant et substrat) et les conditions d'impact influencent l'écoulement et la géométrie finale de la goutte. La compétition des énergies mises en jeu traduit la dynamique de la goutte. Après avoir décrit les principaux paramètres de l'impact d'une goutte, nous déterminerons quelles sont les énergies associées à ces paramètres, afin d'examiner leur rôle et leur influence sur la dynamique.

1.1.1 Paramètres du système

La morphologie de la goutte varie au cours du temps, et dépend de nombreux paramètres physiques, qu'il s'agisse de conditions opératoires (vitesse initiale, diamètre des particules, ...) ou de caractéristiques des matériaux. Il est donc nécessaire d'examiner comment les paramètres influencent l'écoulement. Les premiers travaux sur l'impact de gouttes sur film liquide fin ont été réalisés en 1876 [Worthington 76] à partir de gouttes de lait. Ils montrent en étudiant la morphologie que peut avoir cette goutte qui s'écrase sur

une surface horizontale en fonction des paramètres initiaux de vitesse et de diamètre de goutte que les phénomènes qui gouvernent l'écoulement d'une goutte ne sont pas triviaux. En effet, en fonction des conditions initiales, la particule fluide peut exhiber des formes simples circulaires ou complexes (étoiles) avec ou sans gouttes secondaires. [Madejski 76] a étudié expérimentalement et analytiquement l'impact de gouttes d'alumine, et leur solidification. La théorie qu'il a développée repose sur la conservation des énergies cinétique, potentielle et forces visqueuses durant tout le processus pour un modèle d'écoulement radial bidimensionnel. L'hypothèse la plus forte de l'auteur est de considérer que les échanges thermiques et la solidification, qui est supposée être un problème de Stefan, n'ont lieu qu'une fois l'étalement achevé. L'expérimentation permet de confronter les résultats théoriques obtenus. Elle n'est réalisée que pour des vitesses importantes et des liquides de faible tension de surface. En fonction de la nature du substrat (film liquide ou substrat sec) et de la vigueur de l'impact, une goutte peut adopter des comportements totalement différents, que nous allons à présent décrire.

Vitesse de l'écoulement

Dans la plupart des cas réels, la vitesse de projection de la goutte sur la surface (liquide ou solide) est très élevée. C'est le cas par exemple de la pulvérisation par spray, ou même de l'écrasement des gouttes d'eau sur les ailes d'un avion avec une vitesse d'impact de l'ordre de $300m/s$. L'intervalle de temps entre l'impact et la fin de l'étalement est donc très court. L'écoulement est lié à un champ de vitesses qui évolue de façon importante au cours du temps. Avant l'impact, nous nous plaçons dans le cas où la vitesse d'impact est normale au substrat et répartie de manière homogène dans la goutte. Lors de l'impact, cette vitesse change subitement de direction. Son intensité agit donc directement sur la nature de l'écoulement de la goutte. Cela se traduit initialement en terme d'énergie cinétique d'impact: $E_{ci} = \frac{1}{2}m_g V_i^2$. Tout au long de l'écoulement, jusqu'à stabilisation du système, cette énergie évolue par conversion en d'autres types d'énergies jusqu'à dissipation totale de l'énergie cinétique afin d'atteindre l'état stable.

Tension superficielle

Avant l'impact, le fluide reste sous l'état de goutte unique, sans se disperser dans le fluide ambiant pourvu que sa taille soit compatible. Ce phénomène reste effectif dans le cas d'une gravité nulle, où le fluide, sous l'effet d'aucune force extérieure, tend à garder

une forme sphérique parfaite. Ce phénomène s'explique par la tension superficielle.

Il s'agit d'une énergie libre de surface d'un liquide, qui s'oppose aux modifications de surface. Elle participe à l'équilibre des forces de pression agissant sur le liquide, provenant des interactions moléculaires, et du milieu extérieur. Au sein du même milieu, une molécule est attirée de la même manière par chacune de ses voisines. Par contre, à l'interface de deux milieux immiscibles, elle est beaucoup plus attirée par les molécules qui constituent l'un des deux milieux. L'énergie de liaison est donc différente à l'intérieur du milieu et à l'interface. Cette énergie surfacique, qui doit être dépensée pour que le système reste à l'équilibre tend à minimiser l'interface des deux milieux. Cette énergie étant proportionnelle à l'aire de l'interface, elle s'exprime via le coefficient de tension superficielle γ , en J/m^2 ou N/m .

Le modèle physique de la tension superficielle a été étudié par [Brackbill 92] et [Wei 98] à l'aide d'une bulle d'oxygène ou d'éthanol.

Dans ce modèle, on considère une goutte sphérique de rayon R . A l'équilibre, il s'exerce des pressions de part et d'autre de la surface de la goutte. Selon la loi de Laplace, (pour une goutte sphérique)

$$\Delta p = p_2 - p_1 = \frac{2\gamma}{R} \quad (1.1)$$

où p_2 est la pression du fluide externe,

p_1 est la pression de la goutte,

R est le rayon de la goutte,

γ est la tension superficielle

Cette tension superficielle est la contrainte extérieure assimilable à une pression qui s'applique sur l'interface ou la surface de séparation de deux fluides. Elle caractérise donc l'interface entre deux fluides donnés.

Dans le cas quelconque,

$$\Delta p = p_2 - p_1 = \sigma(K_1 + K_2) = \sigma\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right) \quad (1.2)$$

où R_1 et R_2 sont les rayons de courbure principaux de l'interface, et K_1 et K_2 les courbures associées. Pour $R_1 = R_2 = +\infty$, les surfaces sont planes et on obtient les mêmes pressions de part et d'autre de l'interface.

Tension interfaciale

Il s'agit ici d'un cas plus précis de tension superficielle: c'est l'énergie d'interface entre deux phases fluides non miscibles en contact, ou bien une phase fluide et une phase solide. Le coefficient de tension interfaciale sera noté σ_{SL}

Tension de surface

Cette énergie de surface est un cas particulier de tension interfaciale entre deux fluides non miscibles, dans le cas où le fluide ambiant est de l'air. Elle fait donc référence au cas d'une condition de surface libre. Le coefficient de tension de surface est noté σ .

Lorsqu'une goutte est en contact avec un substrat, elle se déforme et perd son aspect sphérique, en s'étalant plus ou moins largement sur le substrat. L'énergie de surface n'est plus répartie de façon homogène. Mais la tension de surface entre en compétition avec la tension interfaciale entre le substrat et la goutte, et la tension interfaciale entre le substrat et l'air ambiant. Cette compétition est à l'origine du phénomène de mouillage, c'est-à-dire la faculté que possède la goutte à recouvrir le substrat: les tensions superficielles goutte-substrat et air-substrat minimisent chacune la surface de contact entre les milieux mis en jeu. La façon dont la goutte s'étale dépend donc de la nature du substrat. Lorsque le liquide est mouillant, l'étalement de la goutte est important. Pour caractériser ce phénomène, on définit un angle de contact θ au niveau de la ligne triple statique, c'est-à-dire l'interface des deux fluides et du substrat, par la loi d'Young.

$$\cos\theta = \frac{\sigma_{SG} - \sigma_{LS}}{\sigma} \quad (1.3)$$

avec σ_{SG} et σ_{LS} les tensions interfaciales du solide respectivement avec l'air et le liquide. σ est la tension superficielle de la goutte.

L'angle de contact est donc fonction des énergies de surface de chaque milieu.

Liquide mouillant :

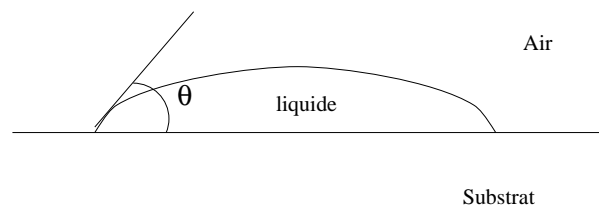


Figure 1.1 : *Liquide mouillant*

Liquide non mouillant :

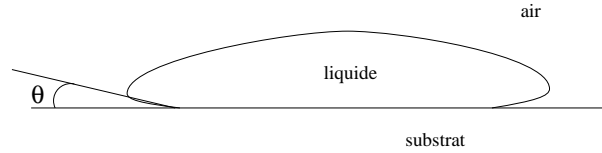


Figure 1.2 : *Liquide non mouillant*

A l'équilibre, l'angle de contact statique θ peut prendre des valeurs comprises entre 0° et 180° selon la nature de la goutte, du milieu ambiant et du substrat. Dans les cas extrêmes et peu réalistes, à $\theta = 0^\circ$, la goutte s'étale infiniment, ce qui correspond à la formation d'un film de fluide. Dans le cas $\theta = 180^\circ$, la goutte est en contact avec le substrat en un seul point. La goutte est donc sphérique et ne mouille pas du tout le substrat. Dans le cas réel, ce concept d'angle de contact se retrouve en dynamique et se situe entre ces deux cas extrêmes. Des expériences ont été réalisées avec un tube de verre plongé dans un bain de silicone afin de décrire la ligne de contact dynamique entre le substrat et le fluide [Dussan 91]. D'autres expériences soulignent la forte non linéarité de l'angle de contact [Haley 91] et consistent à relever l'angle de contact en fonction du temps lors de l'impact de gouttes de fluide visqueux sur un substrat sec, et conduisent à des relations de la forme :

$$\frac{dR}{dt} = \kappa(\theta - \theta_s)^n \quad (1.4)$$

où R est le rayon de contact de la goutte avec le substrat, κ est une constante et θ_s l'angle de contact statique, et où la valeur de l'exposant n varie en fonction du modèle utilisé pour décrire l'angle de contact. Dans la plupart des modèles numériques, la valeur de l'angle de contact provient directement de valeurs expérimentales.

Rugosité

La rugosité exprime l'état de surface du substrat, et correspond à la hauteur moyenne des pics et des creux existant superficiellement. Elle est caractérisée par le nombre Ra (en μm) qui correspond à la hauteur moyenne du relief de la surface. Pour une surface lisse (sans défaut) $Ra=0$, ce qui correspond à un cas idéal. Expérimentalement, on considère qu'une surface est lisse par rapport à l'impact d'une goutte de métal pour $Ra \leq 0.05\mu m$. [Escure 00] notent expérimentalement que la rugosité du substrat a une influence notable sur le comportement d'étalement ou d'éclaboussure de la particule fluide. Lorsque

la goutte atteint le substrat, la matière remplit en partie les creux du substrat, et sous l'effet d'une vitesse d'impact importante, elle est éjectée dans d'autres directions liées au relief de la surface. Expérimentalement, il est difficile de reproduire exactement le même impact. En effet, la rugosité ne traduit qu'une hauteur moyenne alors que le relief de la surface est hétérogène. En fonction de la position de l'impact et de l'état de surface local, la goutte est éjectée selon des directions différentes. Par conséquent, l'impact, bien que toujours gouverné par les mêmes phénomènes, ne reproduit pas exactement la même évolution en fonction de la zone d'impact. En se référant à une rugosité et donc à un état de surface moyen homogène, on définit une évolution moyenne de l'impact.

1.1.2 Les différents types d'impact selon la nature du substrat

Impact sur film liquide profond

On parle de film liquide profond lorsque la couche liquide a une épaisseur de plus de 50 diamètres de goutte. Deux phénomènes peuvent se produire selon l'intensité de l'impact. Soit un vortex apparaît si les forces d'inerties et de tension superficielle sont comparables ($We < 8$), soit un jet se forme lorsque les forces d'inertie dominent ($We > 8$) en créant un cratère dans le film liquide après l'impact de la particule fluide. [Brutin 03] ont observé expérimentalement ce comportement et montrent que les seules considérations des nombres de Weber et de longueur capillaire suffisent à décrire la profondeur du cratère sans prise en compte de la viscosité des fluides.

Impact sur film liquide fin

Ce type d'impact est considéré à partir du moment où le film liquide a une épaisseur inférieure à 10 diamètres de goutte. Des études expérimentales et numériques [Josserand 01] ont montré que là encore, les conditions d'impact influencent le comportement de la goutte. Ainsi, lorsque les forces d'inertie sont prépondérantes lors de la dynamique, il se forme un jet pendant les tous premiers instants, puis celui-ci devient une corolle dont l'extrémité est un bourrelet périphérique. Ce type de comportement est appelé **corolla splash**. Dans la nature, cette corolle est très souvent destabilisée pour créer des digitations et des gouttes secondaires. Ce phénomène serait dû à une instabilité de la courbure géométrique au niveau du bourrelet périphérique, et porte le nom d'instabilité de Plateau-Rayleigh [Gueyffier 98a]. Des études expérimentales [Allen 88] ont montré que la profondeur du

film influence l'angle d'éjection de la corolle puisqu'un film fin a tendance à diminuer l'angle d'éjection (cf figure 1.3) Le jet qui se forme aux temps très courts est souvent à l'origine de la formation de gouttelettes provenant du lieu de l'impact. Ce type d'éclaboussure est appelé **prompt splash** [Josserand 01]. Dans leurs travaux, [Yarin 95] ont traduit, par des expériences sur un film liquide, la formation de la corolle comme singularité cinématique c'est à dire une discontinuité du champ de vitesse et la distribution de l'épaisseur de film.

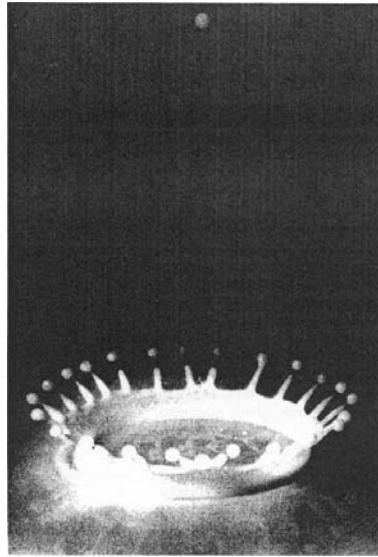


Figure 1.3 : *Impact sur film liquide fin [Allen 88]*

Impact sur substrat sec

Il s'agit du type d'impact que nous allons considérer dans notre travail où la goutte s'écrase sur une surface solide et indéformable. Outre les caractéristiques physiques de la goutte et des conditions dynamiques (vitesse et diamètre de la particule fluide), la rugosité du substrat, qui n'avait pas de sens dans les cas précédents est un paramètre qui peut influencer le comportement de la goutte. Encore une fois, la goutte adopte différents comportements qui dépendent des conditions d'impact.

– L'éclaboussure

Lorsque les effets inertiels sont prépondérants devant les effets de tension superficielle, ce qui peut se manifester par une faible viscosité, ou encore une forte vitesse d'impact, le

fluide se déstabilise et se fragmente. Une partie de la matière reste au point d'impact et des digitations apparaissent à la périphérie de la goutte initiale. Ce phénomène nommé **splash** a été étudié par de nombreux auteurs afin d'estimer quels paramètres sont à l'origine des instabilités qui génèrent les digitations et les gouttes secondaires. Ainsi, des études expérimentales ont montré que la rugosité du substrat influence l'apparition du splash [Leger 96] puisque le relief du substrat redirige le fluide après impact dans une direction désordonnée. L'énergie de surface est également un paramètre influent, car l'ajout de surfactants afin d'augmenter la tension superficielle de la goutte diminue les risques de splash. La température du substrat peut également influencer ce comportement [Sobolev 98], puisque la viscosité et la tension superficielle du fluide diminuent lorsque la température augmente, ce qui accentue les instabilités lors de l'impact

– La déposition

Dans ce type d'impact, les effets inertiels et de tension de surface sont de même ordre de grandeur. Pour une faible taille de particule de métal liquide (de l'ordre du millimètre), cela revient à une vitesse modérée (de l'ordre de $1m/s$) pour une tension de surface de l'ordre de $0,5N.m$. [Zhao 96a] ont étudié expérimentalement l'impact de gouttes d'eau ou d'encre dans cette gamme de vitesses et tailles de particules et observent bien une déposition. La goutte s'écrase contre la surface et s'étale largement la plupart du temps sous forme d'un disque (**splat**) sous l'influence de l'énergie des forces d'inertie. Puis l'énergie de surface devient prépondérante et l'étalement fait place à la rétraction de la goutte jusqu'à la position d'équilibre. On observe ce comportement par exemple sur les pare-brises de voiture où les gouttes de pluie s'étalent de plusieurs rayons puis se rétractent, sur un temps très court. Beaucoup d'études ont porté sur ce genre d'impact afin de déterminer les conditions seuil où la déposition fait place au phénomène de splash, en fonction de la température de substrat [Fukumoto 99], [Sampath 99] ou encore de la rugosité du substrat [Bianchi 95]. En examinant l'impact de gouttes d'eau sur une surface sèche et plus précisément le nombre de digitations qui apparaissent à la périphérie du splat, [Thoroddsen 98] ont supposé que ces instabilités sont de type Rayleigh-Taylor. Ce type de comportement est également observé sur des gouttes métalliques de volume de l'ordre du picolitre que l'on dépose sur des composants électroniques. En fonction de la température, du métal et du composant, il est possible de déterminer la zone de contact entre la goutte et le réseau électrique et éviter ainsi les court-circuits [Waldvogel 96]

- Le rebond

Lors de ce type d'impact, les effets de tension superficielle sont prépondérants dans la dynamique. La goutte commence à s'étaler, puis se rétracte avec une telle intensité qu'elle décolle. Ce phénomène peut se rencontrer dans la nature comme par exemple les gouttes d'eau tombant sur une feuille ou sur des matériaux hydrophobes. Des études ont été réalisées sur la composition de la goutte d'eau [Bonn 02] afin de diminuer ce caractère et améliorer les conditions d'étalement sur les plantes dans le but d'améliorer la pulvérisation de pesticides sur les plants. En ajoutant une faible quantité de polymère, la viscosité et la tension superficielle de la goutte sont modifiées et se rapprochent davantage du comportement de déposition.

1.1.3 Nombres adimensionnels

Lorsque la goutte s'écrase sur le substrat, de nombreux paramètres physiques jouent un rôle dans le comportement de la particule fluide. Afin de quantifier leur influence, des nombres adimensionnels sont introduits sous la forme d'un rapport qui permet de rendre compte de la compétition entre plusieurs phénomènes. Ainsi, en accord avec le théorème de Buckingham, selon lequel le nombre de paramètres indépendants peut être réduit par le nombre de dimensions fondamentales, on peut prévoir la gamme de comportements possibles de la goutte et les paramètres majeurs qui en sont responsables. Nous allons donc détailler ici ces nombres adimensionnels et les rapports qu'ils représentent :

$$\text{Nombre de Reynolds : } Re = \frac{\rho L u_0}{\mu}$$

Avec ρ : masse volumique,

L : échelle de longueur caractéristique,

u_0 : vitesse caractéristique,

μ : viscosité.

Re compare le flux de quantité de mouvement par convection avec le flux de diffusion visqueuse. Il permet de décrire le type de régime d'écoulement de la goutte, laminaire, inertiel voire turbulent.

$$\text{Nombre de Froude : } Fr = \frac{u_0}{\sqrt{g h_s}}$$

Avec g : force de gravité,

h_s : côte de la surface libre.

Fr est le rapport de la vitesse caractéristique sur la vitesse de la propagation des ondes de la gravité à la surface d'un fluide.

$$\text{Nombre de Weber : } We = \frac{\rho L u_0^2}{\sigma}$$

Avec σ : tension superficielle.

We compare les forces d'inertie et les forces de tension superficielle. En fonction de sa valeur, la goutte aura plus ou moins tendance à se séparer en plusieurs gouttes secondaires.

$$\text{Nombre d'Ohnesorge : } Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho \sigma L}} = \frac{We^{\frac{1}{2}}}{Re}$$

Oh rend compte de la dissipation visqueuse par rapport aux forces de tension superficielle. Sa valeur définit la morphologie de l'impact (éclaboussure, déposition ou rebond).

$$\text{Nombre de Sommerfeld : } K = \sqrt{\frac{\rho u_0^2 L}{\sigma}} \sqrt{\frac{\rho u_0 L}{\mu}} = \sqrt{We \sqrt{Re}} = Oh \cdot Re^{1,25}$$

De par son écriture, K permet de définir le type d'impact de la goutte. En effet, il possède les dimensions associées au nombre d'Ohnesorge et celles du nombre de Reynolds. Dans leurs travaux, [Mundo 95] ont déterminé que le splashing intervient lorsque $K > 57,7$, la déposition se produit pour $K < 57,7$.

$$\text{Nombre de Bond : } Bo = \frac{\rho g R^2}{\sigma}$$

Avec R : rayon de la goutte.

Bo est le rapport des forces de gravité sur les forces de tension superficielle. Ce nombre permet de déterminer l'influence de la gravité sur l'écoulement de la goutte.

Par des combinaisons de ces nombres, on décrit la dynamique de l'impact en fonction des conditions initiales. La plupart du temps, afin de définir le comportement d'une goutte, les auteurs examinent le degré maximum d'étalement, c'est-à-dire le diamètre maximum du splat rapporté au diamètre initial de la goutte.

1.1.4 Le degré d'étalement maximal d'une goutte

En se plaçant dans le cas où l'impact génère une déposition, certains auteurs [Pasandideh-Fard 96] ont évalué le degré d'étalement maximum de la goutte par voie analytique, en se basant sur la conservation des énergies. L'hypothèse principale provient du modèle d'étalement suggéré. La goutte initialement sphérique s'étale le long du substrat sous forme d'un disque

d'épaisseur constante sans prendre en compte la présence du bourrelet périphérique (figure 1.4).

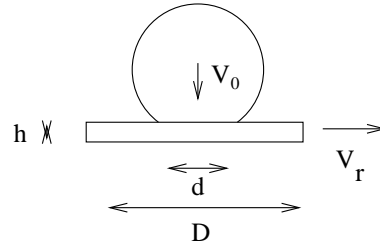


Figure 1.4 : Schéma d'étalement d'une goutte [Pasandideh-Fard 96]

Avant impact, on considère que la goutte est à son minimum d'énergie potentielle (soit $E_p = 0$). Les énergies cinétique et de surface de la goutte sont respectivement :

$$E_{c_1} = \left(\frac{\pi}{6} D_i^3\right) \left(\frac{1}{2} \rho V_i^2\right) \quad (1.5)$$

$$E_{s_1} = \sigma \pi D_i^2 \quad (1.6)$$

Lorsque la goutte atteint son maximum d'étalement, son énergie cinétique est nulle ($E_{c_2} = 0$). Son énergie de surface est la contribution des énergies entre d'une part la goutte et l'air et d'autre part la goutte et le substrat :

$$E_{s_2} = \sigma_{LS} \pi \frac{D_{max}^2}{4} + \sigma \pi \frac{D_{max}^2}{4} - \sigma_{SG} \pi \frac{D_{max}^2}{4} \quad (1.7)$$

Le dernier terme de cette équation correspond à l'énergie de surface entre le substrat et l'air qu'il faut enlever au système afin de conserver toutes les énergies de surface, puisque cette interface est remplacée par le contact entre la goutte et le substrat.

Or, selon la loi d'Young qui relie les tensions superficielles à l'angle de contact :

$$\cos(\theta_a) = \frac{(\sigma_{SG} - \sigma_{LS})}{\sigma} \quad (1.8)$$

En combinant les deux expressions précédentes :

$$E_{s_2} = \sigma \pi \frac{D_{max}^2}{4} - \sigma \pi \frac{D_{max}^2}{4} \cos(\theta_a) \quad (1.9)$$

Finalement :

$$E_{s_2} = \sigma \pi \frac{D_{max}^2}{4} (1 - \cos(\theta_a)) \quad (1.10)$$

Le travail nécessaire pour déformer la goutte contre les effets de viscosité s'écrit sous la forme:

$$W = \int_0^{t_c} \int_{\Omega} \phi d\Omega dt \approx \phi \Omega t_c \quad (1.11)$$

où Ω est le volume de fluide visqueux, t_c le temps nécessaire à l'étalement de la goutte et ϕ la fonction de dissipation visqueuse. L'ordre de grandeur de cette dernière est estimé par:

$$\phi \sim \mu \left(\frac{V_i}{L} \right)^2 \quad (1.12)$$

où μ est la viscosité de la goutte et L une longueur caractéristique normale à la direction de l'étalement. [Chandra 91] ont supposé que cette longueur de référence peut se rapporter à l'épaisseur de splot h . Leur résultats surestiment le degré d'étalement maximal D_{max} de plus de 40 % ce qui tend à montrer que L doit être inférieure à h . [Pasandideh-Fard 96] proposent de donner à L la valeur de l'épaisseur de couche limite δ à l'interface liquide solide. Celle-ci est calculée en considérant l'écoulement comme stationnaire. Elle s'exprime alors par:

$$\delta = 2 \frac{D_i}{\sqrt{Re}} \quad (1.13)$$

Le temps d'étalement t_c , quant à lui, est estimé grâce à l'hypothèse d'étalement sous forme de cylindre de diamètre D et épaisseur h qu'il faut au préalable déterminer. En considérant la configuration donnée par la figure 1.4, la conservation des débits permet d'affirmer que:

$$V_i \pi \frac{d^2}{4} = V_r D h \quad (1.14)$$

A l'instant de l'étalement maximal, le diamètre du splot atteint D_{max} . Par conservation de la masse:

$$\pi \frac{D_i^3}{6} = \pi \frac{D_{max}^2}{4} h \quad (1.15)$$

Soit:

$$h = \frac{2D_i^3}{3D_{max}^2} \quad (1.16)$$

Le diamètre d varie lorsque la goutte s'étale, de 0 (début du contact avec le substrat) jusqu'à D_i . Afin d'écartier le caractère évolutif de d , on lui assigne une valeur moyenne de $d = D_i/2$.

Par définition de V_r ,

$$V_r = \frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dD}{dt} \quad (1.17)$$

Et donc:

$$\frac{dD}{dt} = 2V_r = 2V_i \pi \frac{D_i^2}{16} \frac{1}{D} \frac{3D_{max}^2}{2D_i^3} \quad (1.18)$$

Soit:

$$\frac{dD}{dt} = V_i \pi \frac{3}{16} \frac{D_{max}^2}{D_i} \frac{1}{D} \quad (1.19)$$

Par intégration, sachant qu'à $t = 0$, $D = 0$ on obtient:

$$D(t) = \sqrt{\frac{3}{8} \frac{V_i}{D_i} D_{max}^2 t} \quad (1.20)$$

En faisant apparaître le temps adimensionné par rapport à la vitesse d'impact: $t^* = \frac{V_i}{D_i} t$, on obtient finalement:

$$\frac{D(t)}{D_{max}} = \sqrt{\frac{3}{8} t^*} \quad (1.21)$$

Lorsque le diamètre atteint D_{max} , le temps correspondant est de $t_c = \frac{8}{3} \frac{D_i}{V_i}$. A présent que $L = \delta$, t_c et $\Omega = \pi D_{max}^2 \delta / 4$ sont déterminés, on peut évaluer W :

$$W = \frac{\pi}{3} \rho D_i V_i^2 D_{max}^2 \frac{1}{\sqrt{Re}} \quad (1.22)$$

Finalement, par conservation des énergies: $E_{c1} + E_{s1} = E_{c2} + E_{s2} + W$ ce qui, en combinant avec leurs expressions respectives amène à:

$$\frac{D_{max}}{D_i} = \sqrt{\frac{We + 12}{3(1 - \cos\theta_a) + 4(We/\sqrt{Re})}} \quad (1.23)$$

Le terme $(1 - \cos\theta_a)$ qui correspond à l'influence de l'angle de contact est compris entre 0 et 2. Ainsi, si $(We/\sqrt{Re}) \gg 2$, ce qui se traduit par $We \gg \sqrt{Re}$, les effets capillaires peuvent être négligés. Si de plus $We \gg 12$, la formule précédente peut se ramener à:

$$\xi_{max} = \frac{D_{max}}{D_i} = \frac{1}{2} Re^{1/4} \quad (1.24)$$

Sur le même style de raisonnement, [Healy 01] se basent sur l'équation de Kurabayashi (1.25) modifiée par Yang (1.26) pour déterminer l'influence de l'angle de contact pour des impacts de gouttes à nombres de Weber supérieurs à 150. Dans ces équations, $\mu_{substrat}$ correspond à la viscosité de la goutte évaluée près du substrat et $n < 1$.

$$\frac{We}{2} = \frac{3}{2}\xi_{max,K}^2 \left[1 + \frac{3We}{Re} \left(\xi_{max,K}^2 \ln \xi_{max,K} - \frac{\xi_{max,K}^2 - 1}{2} \right) \left(\frac{\mu_{goutte}}{\mu_{substrat}} \right)^{0,14} \right] - 6 \quad (1.25)$$

$$\xi_{modifie} = \xi_{max,K} (45/\theta)^n \quad (1.26)$$

Ces équations montrent que pour $\theta < 45$, l'effet de l'angle de contact sur l'écoulement est négligeable.

1.2 Echanges thermiques lors de l'impact

Dans la plupart des cas, la goutte et le substrat sont à des températures différentes, car ils ne proviennent pas du même environnement: la goutte appartient à un milieu à température ambiante ou compatible avec son état initial (atmosphère, injecteur, etc.) et le substrat est lié à l'appareil qui subit le recouvrement (machine industrielle, matière organique, etc.). Les échanges thermiques qui accompagnent l'écoulement correspondent à un contact brusque entre un solide et un fluide sur une échelle de temps très petite. Dans certains cas, cela s'accompagne d'un changement de phase rapide (ébullition, solidification) ce qui modifie l'écoulement. Dans cette partie, nous allons définir les transferts thermiques dans chacun des matériaux puis décrire le type de contact que cela génère entre les deux milieux et enfin comment s'effectuent les changements de phase.

1.2.1 Influence des transferts thermiques

Lorsque la goutte et le substrat ont des températures initiales différentes, l'impact constitue un contact brusque qui s'accompagne d'échanges thermiques soudains. Plusieurs études ont porté sur l'analyse des champs thermiques dans le substrat et dans la goutte afin d'étudier comment la disposition initiale et le type d'écoulement pouvaient avoir un lien avec les échanges de chaleur. Il a ainsi été mis en évidence que le refroidissement et l'étalement de la goutte se produisent simultanément, plus ou moins rapidement selon que la diffusivité du substrat est forte ou non [Zhao 96b]. Durant tout l'étalement, la convection thermique dans la goutte joue un rôle important en raison des fortes vitesses

tangentielles sur une faible épaisseur. Pendant cette étape, la chaleur est fournie continuellement au point d'impact, ce qui à la fois réchauffe le substrat et refroidit le fluide en étalement mais maintient la température de la goutte au point d'impact. C'est pourquoi on observe que la température de goutte est au même instant plus haute au point d'impact et plus faible dans la zone d'étalement.

Dans le substrat, la chaleur provenant de la goutte se diffuse par conduction. Le point le plus chaud se situe sous la zone d'impact près de la surface. Les isothermes se développent alors davantage le long de la surface qu'en profondeur à cause de l'étalement de la goutte, mais gardent la forme caractéristique des isothermes obtenues par conduction d'une source ponctuelle chaude qui diffuse de la chaleur dans un solide inerte. Aux temps plus longs, lorsque le fluide s'est étalé, le champ de température dans le splat devient quasi monodimensionnel. Les flux thermiques adoptent une configuration radiale plutôt qu'axiale bien que l'épaisseur de splat soit petite devant son rayon. Les flux thermiques s'orientent du centre de la goutte vers la périphérie et le centre est alors plus refroidi par transfert d'énergie du centre vers la périphérie de la goutte que par échange thermique du centre de la goutte vers le substrat. Ces différentes étapes montrent que l'hypothèse selon laquelle les transferts thermiques interviennent une fois l'étalement achevé n'est pas toujours valide. Elle dépend de la diffusivité du substrat qui dans certains cas est trop importante pour que les deux phénomènes soient découplés.

1.2.2 Résistance thermique de contact

La solidification de la goutte est d'autant plus rapide que l'évacuation de la chaleur à travers le substrat est important et rapide. Cependant, le contact entre les deux milieux n'est pas parfait. La rugosité du substrat génère des interstices, où la conduction se fait en général peu, du fait que le fluide interstitiel, l'air, est peu conducteur. La notion de résistance thermique de contact permet de modéliser ce problème. Elle correspond à une chute brutale de la température dans la zone contenant l'interface, cette zone étant généralement prise d'épaisseur tendant vers 0. La RTC est ainsi modélisée par un saut de température à l'interface entre goutte et substrat. Dans beaucoup d'études d'impact et solidification de gouttes, la RTC n'est pas prise en compte. Le contact parfait est supposé, mais cette hypothèse peut entraîner des imprécisions sur l'intensité des échanges thermiques et sur les temps de transfert.

La difficulté qui se pose dans la présente étude concerne la nature du contact entre goutte et paroi. Les modèles de résistance de contact reposent sur une géométrie de l'interface constante dans le temps, et des champs de températures en régime permanent. Lorsque la goutte s'étale, la surface de contact évolue, en particulier sous l'effet de la tension de surface (en phase liquide) et de la contraction du métal à la solidification, et les échanges thermiques sont transitoires. La notion de résistance thermique de contact doit donc être adaptée au problème.

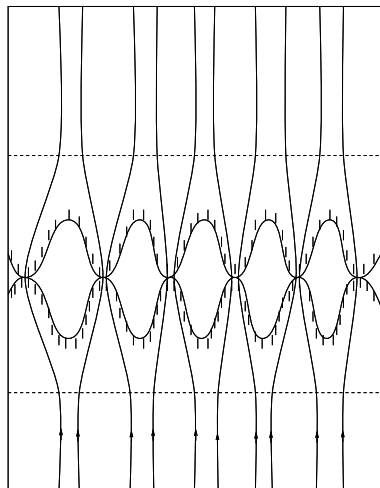


Figure 1.5 : *Visualisation des contractions des lignes de flux au contact de deux milieux à l'origine de la RTC*

Ce contact imparfait est une zone où les propriétés physiques varient très rapidement. Le flux de chaleur est donc très perturbé dans cette "couche de transition". La conduction par contact réel s'effectue au niveau des pics du substrat. Les lignes de flux convergent vers les zones (en général ponctuelles) de contact, en s'allongeant, et ainsi augmentent leur résistance thermique. Les espaces interstitiels jouent le rôle d'isolants thermiques non parfaits. La convection ne s'y développe pas, la cavité étant trop restreinte. La RTC est donc la contribution de deux résistances, celle par constriction, et la résistance interstitielle. La résistance thermique de contact dépend de nombreux paramètres : géométrie de la surface, rugosité, nature du fluide interstitiel, températures initiales du substrat et de la goutte (influence sur la mouillabilité, la pression de contact et la tension superficielle), et propriétés physiques (λ , c_p , ρ). Le régime transitoire de la résistance thermique de contact est difficile à déterminer, le régime permanent s'établissant au bout d'une durée de l'ordre

de $1\mu s$.

La RTC permanente dépend du type de rugosité, de la répartition et du nombre des points de contact. Il n'existe pas de relation générale. Sa détermination repose le plus souvent sur une étude expérimentale. Les résistances interstitielles et de constriction sont étroitement liées, ce qui accentue la difficulté à les déterminer. Dans une première approche, on les considère indépendantes.

1.2.3 La résistance par constriction

Le transfert de chaleur s'effectue exclusivement par conduction à travers les points de contact réels des deux solides. Dans le cas d'un milieu semi-infini, en régime permanent, la constriction est présentée en figure 1.6.

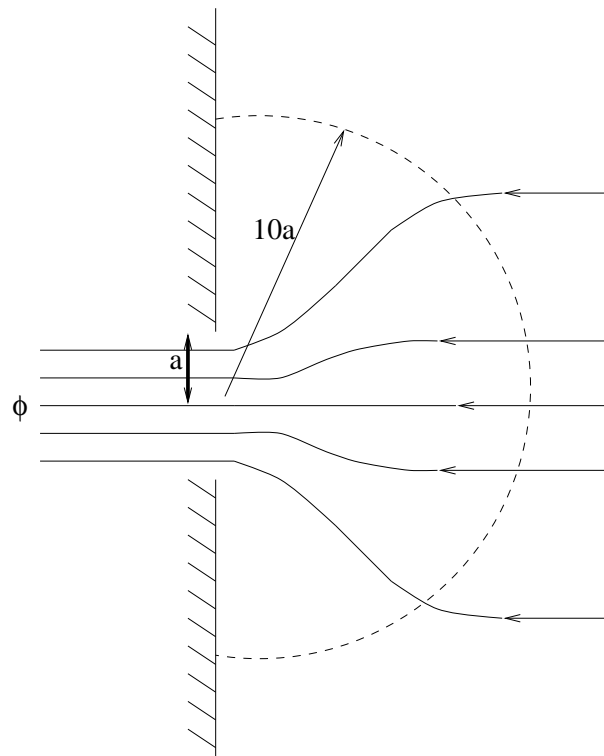


Figure 1.6 : *Tube de flux dans une constriction*

On exprime le lien entre la différence de température entre le cercle de rayon a T_O et le milieu à l'infini T_∞ (où les lignes de flux sont à nouveau parallèles les unes aux autres)

et le flux Φ par:

$$T_\infty - T_0 = \frac{1}{\lambda} F \Phi \quad (1.27)$$

Avec $\Phi = \phi_0 S$ où ϕ_0 est la densité de flux et S la section de passage.

La résistance de constriction est $r_0 = \frac{1}{\lambda} F$, où F est la fonction de constriction, qui dépend de la géométrie de S (dimension: m^{-1}).

Dans le cas d'une température uniforme sur l'aire de contact: $F = \frac{1}{4a}$

Dans le cas d'une densité de flux uniforme sur l'aire de contact: $F = \frac{8}{3\pi^2 a}$

Il est possible de modéliser la résistance thermique de contact par une constriction dans un tube de section finie (figure 1.7):

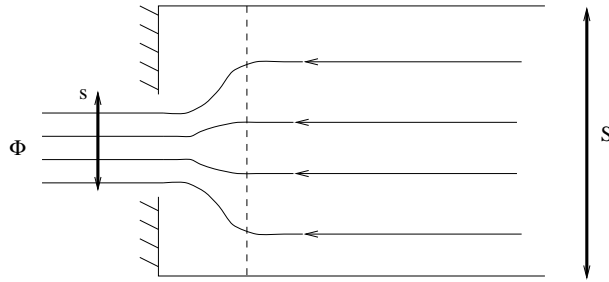


Figure 1.7 : Contact selon deux tubes de section s et S

Le cas idéal est représenté par: $S = s$

La résistance d'un élément de tube entre une surface plane isotherme T_L éloignée et l'isotherme T_0 sur s est :

$$r_L = \frac{L}{\lambda S} + \frac{1}{\lambda} g(a, b), \quad g \text{ est la fonction de constriction, dépendant de } s \text{ et } S$$

Le premier terme du membre de droite correspond à la résistance du milieu dans le cas sans constriction, et le second terme est l'accroissement de la résistance du milieu, provoqué par le rétrécissement de S à s .

Pour un contact circulaire de rayon a , et un tube de rayon b :

$$g(a, b) = \frac{1}{4a} [1 - 1,40925 \left(\frac{a}{b}\right) + 0,29591 \left(\frac{a}{b}\right)^3 - 0,05254 \left(\frac{a}{b}\right)^5 + \dots] \quad (1.28)$$

Negus et al. fournit trois autres configurations (avec $\epsilon = \sqrt{s/S}$):

| Géométrie de s | Géométrie de S | Fonction de constriction $\Psi(\epsilon)$ |
|----------------|----------------|--|
| cercle | cercle | $0,4789 - 0,6244\epsilon + 0,1123\epsilon^3$ |
| cercle | carré | $0,4789 - 0,6205\epsilon + 0,1159\epsilon^3$ |
| carré | carré | $0,4732 - 0,6205\epsilon + 0,1198\epsilon^3$ |

Tableau 1.1 : *Fonction de constriction en fonction des géométries*

Pour un milieu semi-infini, 97% de la chute de température est confinée dans l'hémisphère de rayon $10a$, pour une surface circulaire de centre O de rayon a , donc dans une zone très proche de l'aire de contact.

Pour un contact sur un tube cylindrique semi-infini, la constriction est pratiquement développée à une distance $L > b$, avec b rayon du tube.

On modélise la RTC par le modèle cylindre à aspérités uniformément réparties. Soit n le nombre de points de contact par unité de surface.

Soient P_1 et P_2 deux surfaces équipotentielles situées de part et d'autre du contact, suffisamment éloignées pour être quasi-planes.

La RTC est telle que $R = R_{P_1 P_2} - R_{P_1 P_2}^0$:

avec $R_{P_1 P_2}$ résistance du tube réel entre P_1 et P_2

$R_{P_1 P_2}^0$ résistance du tube idéal entre P_1 et P_2 (contact parfait)

Les résistances thermiques du milieu interstitiel et par constriction ne sont pas indépendantes, ce qui rend le calcul difficile. Dans une première approche, on considère qu'elles le sont.

Considérons $\lambda_f = 0$ (résistance interstitielle infinie).

Dans un plan de contact isotherme, $r_s = r_1 + r_2 = \frac{1}{\lambda_1}g(a, b) + \frac{1}{\lambda_2}g(a, b) = \frac{1}{\lambda_e}g(a, b)$

où r_1 et r_2 sont les résistances de constriction des lignes de flux dans les deux milieux, et

la conductivité telle que $\frac{1}{\lambda_e} = \frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}$.

La RTC par unité de surface est : $R_s = \frac{r_s}{n} = \frac{2}{n\lambda_e}g(a, b)$.

Suivant le même principe, on peut déterminer la composante fluide.

La résistance de contact transitoire fait l'objet de peu d'études. Elle pose le problème de l'inertie propre de l'interface et elle n'a été étudiée que dans le cas solide-solide.

On reprend le même schéma que précédemment auquel on impose un flux constant sur le cercle de rayon a : $Q = \pi a^2 q$

L'équation d'énergie s'écrit :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}(r, x, t) + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r}(r, x, t) + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(r, x, t) = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t}(r, x, t) \quad (1.29)$$

α est la diffusivité.

Les conditions limites et initiale sont :

$$T(r, x, t) \longrightarrow 0 \text{ quand } r \rightarrow \infty \quad (1.30)$$

$$T(r, x, t) \longrightarrow 0 \text{ quand } x \rightarrow \infty \quad (1.31)$$

$$T(r, x, 0) = 0 \quad (1.32)$$

La résolution de ce système dans l'espace de Laplace mène à:

$$T_m(t) = \frac{q}{\lambda} L^{-1} \left(\frac{2}{p} \int_0^\infty \frac{J_1^2(\sigma a)}{\sigma \sqrt{\sigma^2 + \frac{p}{a}}} d\sigma \right) = \frac{q}{\lambda} f(t) \quad (1.33)$$

D'où la résistance de constriction en régime transitoire:

$$r(t) = \frac{T_m(t)}{\pi q a^2} = \frac{1}{\pi \lambda a^2} f(t) \text{ et en } t \rightarrow \infty, f(t) = 1$$

La résistance transitoire étant difficile à déterminer, il est possible d'utiliser l'hypothèse des temps courts : on effectue un développement limité de $T_m(p)$ quand $p \rightarrow \infty$.

On obtient $r(t)$ quand $t \rightarrow 0$.

$$\text{Or } r(t) = \frac{2}{\pi a \lambda} \sqrt{\frac{\alpha t}{\pi}}$$

D'où $r(t) \rightarrow 0$ quand $t \rightarrow 0$

Cela signifie que le contact peut être considéré comme parfait aux premiers instants. En effet, la résistance de constriction n'apparaît pas dans les premiers instants, ce qui revient à dire que la résistance de contact est nulle. Puis elle augmente au cours du temps, et cette hypothèse de contact parfait disparaît.

Par ce même raisonnement, on peut déterminer la résistance de contact transitoire de deux matériaux brusquement en contact. On suppose que a est le rayon de la constriction, donc du contact réel entre les deux surfaces. Les deux milieux sont repérés par l'indice $i=1$ ou 2 .

D'un point de vue thermique, le contact se situe entre deux conditions : contact isoflux et contact isotherme. Dans le premier cas, on résout le système précédent, indépendamment dans chacun des milieux 1 et 2.

Pour les temps plus longs, on détermine la résistance de contact par une autre approximation : on calcule $T_m(p)$ quand $p \rightarrow 0$.

Dans ce cas, on obtient : $r(t) = \frac{8}{3a\lambda\pi^2} \left(1 - \frac{3\sqrt{\pi}}{16} \frac{a}{\sqrt{\alpha t}}\right)$

On remarque que cette formule fait intervenir la résistance permanente définie précédemment. On peut donc poser ce calcul sous la forme :

$$r(t) = r_0(1 - \epsilon)$$

r_0 est la résistance de constriction permanente, et ϵ représente l'écart par rapport à r_0 . Il est donc possible d'imposer une valeur arbitraire à ϵ , permettant de définir une différence en dessous de laquelle on considérera la résistance comme permanente. A ce ϵ correspond un temps caractéristique d'établissement de la résistance de constriction :

$$\epsilon = \frac{3\sqrt{\pi}}{16} \frac{a}{\alpha t_\epsilon} \Rightarrow t_\epsilon = \frac{9\pi}{16\epsilon^2} \frac{a^2}{\alpha}$$

1.2.4 La résistance thermique de contact lors de l'impact d'une goutte

Dans la littérature, la modélisation numérique de la résistance thermique de contact consiste à supposer une "couche" à l'interface, d'épaisseur arbitraire l_c , de conduction uniquement axiale, de conductivité effective $K = \frac{B_i l_c}{d_0}$ (adimensionnée) et dont le c_p est nul. B_i est le nombre de Biot : $B_i = \frac{h_c d_0}{\lambda_1}$, h_c est le coefficient de transfert correspondant au contact entre la goutte et la région du substrat et λ_1 est la conductivité de la goutte.

Lors de l'impact d'une goutte sur un substrat, la résistance thermique de contact peut provenir de plusieurs phénomènes : A l'instant de l'impact, la goutte produit sur le substrat une pression qui permet un contact plus ou moins important entre les deux milieux. En effet, la rugosité du substrat définit le nombre de contacts réels entre les deux matériaux et donc la facilité de passage de la chaleur. La pression de la goutte va modifier

cette surface de contact réel et donc la résistance thermique associée. Cependant, comme il s'agit d'un milieu fluide, l'écoulement peut être à l'origine de pièges d'air entre les pics de rugosité plus gros ou à l'inverse le remplissage de ces creux. Ensuite, cette pression diminue et joue un rôle de moindre importance dans les instants suivants. Cette pression est directement liée à la vitesse d'impact et à la dimension de la goutte.

Les études concernant l'impact de gouttes avec prise en compte d'une résistance thermique de contact sont variées : expérimentalement, il a été montré que lorsqu'une goutte s'étale, la "rugosité" de la goutte, qui doit correspondre à l'inverse de la rugosité du substrat, était légèrement inférieure à cette dernière [Loulou 99] comme illustré en figure 1.8.

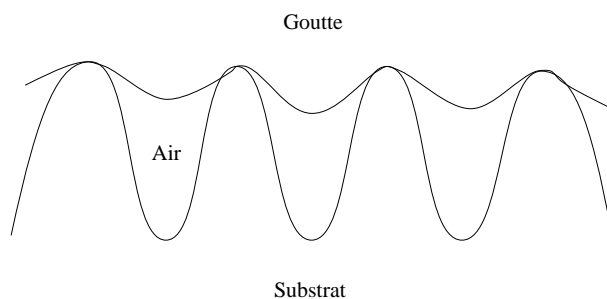


Figure 1.8 : *Illustration du contact d'une goutte et d'un substrat rugueux*

De plus, il apparaît que cette résistance thermique de contact évolue dans le temps. D'une valeur importante, elle diminue rapidement pour atteindre une valeur constante. Sur ce principe, certains auteurs simplifient le modèle en ne prenant en compte que la valeur constante de la RTC pendant toute la durée de l'étalement [Pasandideh-Fard 98] [Waldvogel 96]. Les résultats obtenus montrent qu'aux temps long cette simplification est cohérente mais quelques différences notables apparaissent aux temps courts. Le contact entre un solide et un liquide en cours de solidification fait l'objet de très peu d'études et reste mal maîtrisé de par la nature du contact : Les variations des propriétés physiques et mécaniques ainsi que de la géométrie du contact changent le comportement de la résistance thermique de contact.

1.3 La solidification

Dans beaucoup de recherches industrielles concernant la pulvérisation de gouttes, la matière subit un changement d'état au contact avec le substrat. Ce phénomène permet d'obtenir à partir de particules liquides un revêtement solide. La solidification est un phénomène qui fait intervenir des propriétés thermiques autant que mécaniques.

1.3.1 Notions sur la solidification

La solidification est un phénomène très répandu dans la nature. Elle correspond à un réarrangement de la structure de la matière ou transition qui s'accompagne d'une **rupture de la symétrie**. La matière passe en effet d'une structure stable désordonnée à l'état liquide à un réseau organisé stable à l'état solide, ce réarrangement s'accompagne d'un dégagement de chaleur. Des études ont été réalisées d'un point de vue thermodynamique pour expliquer les comportements de fusion et solidification, en se basant souvent sur un modèle de sphères rigides [Papon 99].

On distingue deux types de changement de phase :

- **La transition franche** (ou localisée) s'effectue à une température de fusion donnée T_f correspondant au changement d'état. Les propriétés thermophysiques (chaleur spécifique, conductivité...) exhibent une discontinuité à T_f liée à la libération de la chaleur latente lors de la solidification (figure 1.9). On retrouve ce type de transition dans les corps purs.

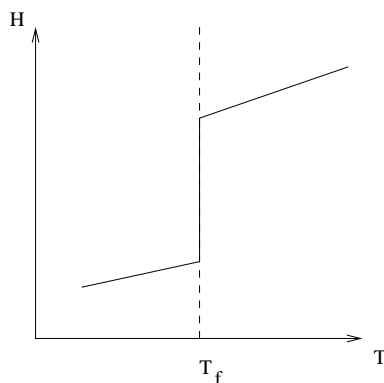


Figure 1.9 : *Enthalpie massique en fonction de la température en transition franche*

- **La transition étalée** correspond à un réarrangement de la matière, qui s'organise de manière différente dans un matériau très visqueux (polymères, alliages). Cette transition possède une constante de temps assez grande (figure 1.10).

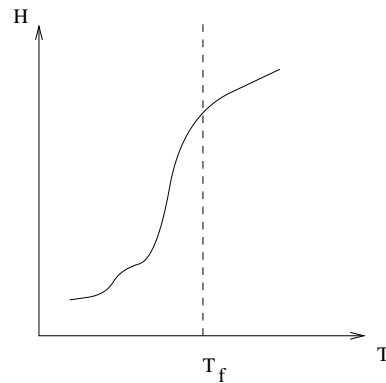


Figure 1.10 : *Enthalpie massique en fonction de la température en transition étalée*

Dans tous les cas, la solidification débute par la nucléation. Il s'agit de l'apparition de germes solides autour desquels commence le changement d'état. La solidification se produit lorsque la goutte atteint une température inférieure à la température de solidification qui correspond à la formation d'un nucleus stable. Celui-ci est issu de la diffusion d'atomes ou molécules qui constituent la phase liquide, et qui s'agrègent les uns aux autres. La germination est le principe de ce phénomène : la transition liquide-solide est contrôlée par une barrière d'activation d'énergie. A la température de fusion T_f , des nuclei apparaissent, de rayon r . Mais ceux-ci ne peuvent croître qu'au dessus d'un certain rayon critique r^* . En dessous de r^* , les germes refondent, et le milieu reste à l'état liquide. Au-delà de r^* , les nuclei sont stables et peuvent croître. Une fois la nucléation activée, le phénomène de croissance cristalline prend le relais. La cristallisation peut alors se propager dans tout le milieu liquide. Ceci se traduit par une vitesse de nucléation fonction de la température. La structure cristalline du matériau évolue en fonction de la température. Lorsqu'elle est proche de la température de fusion, les germes sont de grande taille, ce qui implique une viscosité faible, et une croissance faible, mais sont peu nombreux, d'où une faible probabilité de nucléation. Inversement, plus on s'éloigne de la température de fusion, plus les germes sont nombreux et petits. La nucléation et la croissance cristalline définissent la cinétique de cristallisation. Elle détermine le nombre de nuclei susceptibles d'apparaître

en fonction de la température et leur capacité à refondre ou croître. De façon formelle, il est souvent plus pratique de la présenter sous forme probabiliste.

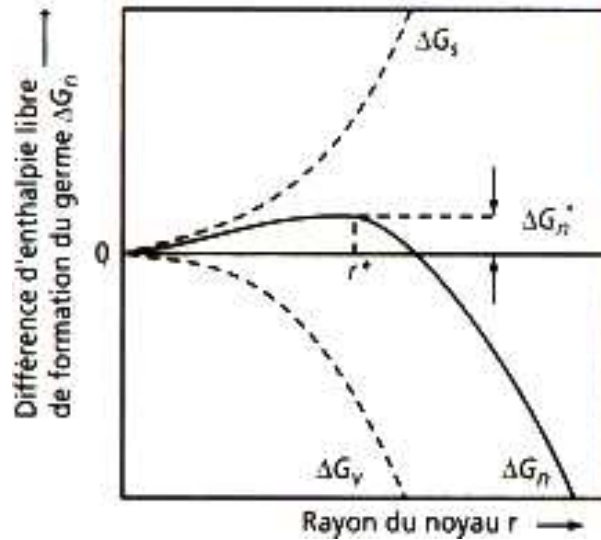


Figure 1.11 : Variation de l'enthalpie libre de formation d'un noyau en fonction du rayon du noyau

Il existe deux types de nucléation :

Nucléation homogène: la métastabilité est rompue spontanément pendant un refroidissement continu d'un liquide pur. Les nuclei apparaissent dès qu'une énergie critique est atteinte. La nucléation s'effectue lorsque le germe possède un rayon supérieur à un rayon critique. Le travail réversible de formation du germe sphérique de rayon r est de l'ordre de :

$$\Delta G(r) = 4\pi r^2 \sigma_{s/l} - \frac{4\pi}{3} r^3 \Delta s_f \Delta T \quad (1.34)$$

avec ΔT : surfusion

$\Delta G(r)$: énergie libre de Gibbs

$\sigma_{s/l}$: tension de surface liquide/solide

Δs_f : entropie de fusion par unité de volume

$\Delta G(r)$ est maximum pour $r_c = \frac{2\sigma_{s/l}}{\Delta s_f \Delta T}$ qui est le rayon critique.

Nucléation hétérogène: les particules étrangères ou la rugosité de la surface aident la formation des germes dans le liquide. Ces derniers ne se forment pas à l'intérieur du liquide, mais par le contact avec ces " impuretés ". Les nuclei sont viables pour une barrière d'énergie de la forme :

$$\Delta G_{het}(r) = \Delta G_{hom}(r)f(\theta) \text{ avec } f(\theta) = \frac{(2+\cos\theta)(1-\cos\theta)^2}{4}$$

θ est l'angle de mouillage. Il est donné par l'expression :

$$\sigma_{s/l} = \sigma_{c/s} + \sigma_{l/c}\cos(\theta) \quad (1.35)$$

$\sigma_{s/l}$ est la tension superficielle liquide-substrat,

$\sigma_{c/s}$ est la tension superficielle cristal-substrat,

$\sigma_{l/c}$ est la tension superficielle liquide- cristal.

Un germe au contact d'un corps étranger peut donc se représenter comme suit:

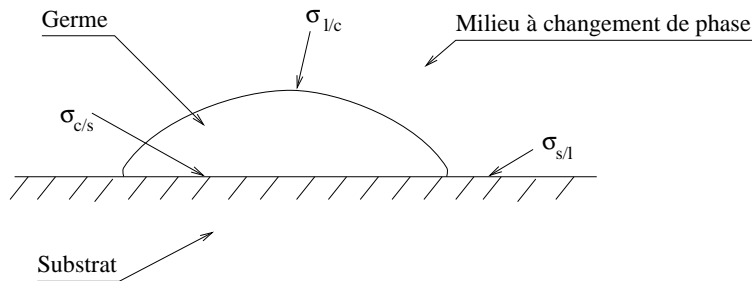


Figure 1.12 : Germination hétérogène : germe au contact d'un substrat

La nucléation hétérogène se fait plus facilement que la nucléation homogène. Il en résulte que :

$$\Delta G_{het}^* \leq \Delta G_{hom}^* \quad (1.36)$$

La solidification débute naturellement plus facilement au niveau du contact avec un corps extérieur que spontanément dans le milieu lui-même.

Les structures générées par le processus de cristallisation peuvent prendre des formes différentes. Ainsi pour des métaux liquides, les cristaux croissent sous forme de dendrites, les composés eutectiques cristallisent en structure lamellaire, alors que les polymères produisent des sphérolites, c'est-à-dire des morphologies qui croissent radialement autour du germe sous forme de lamelles (structure de disque).

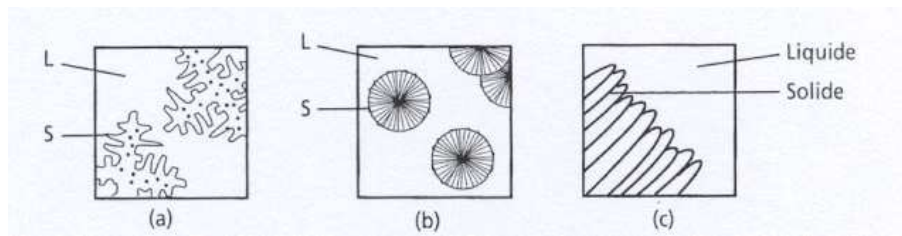


Figure 1.13 : Nucléations: a) Formation de dendrites b) Sphérolites c) Structure lamellaire

La cristallisation est un phénomène où on peut déterminer trois phases :

- Une zone de contact ou proche de la paroi où la vitesse de refroidissement est la plus élevée. On y trouve un grand nombre de petits grains orientés au hasard (phénomène lié à la surfusion). Une surfusion peut apparaître et engendrer l'apparition de cristaux solides par germination hétérogène. C'est la " chill zone " ou zone de peau ou zone équiaxe externe.

- Une zone où les grains ont une orientation cristalline parallèle et opposée à la direction du flux de chaleur. Cet arrangement s'explique par l'évolution du front de solidification. C'est la zone colonnaire. Ce phénomène est à la base de la définition de la cinétique de cristallisation.

- Une zone interne (zone équiaxe interne). Les grains croissent dans une zone liquide en légère surfusion, suite à un détachement de quelques branches colonnaires. La surfusion est à l'origine de l'aspect dendritique des grains.

Dans le cas d'un métal pur, ce qui sera notre cas, la structure moléculaire est de type cristalline. Par définition, un cristal apparaît comme la répétition régulière d'unités structurales identiques. Un métal est constitué d'ions positifs disposés aux nœuds d'un réseau avec un " nuage d'électrons ". Un certain nombre de métaux, tel que le fer, ont leur structure qui varie en fonction de la température. On dit qu'il y a transformation allotropique.

A partir de ces considérations, des études ont été réalisées concernant le comportement de gouttes lors de leur impact sur un substrat.

1.3.2 La solidification d'une goutte de métal

Les premières études théoriques sur l'impact et la solidification de gouttes d'alumine sur un substrat [Madejski 76] consistent à poser plusieurs simplifications. Tout d'abord, la solidification progresse sous forme d'un problème de Stefan axial mais sur une section qui augmente (disque de plus en plus large):

$$y(r) = \eta\sqrt{at} \quad (1.37)$$

où y est l'épaisseur solidifiée, η une constante, a la diffusivité thermique et t le temps de solidification. Ensuite, l'épaisseur de film encore liquide b ne dépend que du temps de solidification. Ainsi, par conservation de la masse entre la partie solidifiée et la partie liquide, [Madejski 76] obtient:

$$m = \rho_{liquide} \frac{\pi}{6} D^3 = \rho_{solide} V_s + \rho_{liquide} \pi r^2 b \quad (1.38)$$

Dans cette expression, D est le diamètre de la goutte sphérique initiale, V_s est le volume solidifié et r est le rayon de splat. Le volume V_s est calculé grâce à l'expression précédente par:

$$V_s = \pi R_0^2 \eta \sqrt{at} + \int_0^t 2\pi R(\tau) \frac{dR(\tau)}{d\tau} \xi \sqrt{a(t-\tau)} d\tau \quad (1.39)$$

Finalement:

$$b(t) = \frac{\rho_{liquide} \frac{\pi}{6} D^3 - \rho_{solide} V_s}{\rho_{liquide} \pi r^2} \quad (1.40)$$

De même, par un bilan des énergies cinétique, de surface et de forces visqueuses sur la partie encore liquide, il détermine le degré d'étalement de la goutte:

$$\frac{d}{dt}(E_c + E_p + E_\mu) = 0 \quad (1.41)$$

En explicitant chacun des terme, il arrive à l'équation:

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\epsilon}{3} \xi^2 \phi (\xi^2 + \frac{6}{5} \phi^2) + \frac{1}{We} \xi (\xi + 2\phi) \right] + \frac{\xi^2 \dot{\xi}^2}{\phi Re} = 0 \quad (1.42)$$

avec $\phi = \frac{1}{6\epsilon^3\xi^2}\{1 - k[\sqrt{t} + 2\int_0^t \xi(\tau)\dot{\xi}(\tau)\sqrt{t-\tau}d\tau]\}$

et les variables adimensionnelles $\xi = \frac{R}{R_0}$, $\phi = \frac{b}{R_0}$, $We = \frac{\rho_{liquide}V^2D}{\sigma}$, $Re = \frac{\rho_{liquide}VD}{\mu}$, $Pe = \frac{VD}{a}$ et $k = 6\epsilon^2\eta\frac{\rho_{solide}}{\rho_{liquide}}\sqrt{\frac{\epsilon}{Pe}}$.

La constante ϵ représente le rapport entre le rayon initial R_0 et le diamètre de la goutte. En supposant $\epsilon = 0,5$, c'est-à-dire en négligeant les déformations que la goutte peut subir juste au moment de l'impact, [Madejski 76] a montré que cela produisait une erreur sur le calcul de l'énergie de surface initiale de 8%.

En supposant $k = 0$, donc sans solidification, et pour $We > 100$ et $Re > 100$, on obtient le degré d'étalement maximal par la formule:

$$\frac{3\xi_m^2}{We} + \frac{1}{Re}\left(\frac{\xi_m}{1,2941}\right)^5 = 1 \quad (1.43)$$

Pour un nombre de Weber très grand (We^{-1} négligeable) on obtient:

$$\xi_m = 1,2941 Re^{1/5} \quad (1.44)$$

En se basant sur cette théorie, [Schiaffino 97a] ont déterminé qu'à faible nombre de Weber, lorsque le splat est gouverné par les forces capillaires et la vitesse d'impact n'a plus d'influence sur l'écoulement, l'épaisseur de couche solidifiée s'exprime par:

$$\frac{y}{\eta\sqrt{at}} = \sqrt{1 + \frac{1}{0,9t_*}\ln\left(1 - (1 - e^{-0,9t_*})\frac{r}{R(t_*)}\right)} \quad (1.45)$$

avec $t_* = t/\sqrt{\rho_{liquide}R^3/\sigma}$.

De plus, ils ont estimé le rapport entre temps d'étalement et temps de solidification en considérant un contact parfait (pas de résistance thermique de contact) par:

$$\frac{t_{etal}}{t_{solid}} = \frac{OhSte}{Pr} \quad (1.46)$$

D'un point de vue expérimental, des études ont été réalisées sur des gouttes métalliques projetées sur une surface froide. [Fukumoto 99] ont montré que lorsque la température de substrat est très faible, la solidification rapide entraîne sur la goutte la formation de digitations et une morphologie en étoile, alors qu'avec un substrat à haute température (tout en restant en-dessous du point de fusion de la goutte) la goutte génère un disque régulier. [Sampath 99] [Jiang 99] ont également observé cette transition de morphologie en fonction de la température de substrat sur des gouttes de zircone et de molybdène. Leurs études s'étendent à des substrats rugueux et montrent des résultats assez similaires en

terme de morphologie: une grande partie du splat possède la même forme que sur substrat lisse, si ce n'est sur ses bords où des digitations apparaissent. Ces deux études réalisées en parallèle suggèrent que la température du substrat est un paramètre très important sur la forme du splat quel que soit le fluide utilisé. De plus, sur un substrat froid, le splat génère davantage de craquelures que sur un substrat chaud car la solidification génère un gradient de contraintes important provenant de la forte différence de température entre les deux milieux.

A l'aide de la même approche, [Leger 96] ont montré expérimentalement qu'un substrat relativement chaud retarde le début de la solidification et laisse donc l'étalement s'achever avant le début de la solidification. A l'inverse, lorsque la particule s'écrase sur un substrat très froid, la température de goutte diminue au-dessous de la température de sous-refroidissement. La solidification débute et l'énergie mécanique contenue dans le liquide provoque la projection de la matière, ce qui résulte en une morphologie du splat en étoile.

De plus, il apparaît que chauffer le substrat avant l'impact des gouttes améliore l'adhérence [Bianchi 95]. Cela serait dû à la forme des splats qui, lorsqu'il s'agit de disques, améliore le contact par rapport aux formes étoilées des projections sur substrat froid.

[Pasandideh-Fard 98] ont étendu leur formulation de l'étalement maximum d'une goutte métallique sur un substrat en prenant en compte la solidification rapide mais pas l'effet Marangoni:

$$\xi_{max} = \sqrt{\frac{We + 12}{3(1 - \cos\theta) + 4We/\sqrt{Re} + We\sqrt{(3Ste)/(4Pe)}}} \quad (1.47)$$

où θ représente l'angle de contact dynamique entre le substrat et la goutte.

Lors de l'empilement de microgouttes les unes sur les autres, [Harfel 03] ont montré expérimentalement que pour $2,39 < We < 5,99$ et $281 < Re < 453$ et $0,187 < Ste < 0,895$, ces formules analytiques surestiment le degré maximal d'étalement des gouttes, et sous-estiment l'influence du nombre de Reynolds Re .

Dans leurs travaux concernant l'impact de gouttelettes de zircone par projection plasma, [Vardelle 94] ont mis en évidence, pour des nombres de Reynolds compris entre 350 et 1050 et des nombres de Weber entre 3000 et 10000, l'influence de la vitesse et la température de la particule fluide indépendamment l'une de l'autre sur l'étalement: plus ces paramètres sont élevés, plus le temps d'étalement est court et plus le degré d'étalement est grand. Ces résultats sont en accord avec l'équation 1.44 et en vérifient les hypothèses sauf pour le découplage de l'écoulement et de la solidification. En comparant la température

du splat à celle obtenue numériquement par simulation de la solidification du splat sans écoulement, les auteurs observent une concordance des évolutions thermiques pour une résistance thermique substrat-splat de l'ordre de $10^{-8} K.m^2.W^{-1}$.

Lors de l'impact de gouttes sur différents types de substrats (verre et acier), [Aziz 00] vérifient que la solidification des particules fluides diminuent leur degré d'étalement. En définissant le nombre de solidification Φ par:

$$\Phi = \frac{Ste}{\sqrt{Pr}} \frac{b_{substrat}}{b_{goutte}} \quad (1.48)$$

où $b = \sqrt{\lambda\rho C_P}$ est l'effusivité du matériau, ils montrent que la solidification a peu d'influence sur l'étalement lorsque $\Phi < 1$.

Ce chapitre a permis de décrire les phénomènes dynamiques et thermiques qui interviennent lors de l'impact d'une goutte sur un substrat soit solide soit liquide. Le comportement qui s'ensuit dépend de nombreux paramètres initiaux (vitesse, diamètre, température...) qui autorisent un éventail important de comportements. De plus, les nombres adimensionnels usuels permettent d'estimer un ordre de grandeur des tailles de particule (rayon d'étalement et hauteur de splat) et des temps d'étalement et de solidification.

Chapitre 2

Résolution numérique

La simulation d'impact d'une goutte sur un substrat fait appel à la résolution de plusieurs équations qui couplent les aspects thermiques et dynamiques. Dans ce chapitre, nous allons décrire les équations et les méthodes numériques qui permettent de les résoudre. Des cas simples dont l'expression analytique est connue serviront à valider la résolution numérique.

2.1 Les équations du problème : méthodes numériques

Bien que les expériences concernant les impacts de gouttes aient pris de l'ampleur depuis les premiers travaux de Worthington, la diversité des écoulements, les temps caractéristiques très courts et les échelles spatiales très petites rendent les manipulations difficiles à réaliser. De plus, le caractère aléatoire de l'impact est difficile à contrôler (vitesse d'impact, température...). C'est pourquoi l'outil numérique devient rapidement indispensable afin de considérer les échelles de temps et d'espace qui nous concernent. De nombreuses études ont été réalisées en ce sens en adoptant des techniques diverses. Par application du principe fondamental de la dynamique, le bilan des forces au sein de chaque fluide newtonien exprime la vitesse en fonction des paramètres du système :

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (2.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (uu) \right) = -\nabla p + \rho g + \nabla \cdot (\mu [\nabla u + \nabla^T u]) + F_{TS} + Br \quad (2.2)$$

où ρ et μ sont respectivement la masse volumique et la viscosité de la phase concernée. A cette équation " de base " sont ajoutés différents termes pour prendre en compte les divers aspects de notre problème. Le terme Br sera explicité ultérieurement. Le terme F_{TS}

quant à lui est lié à la notion d'interface de deux fluides non miscibles. Afin de prendre en compte le caractère diphasique fluide-air de l'impact de goutte, l'interface des phases immiscibles est modélisée par une équation définie grâce à la conservation des flux de matière, donc de la masse. Soit V la vitesse locale de l'interface de normale n_i et $\rho_1 u_1$ et $\rho_2 u_2$ les quantités de mouvement associées aux fluides 1 et 2. Par conservation de la masse :

$$\rho_1(u_1 \cdot n_i - V) = \rho_2(u_2 \cdot n_i - V) \quad (2.3)$$

Cette équation permet de traduire la continuité du champ de vitesse normal à l'interface mais ne prend pas en compte la présence de la tension superficielle dans cette zone. A l'équation 2.2 est donc ajouté un terme qui correspond à la force issue de la tension superficielle, soit :

$$F_{TS} = \sigma \kappa \delta n_i \quad (2.4)$$

où σ , κ et δ sont respectivement le coefficient de tension superficielle, la courbure moyenne locale de l'interface et la fonction Dirac puisque l'interface est considérée comme un saut de propriétés physiques.

Ces équations sont valables dans chaque phase fluide prise séparément. Afin de déterminer le champ de vitesse dans tout le domaine, il est nécessaire de résoudre une équation supplémentaire qui prend en compte la présence de l'un ou l'autre des fluides en chaque zone du domaine. Ce type de modèle où tout est résolu par les mêmes équations avec prise en compte de la présence des fluides est appelé modèle à un fluide ou mésoscopique.

2.1.1 Modèle à un fluide

Ce modèle a été choisi car il s'adapte bien à la discrétisation sur maillage fixe cartésien utilisé lors des simulations sans se préoccuper de la position de l'interface par rapport au maillage. Ce type de modèle a été utilisé par plusieurs auteurs pour simuler la déposition sur substrat sec [Pasandideh-Fard 96] ou l'impact sur film liquide [Gueyffier 98b]. Il convient donc de définir une fonction qui détermine géométriquement la position des phases dans le domaine. Soient ϕ_1 et ϕ_2 les fonctions phase définies par :

$\phi_1(x, y, z, t) = 1$ dans les zones contenant le fluide 1

$\phi_1(x, y, z, t) = 0$ dans les zones ne contenant pas de fluide 1

$\phi_2(x, y, z, t) = 1$ dans les zones contenant le fluide 2

$\phi_2(x, y, z, t) = 0$ dans les zones ne contenant pas de fluide 2

Les fluides étant immiscibles, il vient tout naturellement que $\phi_2(x, y, z, t) = 1 - \phi_1(x, y, z, t)$.

Par continuité des vitesses à l'interface, la vitesse locale de l'interface V vérifie :

$$V = u_1 \cdot n_i = u_2 \cdot n_i \quad (2.5)$$

Les fonctions phase ϕ_1 et ϕ_2 se déplacent en fonction de la vitesse de l'interface V . Cette évolution peut être décrite par une équation cinématique qui relie les fonctions à V :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + V \cdot \nabla \phi = 0 \quad (2.6)$$

Cette équation d'advection définit le transport de chaque phase dans le domaine, en particulier à l'interface où intervient le saut de phase de 1 à 0.

Au lieu d'utiliser deux fonctions de phase ϕ_1 et ϕ_2 , il est plus intéressant d'introduire une fraction volumique qui répond aux mêmes lois et définie sur tout le domaine [Vincent 00].

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \cdot \nabla C = 0 \quad (2.7)$$

Cette fraction volumique appelée fonction couleur et notée C prend pour valeur 1 dans le fluide qui compose la goutte et 0 dans l'air. Les caractéristiques physiques des milieux s'expriment en fonction de la présence de chaque fluide :

$$\rho = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)C \quad (2.8)$$

$$\mu = \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1)C \quad (2.9)$$

A l'aide du modèle à un fluide et de la définition de la fonction couleur, la tension superficielle peut être exprimée seulement en fonction de C .

2.1.2 Modélisation de la tension de surface

La tension superficielle est une force qui agit sous la déformation de l'interface. Elle est donc proportionnelle à la courbure de l'interface :

$$F_{TS}(M) = \sigma \kappa(M) n_i(M) \quad (2.10)$$

La géométrie de l'interface n'est pas une donnée du problème. Le fait d'exprimer le problème par un modèle à un fluide permet de s'affranchir de cette donnée. Il est donc nécessaire de pouvoir exprimer la courbure κ grâce aux autres variables afin de déterminer la tension superficielle. Une méthode [Brackbill 92] consiste à sommer les forces

de tension tangentielle à l'interface sur le contour ds d'un volume élémentaire, puis à exprimer la tension superficielle comme intégrale curviligne sur ds des termes $\sigma t(M)$ où t est une force de surface tangentielle à l'interface et $M \in ds$. A l'aide de cette définition, la courbure moyenne κ est égale à l'opposé de la divergence de la normale à l'interface. On obtient donc :

$$F_{TS} = -\sigma(\nabla \cdot n_i)(M)n_i \quad (2.11)$$

De plus, la normale à l'interface est également fonction de la fonction couleur C :

$$n_i = \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \quad (2.12)$$

Finalement, le terme de tension superficielle s'exprime seulement en fonction du coefficient de tension et de la fonction couleur C :

$$F_{TS} = \sigma \nabla \left(\frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \right) \cdot \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \quad (2.13)$$

Au final, le système d'équation à résoudre est le suivant :

$$\nabla u = 0 \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \nabla C = 0 \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla(\rho u u) = -\nabla p + \rho g + \nabla(\mu[\nabla u + \nabla^T u]) - \sigma \nabla \left(\frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \right) \cdot \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \quad (2.16)$$

Ce système permet de résoudre les inconnues (u, p, C) par une expression volumique des équations de mouvement en incompressible avec prise en compte des forces interfaciales sans la détermination explicite de la géométrie de la courbure de l'interface.

A la notion de la tension superficielle s'ajoute celle de l'angle de contact comme il a été mentionné dans le premier chapitre. Cet aspect est difficile à analyser, tant d'un point de vue expérimental que numérique. Le traitement du problème avec un modèle à un fluide n'est pas adapté à la prise en compte d'un angle de contact. En effet, les modèles classiquement utilisés et reposant sur un maillage mobile supposent que l'interface géométrique est définie correctement tout au long de l'étalement ou bien que des considérations thermodynamiques permettent de représenter l'angle de contact d'une façon précise. Certains auteurs [Lebaigue 99] s'appuient sur des considérations thermodynamiques (cf chapitre 1) pour prendre en compte l'angle de contact à travers les forces de tension variables entre

les différents milieux, calculées en fonction du carré du gradient de la masse volumique (modèle " phase field "). Le modèle à un fluide se basant à ce jour sur un coefficient de tension superficielle constant et une non connaissance de la géométrie de l'interface, ces techniques ne sont pas applicable dans notre cas.

[Triggvason 99] a exprimé dans un modèle à un fluide une tension superficielle variable pour prendre en compte la présence de surfactants, en considérant que le coefficient de tension superficielle suit une loi linéaire de la température ou de la concentration de surfactant :

$$\sigma = \sigma_0 - K(T - T_0) \quad (2.17)$$

où σ_0 et T_0 sont respectivement le coefficient de tension superficielle et la température de référence et K est une constante de thermocapillarité. Cette formulation traduit que lorsque la température augmente, la tension superficielle diminue.

La prise en compte de l'angle de contact reste encore très peu utilisée car difficile à mettre en œuvre numériquement, mais des considérations théoriques montrent que sous certaines gammes de nombres de Reynolds et de Weber ($We/\sqrt{Re} \gg 2$, voir section 1.1.), l'angle de contact a peu d'influence. Dans ce travail, nous ne prendrons pas en compte l'angle de contact qui peut intervenir.

2.1.3 Modélisation du substrat

Dans les paragraphes précédents, les équations de Navier-Stokes et d'advection permettent de résoudre l'écoulement de chacune des phases fluides du domaine. Mais le substrat quant à lui, bien que solide et sans vitesse, ne doit pas être traité différemment pour assurer la cohérence de la philosophie numérique utilisée. C'est pourquoi un terme supplémentaire est ajouté à l'équation de mouvement pour prendre en compte le caractère fixe du substrat, tout en considérant cet élément comme un fluide ou plutôt un milieu poreux. Il s'agit du terme de Brinkman Br adapté de la loi de Darcy et qui agit comme terme de pénalisation à travers la perméabilité de la zone [Arquis 84]:

$$Br = -\frac{\mu}{K}(u - u_0) \quad (2.18)$$

où μ est la viscosité et K la perméabilité du milieu, et u_0 une vitesse de référence. En attribuant une valeur de perméabilité K qui tend vers l'infini à chaque maille du domaine,

on assure un comportement fluide de la zone concernée, car ce terme devient nul. Par contre, lorsque la valeur de K tend vers 0, le terme Br devient prépondérant et impose une résolution dans le solveur qui mène à $u = u_0$. De cette manière, en imposant $u_0 = 0$ et $K \rightarrow 0$ dans la zone du substrat, ce dernier est considéré comme un solide de vitesse nulle, dans lequel aucun fluide ne peut pénétrer. Au final, l'équation de mouvement s'écrit dans tout le domaine d'étude :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla(\rho u u) = -\nabla p + \rho g + \nabla(\mu[\nabla u + \nabla^T u]) - \sigma \nabla \left(\frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \right) \cdot \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} - \frac{\mu}{K}(u - u_0) \quad (2.19)$$

2.1.4 Méthodes numériques de résolution

Dans le cas le plus général, le système d'équations précédent ne fait pas intervenir de solution analytique. L'outil numérique devient alors indispensable pour fournir des résultats approchés mais précis sur un domaine discrétisé à la fois en temps et en espace. Il existe de multiples façons de discrétiser les équations, [Patankar 80] a décrit les discrétisations les plus usuelles concernant les écoulements et les échanges thermiques.

Il existe deux types de méthodologies différentes pour résoudre les problèmes diphasiques. La première, dite approche lagrangienne, consiste à discrétiser un seul des deux fluides en présence, et considérer l'interface des deux fluides comme condition limite du problème. Les équations de Navier-Stokes dans ce domaine permettent de déterminer le mouvement de ce milieu sans prendre en compte l'autre fluide. Cela nécessite un maillage adaptatif qui suit les déformations de l'interface. L'intérêt de ce type de méthode est de fournir avec précision l'évolution de la surface libre en fonction du temps et grâce à un maillage évolutif, de raffiner localement pour améliorer la précision des phénomènes liés à l'interface. Les inconvénients de cette méthodologie résident dans le coût et le temps de calcul nécessaires à la reconstruction de l'interface et des conditions limites du système à chaque pas de temps. Le coût est d'autant plus fort que les déformations sont intenses. De plus, cette méthodologie n'est pas bien adaptée aux problèmes de rupture de fluide que l'on rencontre par exemple lors du splash qui génère des gouttes secondaires. Cette méthode est intéressante lors de la déposition de gouttes sur le substrat [Fukai 95] puisqu'elle autorise la prise en compte de l'angle de contact comme condition limite. En se basant sur des angles déterminés par voie expérimentale, les auteurs ont pu retrouver un comportement proche des phénomènes physiques. En appliquant cette technique sur

un maillage non structuré, [Waldvogel 96] ont simulé la dynamique et la thermique de l'impact d'une goutte sur le substrat en tenant compte d'une résistance thermique de contact sur une épaisseur finie entre les deux matériaux. Cette technique suppose de plus connue la condition limite de la surface libre de la goutte souvent prise comme adiabatique [Zhao 96b].

L'autre méthodologie est dite eulérienne. Elle consiste à discrétiser les équations sur le domaine entier qui englobe les deux fluides. Les conditions limites sont externes et n'ont pas de lien avec l'interface entre les deux fluides. L'avantage de cette méthode est de s'adapter parfaitement au maillage cartésien uniforme fixe, elle est donc moins coûteuse que la précédente. De plus, les phénomènes de rupture d'interface ne posent pas de problème de structure dans ce type de méthodologie. Des simulations ont été réalisées grâce à ce principe sur l'impact séquentiel de deux gouttes, la seconde s'écrasant sur le splot stabilisé formé par la première [Ghafouri-Azar 02]. Cependant, de par sa nature, cette méthode nécessite de déterminer la position et la géométrie de l'interface, grâce à l'équation d'advection au travers de la variable C . Comme toute équation, celle-ci ne peut donc qu'approcher la position de l'interface.

Le code de calcul AQUILON réalisé au laboratoire MASTER permet de résoudre les équations précédentes avec un modèle à un fluide. L'originalité repose sur la discrétisation, de type volumes finis, effectuée sur un maillage cartésien fixe à deux grilles décalées où les équations de Navier-Stokes et de l'énergie sont découplées (figure 2.1). Chaque volume de contrôle est centré sur le nœud scalaire et les vitesses se situent sur les faces du volume de contrôle. Les bilans de flux sur les volumes de contrôle s'écrivent ainsi d'une manière naturelle.

Discrétisation des équations

– Schéma temporel

Notre problème étant instationnaire, les équations sont discrétisées implicitement en temps par un schéma de Gear d'ordre 2 lorsque l'écoulement est instationnaire. De façon générale, la discrétisation de la dérivée temporelle d'une variable f à déterminer au pas de temps $n + 1$ s'écrit :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)^{n+1} = \frac{a_1 f^{n+1} + a_2 f^n + a_3 f^{n-1}}{\Delta t} \quad (2.20)$$

où a_1 , a_2 et a_3 sont des coefficients à définir.

Pour un schéma d'Euler, ces coefficients sont définis par $a_1 = 1$ et $a_2 = -1$ et $a_3 = 0$.

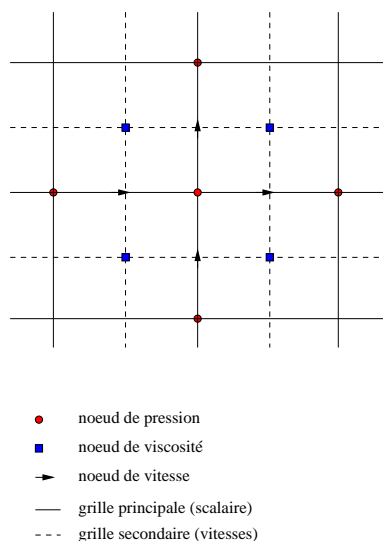


Figure 2.1 : Représentation du maillage décalé en pression et vitesse

Pour un schéma de Gear, ces coefficients sont définis par $a_1 = 3/2$ et $a_2 = -2$ et $a_3 = 1/2$.

– Linéarisation des équations

Les équations de Navier-Stokes sont linéarisées en écrivant les termes non linéaires à deux instants différents n et $n + 1$. De cette manière, les équations s'expriment par :

$$\rho^n \left(\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + (u^n \cdot \nabla) u^{n+1} \right) = -\nabla(p^{n+1} + \frac{2}{3}\rho^n k^n) + \rho^n g + \nabla \cdot \mu (\nabla u^{n+1} + \nabla^T u^{n+1}) - \frac{\mu}{K} u^{n+1} \quad (2.21)$$

– Découplage pression/vitesse

Dans les problèmes diphasiques, une des techniques fréquemment utilisée pour résoudre le couplage vitesse-pression est la méthode de projection [Chorin 68]. Dans cette méthode, on résout les équations de Navier-Stokes en prenant la pression au temps précédent comme référence, et en ajoutant la contrainte à divergence nulle du champ de vitesse. Cependant, cette méthode n'est pas adaptée à l'impact de gouttes, car un rapport de masses volumiques important empêche cette méthode de converger (de l'ordre de $\rho_2/\rho_1 > 700$). Une méthode mieux adaptée est celle du Lagrangien augmenté [Fortin 82] développée au laboratoire MASTER ([Vincent 99b] [Glockner 00] [Nicolas 97]) qui permet de découpler les champs de pression et de vitesse. Dans cette méthode itérative de type prédiction

correction, on résout les équations de Navier-Stokes sous la forme 2.21 en ajoutant la contrainte d'incompressibilité (divergence nulle). Entre deux itérations temporelles, on résout L itérations de Lagrangien augmenté, présenté par l'algorithme suivant :

$$\rho^n \left(\frac{u^{n+l/L} - u^{n+(l-1)/L}}{\Delta t} + (u^{n+(l-1)/L} \cdot \nabla) u^{n+l/L} \right) = -\nabla p^{n+(l-1)/L} + \rho^n g + \nabla \cdot (\mu (\nabla u^{n+l/L} + \nabla^T u^{n+l/L})) + dr \nabla \cdot \nabla u^{n+l/L} - \frac{\mu}{K} u^{n+l/L} \quad (2.22)$$

$$p^{n+l/L} = p^{n+(l-1)/L} - dp \nabla \cdot u^{n+l/L} \quad (2.23)$$

Les paramètres dp et dr des équations précédentes contrôlent l'incompressibilité. Lorsque $dp = dr$ et $0 < dr \ll 1$, on obtient une méthode de résolution hybride alors que $dp = dr$ et de l'ordre de l'unité procurent une méthode de Lagrangien augmenté.

- Discrétisation spatiale

La discrétisation des équations s'effectue sur le maillage cartésien par volumes finis [Patankar 80]. Les équations sont intégrées sur un volume de contrôle centré au nœud de chaque maille. Cette technique nécessite de connaître les variables scalaires (ou potentiels) calculées au centre de volumes de contrôle et les variables vectorielles (ou flux) dont les composantes sont calculées sur les faces de chaque volume de contrôle. Pour limiter les interpolations et les oscillations en pression, la discrétisation est réalisée sur maillage décalé en pression (grille principale) et vitesse (grille secondaire sur les faces des volumes de contrôle).

- Conditions limites

Lors de l'impact de gouttes, les conditions limites sont variées en terme de vitesse et de température. Par défaut, le code possède des conditions limites de type Neumann, c'est à dire composante normale du flux nulle à la limite. Afin d'exprimer les autres conditions limites disponibles sans modifier le type par défaut, un terme supplémentaire est attribué aux équations de mouvement et de l'énergie sous la forme $bi_f(f - f_0)$ [Parneix 95] où f est la variable considérée. Lorsque le coefficient bi_f est nul, le terme supplémentaire est nul et la condition limite redevient la condition de Neumann. Par contre, lorsque bi_f tend vers l'infini, le solveur va attribuer à f la valeur f_0 . Ainsi, on retombe sur une condition de valeur imposée ou condition de dirichlet. Enfin, par un jeu bien choisi de valeurs de bi_f et de f_0 , cela revient à une condition de Fourier.

Dans l'équation de mouvement, ce terme est $bi_u(u - u_0)$ et dans l'équation de l'énergie,

ce terme est $bi_T(T - T_0)$. A l'intérieur du domaine, ce terme permet de fixer par exemple une température ou une vitesse imposée dans une zone.

– Résolution

Les systèmes linéaires sont ensuite résolus par la méthode des gradients conjugués Bi-CGStab [Van der Vorst 92] avec un préconditionnement MILU ou ILU.

2.1.5 Méthodes numériques de l'équation d'advection

Il existe différentes approches pour résoudre les écoulements à interface sur maillage fixe. La première est appelée la méthode des marqueurs (MAC ou Marker and Cell). Elle consiste à " semer " des marqueurs sur l'interface à l'instant initial. La résolution des équations de Navier-Stokes et le mouvement des marqueurs permet de déterminer l'évolution de l'interface. Une interpolation entre les marqueurs permet de reconstruire l'interface.

Un autre schéma de résolution de l'équation d'advection est nommée VOF (Volume Of Fluid) et s'effectue en trois étapes. En fonction de la distribution de la fonction couleur C , l'interface est reconstruite comme discontinuité de cette fonction. Ensuite, les équations de Navier-Stokes fournissent le champ de vitesse, puis grâce au champ de vitesse, la nouvelle distribution de la fonction couleur C est calculée par l'équation d'advection. Une telle méthode, avec un schéma de grand ordre de type LAX-WENDROFF, permet une bonne détermination de l'interface avec une diffusion de la fonction couleur C sur peu de mailles, mais favorise les oscillations numériques à cause des discontinuités importantes de propriétés des deux fluides et la rupture du fluide (apparition de gouttes secondaires). Cette méthode fournit des résultats satisfaisants lors de l'impact d'une goutte de métal sur substrat sec et de la comparaison à un dispositif expérimental [Pasandideh-Fard 98]. Un autre schéma basé sur la détermination de la fonction couleur C est le schéma TVD SUPERBEE (Total Variation Diminishing) de second ordre. Lorsque la distribution de la fonction couleur C est déterminée par l'équation d'advection, C est reconstruite par une loi linéaire dont la pente est calculée grâce à la connaissance de C^{n-1} . Ce schéma permet de reconstruire l'interface d'une façon géométrique et non mathématique, mais en contre partie, la diffusion numérique de C est plus importante que dans l'utilisation du schéma VOF.

L'utilisation d'un schéma d'advection nécessite quelques précautions d'emploi liées à l'évolution de la déformation de la surface libre. Outre la diffusion numérique qui influence la

précision de la description de l'interface, il convient de s'assurer que la surface libre ne possède pas de discontinuités et que l'interpolation linéaire de C reste valide. Dans le cas présent, il s'agit de s'assurer que le diamètre initial de la goutte possède au moins une trentaine de mailles, ce qui suppose que l'interface est décrite avec suffisamment de nœuds pour éviter les irrégularités et pour suivre au cours du temps une évolution cohérente.

Comparaison des schémas d'advection

Les schémas d'advection sont nécessaires au transport de l'interface. Mais la façon dont on décrit cette interface au cours du temps influence la qualité de la simulation. Des simulations sont réalisées en modifiant le schéma de l'équation d'advection.

Afin d'évaluer l'efficacité de chacun des deux schémas d'advection, l'impact d'une goutte d'indium en 2D cartésien est réalisé sur le même cas. L'objectif est de déterminer les avantages et défauts de chaque schéma. La vitesse d'impact $V_i = 0,5m.s^{-1}$ assure la déposition de la goutte. La figure 2.4 illustre l'impact de la goutte au même instant avec utilisation des schémas VOF ou TVD.

On remarque que lors de la simulation de l'impact avec le schéma VOF, la fonction couleur – et donc l'interface goutte-air – est peu diffuse, sur une ou deux mailles, ce qui améliore la définition de l'interface à $C = 0,5$, interpolée par une loi linéaire. Cependant, le schéma VOF a tendance à morceler la goutte lorsque la fonction couleur est trop faible dans certaines mailles. L'impact de la goutte s'accompagne de gouttes secondaires issues d'instabilités purement numériques puisque la gamme de nombres de Reynolds et de Weber assurent théoriquement un comportement de déposition sans goutte secondaire (figure 2.2).

Lorsque la simulation est réalisée à l'aide du schéma TVD, la fonction couleur a tendance à diffuser sur une zone large de plusieurs mailles, l'interface est donc définie avec une moins bonne précision. De plus, ce schéma a tendance à créer des oscillations parasites à l'interface. Si la vitesse est trop faible, ces oscillations créent des instabilités qui détériorent l'écoulement de la goutte. La simulation numérique ne reproduit plus fidèlement l'étalement de la goutte. Par contre, aucune rupture dans le liquide n'est observée (figure 2.3).

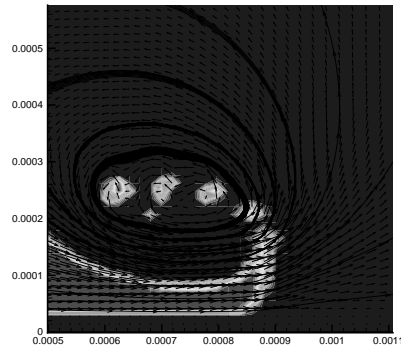


Figure 2.2 : *Morcellement de goutte par schéma VOF*

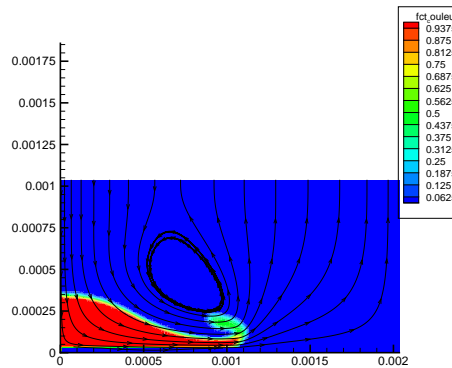


Figure 2.3 : *Étalement de goutte par schéma TVD*

Les résultats en terme de rayon d'étalement et de hauteur de goutte adimensionnés montrent des comportements similaires pour les deux simulations faisant appel respectivement aux schémas VOF et TVD. Ainsi, le transport de l'interface est bien réalisé dans les deux cas, mais la diffusion et les instabilités numériques induites par TVD limitent l'utilisation de ce schéma à cause du manque de précision nécessaire pour faire intervenir des équations utilisant la notion d'interface (voir section 2.1.6 consacrée à la solidification). A l'inverse, VOF génère des gouttes secondaires issues de la résolution numérique lorsque l'interface s'allonge et les contraintes deviennent trop importantes. Malgré tout, il semble que le schéma VOF offre dans notre cas de meilleures possibilités en vue d'ajouter au système les équations de la thermique qui vont se baser sur la description de l'interface.

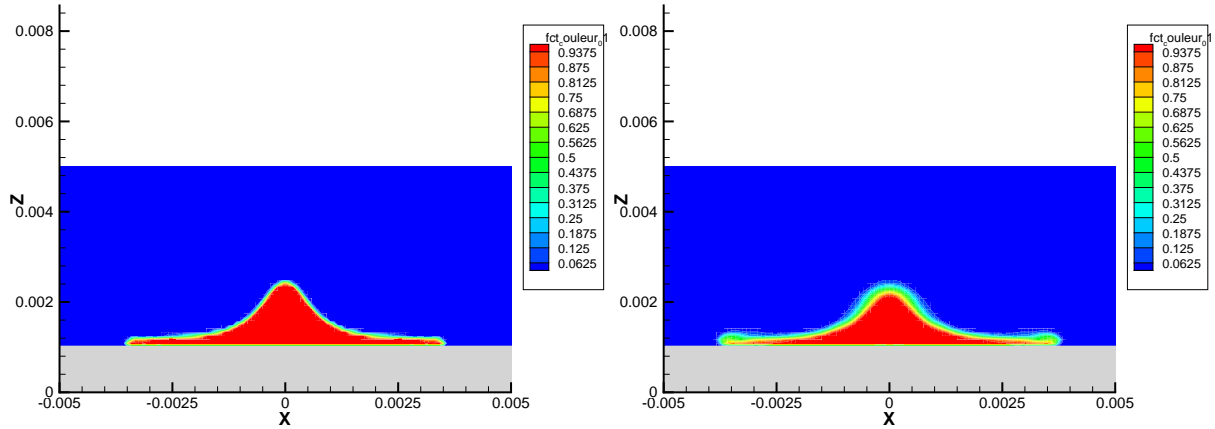


Figure 2.4 : Comparaison des écoulements par traitement VOF puis TVD

2.1.6 Equation de l'énergie

Les techniques existantes

Il existe diverses méthodes pour déterminer le champ thermique d'un milieu avec prise en compte de la solidification. Certains auteurs [Delaunay 90] définissent le milieu qui change de phase comme deux domaines séparés par une interface qui correspond au front de solidification. Le champ thermique de chacun des milieux est résolu séparément et de manière explicite, et l'interface correspond à une condition limite interne au système, définie par la conservation des flux :

$$\lambda_s \nabla T_s \cdot n - \lambda_l \nabla T_l \cdot n = \rho L_f V_f \cdot n \quad (2.24)$$

Les indices l et s représentent respectivement les phases liquide et solide et V_f est la vitesse du front de solidification. La difficulté de cette méthodologie repose sur la nécessité de déterminer la position du front de solidification, ce qui s'effectue souvent par la méthode de Landau sur un maillage évolutif [Delaunay 85]. De plus, elle s'adapte mal aux cas 2D et 3D.

Une deuxième méthode, implicite en temps, est appelée méthode du Cp apparent. Dans l'équation de l'énergie, le terme source S_c correspond au changement de phase liquide / solide. Il s'exprime usuellement comme fonction de la fraction solide f_s et du temps :

$$S_c = \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (2.25)$$

où L_f est la chaleur latente de fusion. Ce terme est réarrangé pour faire apparaître la température :

$$\rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} = \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.26)$$

Dans l'équation de l'énergie sans terme source, le changement de phase est pris en compte via le terme de capacité apparente:

$$Cp_{app} = C_p + L_f \frac{\partial f_s}{\partial T} \quad (2.27)$$

En exprimant la fraction solide f_s en fonction de la température, la capacité calorifique apparente est totalement décrite. Cette méthode est efficace dans les cas où la solidification s'effectue à vitesse modérée, mais elle devient inefficace lorsque la solidification est trop rapide. Elle nécessite en effet de définir un intervalle de température sur lequel s'effectue le changement de phase. La précision de ce type de technique peut être quantifiée par le nombre de Stefan Ste qui exprime le rapport entre chaleur sensible et chaleur latente :

$$Ste = \frac{C_p \Delta T}{L_f} \quad (2.28)$$

Un autre type de méthode - que nous utiliserons - est celui à terme source [Bertrand 99]. A l'équation de l'énergie, on ajoute un terme qui prend en compte l'absorption ou le dégagement de chaleur par changement de phase. Cette technique s'adapte bien aux maillages fixes et fournit une bonne précision.

2.1.7 Description de la méthode

La méthode des volumes finis associée à l'intégration de l'équation de l'énergie ramène la discrétisation à un bilan de flux sur les frontières des volumes de contrôle. La technique utilisée correspond à la méthode proposée par Voller [Voller 90] qui introduit la fraction liquide nodale $f_l \in [0; 1]$, variable inconnue afin de réécrire l'enthalpie en fonction de la température de fusion T_f :

$$h(T) = \int_{T_{ref}}^T C_p(\theta) d\theta + f_l L_f \quad (2.29)$$

La résolution, basée sur la méthode " New Source " [Voller 90] repose sur un algorithme itératif de type point fixe sur la température où le nœud qui change de phase est ramené et maintenu à la température de changement de phase T_f grâce au terme source. Ce calcul

est réitéré jusqu'à la convergence de la température avec un terme source égal à la chaleur latente.

L'équation à discrétiser est de la forme :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (2.30)$$

avec $f_s = F(T)$

Le terme source S_c est discrétisé par :

$$S_c = \rho L_f \frac{f_s^{n+\frac{k+1}{K}} - f_s^n}{\Delta t} \quad (2.31)$$

où K représente le nombre d'itérations internes. Le terme source étant fonction de la température, il est linéarisé :

$$f_s^{n+\frac{k+1}{K}} = f_s^{n+\frac{k}{K}} + \left(\frac{dF}{dT}\right)^{n+\frac{k}{K}} (T^{n+\frac{k+1}{K}} - T^{n+\frac{k}{K}}) \quad (2.32)$$

Si de plus on force la température à tendre vers la température de changement de phase $T^{n+\frac{k+1}{K}} = T_f$, l'équation de l'énergie discrétisée devient :

$$\left(\frac{\rho C_p}{\Delta t} - \frac{\rho L_f}{\Delta t} \left(\frac{dF}{dT}\right)^{n+\frac{k}{K}}\right) T^{n+\frac{k+1}{K}} - \nabla \cdot (\lambda \nabla T^{n+\frac{k+1}{K}}) = \frac{\rho L_f}{\Delta t} (f_s^{n+\frac{k+1}{K}} - f_s^n) - \frac{\rho L_f}{\Delta t} \left(\frac{dF}{dT}\right)^{n+\frac{k}{K}} T_f + \frac{\rho C_p}{\Delta t} T^n \quad (2.33)$$

avec :

$$\frac{dF}{dT} \rightarrow -\infty \quad \text{si } 0 < f_s^{n+\frac{k}{K}} < 1 \quad (2.34)$$

$$\frac{dF}{dT} = 0 \quad \text{si } f_s^{n+\frac{k}{K}} = 0 \text{ ou } 1 \quad (2.35)$$

Cette procédure permet de découpler les champs de température et de fraction solide calculés au même instant.

Le système linéaire obtenu est résolu par un schéma centré [Patankar 80] et se présente sous la forme :

$$a_P T_P^{n+\frac{k+1}{K}} = -a_W T_W^{n+\frac{k+1}{K}} - a_E T_E^{n+\frac{k+1}{K}} - a_N T_N^{n+\frac{k+1}{K}} - a_S T_S^{n+\frac{k+1}{K}} + b_P T_P^n - c_P T_f + d_P (f_s^{n+\frac{k+1}{K}} - f_s^n) \quad (2.36)$$

Le fait de considérer $\frac{dF}{dT} \rightarrow -\infty$ lorsque le nœud concerné change de phase (numériquement, on impose une valeur de -10^{20}) permet de négliger la chaleur sensible dans le

coefficient a_P . Ainsi, lorsqu'un nœud est sujet au changement de phase, l'équation 2.36 devient :

$$0 = -a_W T_W^{n+\frac{k+1}{K}} - a_E T_E^{n+\frac{k+1}{K}} - a_N T_N^{n+\frac{k+1}{K}} - a_S T_S^{n+\frac{k+1}{K}} + b_P T_P^n + d_P (f_s^{n+\frac{k+1}{K}} - f_s^n) \quad (2.37)$$

soit :

$$f_s^{n+\frac{k+1}{K}} = f_s^n + \frac{a_W T_W^{n+\frac{k+1}{K}} + a_E T_E^{n+\frac{k+1}{K}} + a_N T_N^{n+\frac{k+1}{K}} + a_S T_S^{n+\frac{k+1}{K}} - b_P T_P^n}{d_P} \quad (2.38)$$

De même, lorsqu'on soustrait membre à membre les équations 2.36 et 2.37, on obtient une équation qui relie les fractions solides aux itérations du point fixe $n + (k + 1)/K$ et $n + k/K$:

$$f_s^{n+\frac{k+1}{K}} = f_s^n - \frac{a_P T_P^{n+\frac{k}{K}} + c_P T_f}{d_P} \quad (2.39)$$

A chaque itération interne k , la résolution de l'équation de l'énergie fournit $f_s^{n+\frac{k+1}{K}}$ et $T^{n+\frac{k+1}{K}}$. La convergence est atteinte lorsque les critères sur la fraction solide et la température sont vérifiés : $\|f_s^{n+\frac{k+1}{K}} - f_s^{n+\frac{k}{K}}\| < \epsilon_f$ et $\|T^{n+\frac{k+1}{K}} - T^{n+\frac{k}{K}}\| < \epsilon_T$.

2.2 Cas de validation

2.2.1 Validation de l'impact d'une goutte

La résolution des équations précédentes a été réalisée séparément sur des cas analytiques. Il n'existe pas de formulation analytique qui permette de décrire avec précision l'évolution de l'étalement d'une goutte, il est nécessaire de poser des hypothèses simplificatrices pour obtenir des expressions de référence. Afin de valider la simulation de l'impact de gouttes, une comparaison avec la formule analytique du rayon maximal d'étalement est effectuée (équation 2.40). Alors qu'aucun modèle concernant l'angle de contact n'est ajouté, il en apparaît un d'origine numérique. Celui-ci est mesuré graphiquement afin d'en tenir compte dans la solution analytique 2.40.

$$\xi_{max} = \sqrt{\frac{We + 12}{3(1 - \cos(\theta)) + 4(We/\sqrt{Re})}} \quad (2.40)$$

La simulation réalisée dans cette partie correspond à l'impact d'une goutte sur un substrat sec en coordonnées axisymétriques. Dans ce type de configuration, l'axe de la

goutte est une condition limite de type symétrie, et la limite au niveau de substrat est une condition de non glissement (vitesse nulle sur la surface d'impact). En vis-à-vis de l'axe de symétrie, la condition est à nouveau un non glissement (paroi), la goutte ne peut donc pas s'étaler à l'infini, mais les dimensions du domaines sont prises telles que ce type de condition n'affecte en rien la dynamique: en théorie, la goutte n'atteint pas cette frontière car les valeurs de Re et We sont telles que ξ_{max} (équation 2.40) soit inférieur à la taille du domaine. La dernière limite est de type Neumann (au-dessus de la goutte) afin d'assurer la conservation de la masse par entrée et sortie d'air. Les vitesses par définition sont normales à la frontière.

Le domaine d'étude est haut de $3.10^{-3}m$ et large de $4.10^{-3}m$. La goutte d'eau dont les caractéristiques sont données en tableau 2.2.1 possède une vitesse initiale de $1m/s$ et un diamètre de $2.10^{-3}m$. Dans ces conditions, les nombres de Reynolds et de Weber sont: $Re = 2000$ et $We = 40$. Le maillage est exponentiel radialement avec un pas d'espace

| Masse volumique ($kg.m^{-3}$) | Viscosité ($Pa.s$) | Tension de surface ($N.m$) |
|---------------------------------|----------------------|------------------------------|
| 1000 | 10^{-3} | 0,05 |

Tableau 2.1 : *Caractéristiques de l'eau de la goutte pour la validation*

croissant. Le pas de temps est constant et égal à $1.10^{-6}s$ dans toutes les simulations. On résoud les équations de Navier-Stokes en incompressible avec la méthode du Lagrangien augmenté et un schéma hybride, et l'équation d'advection dont le schéma de résolution est TVD. La solution analytique de référence possède plusieurs hypothèses simplificatrices comme par exemple une forme d'étalement cylindrique alors que dans les simulations numériques, il existe un bourrelet périphérique et la goutte ne s'étale pas avec une épaisseur homogène. Cependant, cette formulation analytique permet d'estimer l'ordre de grandeur du degré d'étalement. Les simulations numériques fournissent un degré d'étalement de 2,2 et la solution analytique fournit un degré d'étalement estimé à 2,4, ce qui correspond à une erreur relative de 8%. Pasandideh-Fard *et al.* [Pasandideh-Fard 96] considèrent que leurs résultats comparés à cette expression théorique sont justes, pour une erreur inférieure à 15%. Outre l'imprécision numérique, les hypothèses nécessaires à l'obtention d'une expression analytique ne permettent pas de valider plus profondément le degré d'étalement. L'évaluation du rayon d'étalement reste cependant cohérente.

Des simulations seront également réalisées dans un domaine 2D cartésien. En effet,

bien que les coordonnées axisymétriques soient adaptées à l'impact d'une goutte, la mise en place de particules fluides réparties spatialement et s'écrasant sur le substrat en même temps interdit ce type de coordonnées. Le calcul 3D quant à lui sera intéressant mais nécessitera une étude 2D pour mettre en place correctement les paramètres numériques de la simulation et pour localiser et analyser les zones singulières de l'écoulement (pièges d'air, surface libre, etc.). Bien que la simulation 2D ne restitue pas fidèlement les valeurs de degré d'étalement des gouttes, il est nécessaire de s'assurer que l'impact est qualitativement bien restitué. Pour cela, la méthode de bilan d'énergies est à nouveau exploitée mais sur des éléments en 2D, pour évaluer le degré d'étalement d'une goutte apparentée donc à un cylindre. Dans les calculs qui suivent, la dimension transversale est ramenée à l'unité. Nous l'omettrons dans les expressions, mais sa présence est nécessaire pour la cohérence des unités.

Les énergies de surface et cinétique de la goutte avant impact, notées respectivement E_{c1} et E_{s1} sont:

$$E_{c1} = \left(\frac{1}{2}\rho V_0^2\right)\left(\pi\frac{D_0^2}{4}\right) \quad (2.41)$$

$$E_{s1} = \pi D_0 \gamma \quad (2.42)$$

Au moment de l'étalement maximum, on obtient:

$$E_{c2} = 0 \quad (2.43)$$

$$E_{s2} = D_{max} \gamma (1 - \cos\theta) \quad (2.44)$$

Par les mêmes considérations que [Pasandideh-Fard 96], en supposant que la goutte s'étale sous forme d'une "barre", la conservation des débits nous donne:

$$V_0 d = 2h V_r \quad (2.45)$$

Par conservation de la masse dans cet écoulement incompressible:

$$\pi\frac{D_0^2}{4} = h D_{max} \quad (2.46)$$

Pendant l'impact, d varie de 0 à D_0 . En considérant une valeur moyenne de $\frac{D_0}{2}$ et avec les expressions précédentes, on obtient:

$$\frac{dD}{dt} = 2V_r = 2V_0\frac{D_0}{4h} = \frac{2V_0}{\pi}\frac{D_{max}}{D_0} \quad (2.47)$$

Et donc:

$$\frac{D}{D_{max}} = \frac{2V_0}{\pi D_0} t \quad (2.48)$$

Le temps d'étalement maximum est atteint lorsque $D = D_{max}$, soit:

$$t_{max} = \frac{\pi D_0}{2V_0} \quad (2.49)$$

L'énergie perdue en dissipation visqueuse est définie par:

$$W = \int_0^{t_c} \int_{\Omega} \Phi d\Omega dt \quad (2.50)$$

avec $\phi = \mu \left(\frac{V_0}{\delta}\right)^2$ et la couche limite $\delta = 2\frac{D_0}{\sqrt{Re}}$

En prenant $t_c = \frac{\pi D_0}{2V_0}$ et $\Omega = \delta D_{max}$ on obtient:

$$W = \frac{\rho V_0^2}{\sqrt{Re}} \frac{\pi}{4} D_{max} D_0 \quad (2.51)$$

Par conservation de l'énergie: $E_{c1} + E_{s1} = E_{c2} + E_{s2} + W$ ce qui amène à:

$$\xi_{max} = \frac{D_{max}}{D_0} = \frac{\pi + \frac{\pi}{8} We}{(1 - \cos\theta) + \frac{\pi}{4} \frac{We}{\sqrt{Re}}} \quad (2.52)$$

Si $We \gg 8$ alors $\xi_{max} = \frac{\frac{\pi}{8} We}{(1 - \cos\theta) + \frac{\pi}{4} \frac{We}{\sqrt{Re}}}$

Si de plus $We \gg \sqrt{Re}$ alors l'angle de contact n'a plus d'influence sur l'étalement maximum et

$$\xi_{max} = 0,5 Re^{0,5} \quad (2.53)$$

Sous ces hypothèses, si on compare les résultats analytiques 2D cartésien et 3D, nous obtenons que:

$$\frac{\xi_{max,2D}}{\xi_{max,3D}} = \frac{0,5 Re^{0,5}}{0,5 Re^{0,25}} = Re^{1/4} \quad (2.54)$$

Le rapport qui lie les deux degrés d'étalement est fonction seulement du nombre de Reynolds. De même, en comparant les hauteurs de splat lors de l'étalement maximum:

$$\frac{h_{max,2D}}{h_{max,3D}} = \frac{\frac{\pi}{4} D_0 \frac{1}{\xi_{max,2D}}}{\frac{2}{3} D_0 \frac{1}{\xi_{max,2D}^2}} = \frac{3\pi}{8} \frac{\xi_{max,2D}}{\xi_{max,3D}} \xi_{max,3D} \quad (2.55)$$

Grâce à l'expression précédente:

$$\frac{h_{max,2D}}{h_{max,3D}} = \frac{3\pi}{16} \quad (2.56)$$

Le rapport des hauteurs est donc indépendant du nombre de Reynolds. Enfin, en comparant les temps adimensionnés d'étalement:

$$\frac{t_{max,2D}^*}{t_{max,3D}^*} = \frac{\pi/2}{8/3} = \frac{3\pi}{16} \quad (2.57)$$

Le rapport des temps d'étalement n'est pas fonction du nombre de Reynolds et sa valeur correspond à celle du rapport des hauteurs.

La simulation numérique réalisée correspond à l'impact d'une goutte ($\rho = 7300 \text{ kg.m}^{-3}$ et $\mu = 1,35.10^{-3} \text{ Pa.s}$) de 2mm de diamètre, d'une vitesse initiale de $0,1 \text{ m.s}^{-1}$ et une tension superficielle de $0,005 \text{ N.m}^{-1}$. Les nombres de Reynolds et de Weber associés à cette simulation sont donc $Re = 1081$ et $We = 2,9$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5.10^{-6} \text{ s}$ et le pas d'espace est régulier et égal à $\Delta x = 3,34.10^{-3} \text{ m}$ sur un domaine de 3 mm sur 5 mm . Le degré maximal atteint une valeur de $\xi_{max,num} = 2,17$ à l'instant adimensionné $t_{max,num}^* = 1,375$. L'expression analytique quant à elle fournit $\xi_{max,num} = 2,07$ et $t_{max,num}^* = 1,571$, ce qui donne donc des erreurs relatives de $2,4\%$ sur le degré d'étalement et de $4,7\%$ sur le temps adimensionné correspondant. Les résultats sont donc cohérents avec l'expression analytique, même si les erreurs relatives proviennent de simplifications par voie analytique que l'on ne peut pas prendre en compte numériquement.

2.2.2 Problème de Neumann

On considère un milieu semi-infini d'indium initialement liquide. L'objet de cette validation est de vérifier que la vitesse de solidification du milieu est conforme aux résultats analytiques.

La température initiale est uniforme et choisie égale à $T_0 = 160^\circ \text{C}$ et la température en

condition limite est nulle : $T(x = 0, t) = 0$. Le système est le suivant :

$$\begin{aligned}
\rho_s C_{p_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} - \lambda_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} &= 0 \\
\rho_l C_{p_l} \frac{\partial T_l}{\partial t} - \lambda_l \frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2} &= 0 \\
T_s(x = 0, t) &= 0 \\
T_s(x = s(t), t) &= T_l(x = s(t), t) \\
-\lambda_s \left. \frac{\partial T_s}{\partial x} \right|_{x=s} &= -\lambda_l \left. \frac{\partial T_l}{\partial x} \right|_{x=s} + \rho_s L_f \frac{\partial s}{\partial t} \\
T(x \rightarrow +\infty, t) &= T_0 \\
T(x, t = 0) &= T_0
\end{aligned}$$

Selon la même méthode de résolution que précédemment, on obtient :

$$\begin{aligned}
T_s(x, t) &= A \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{a_s t}} \\
T_l(x, t) &= T_0 - B \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{a_l t}}
\end{aligned}$$

L'égalité des températures à l'interface des deux phases implique :

$$A \operatorname{erf} \frac{s(t)}{2\sqrt{a_s t}} = T_0 - B \operatorname{erfc} \frac{s(t)}{2\sqrt{a_l t}} = T_f \quad (2.58)$$

Cette relation doit être vérifiée à chaque instant t . Ceci n'est possible que si $s(t)$ est proportionnel à \sqrt{t} . Ce terme peut donc être mis sous la forme :

$$s(t) = 2\xi\sqrt{a_s t} \quad (2.59)$$

De plus,

$$\frac{\partial T_s}{\partial x} = \frac{A}{2\sqrt{a_s t}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{2\sqrt{a_s t}}\right)^2} \quad (2.60)$$

$$\frac{\partial T_l}{\partial x} = \frac{B}{2\sqrt{a_l t}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{2\sqrt{a_l t}}\right)^2} \quad (2.61)$$

Le bilan à l'interface solide-liquide donne :

$$\lambda_s A e^{-\xi^2} - \lambda_l \sqrt{\frac{a_s}{a_l}} B e^{-\frac{a_s}{a_l} \xi^2} = \rho_s L_f a_s \sqrt{\pi} \xi \quad (2.62)$$

De plus, par la relation précédente :

$$\begin{aligned} A &= \frac{T_f}{\operatorname{erf}\xi} \\ B &= \frac{T_0 - T_f}{\operatorname{erfc}\xi \sqrt{\frac{a_s}{a_l}}} \end{aligned} \quad (2.63)$$

En introduisant ces valeurs, on obtient la relation finale :

$$\frac{e^{-\xi^2}}{\operatorname{erf}\xi} - \frac{\lambda_l}{\lambda_s} \sqrt{\frac{a_s}{a_l}} \frac{T_0 - T_f}{T_f} \frac{e^{-\frac{a_s}{a_l}\xi^2}}{\operatorname{erfc}\xi \sqrt{\frac{a_s}{a_l}}} = \frac{L\sqrt{\pi}}{Cp_s T_f} \xi \quad (2.64)$$

En résolvant cette équation transcendante, on obtient la valeur de ξ , puis les champs de température :

$$\begin{aligned} T_s(x, t) &= \frac{T_f}{\operatorname{erf}\xi} \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{a_s t}} \\ T_l(x, t) &= T_0 - \frac{T_0 - T_f}{\operatorname{erfc}\xi \sqrt{\frac{a_s}{a_l}}} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{a_l t}} \end{aligned}$$

Température limite: $T = 0^\circ\text{C}$

Température initiale: $T_0 = 160^\circ\text{C}$

La simulation numérique illustrée en figure 2.5 est réalisée pour un maillage cartésien régulier de pas d'espace de $\Delta x = 1.10^{-3}m$ et un pas de temps de $\Delta t = 2.10^{-1}s$. La résolution analytique de l'équation transcendante précédente avec le jeu de paramètres ci-dessus mène à une valeur de ξ de 0,67, d'où $A = 238$ et $B = 10$. Ce calcul amène à une position de front de solidification numérique et semi-analytique que l'on peut comparer sur la figure suivante.

Des simulations effectuées avec un pas de temps de $\Delta t = 2.10^{-1}s$ et un maillage de 8x8 à 128x8 sont inscrites dans le tableau 2.2. L'ordre de convergence est de 1.

2.2.3 Fusion d'un domaine solide dans un bain liquide

Il s'agit de vérifier si le changement de phase solide-liquide est bien pris en compte. Dans un domaine 2D, fermé adiabatique, on initialise un domaine solide (carré de côté r) dans un domaine liquide. Par transferts thermiques, la phase solide va fondre ou solidifier la phase liquide, pour atteindre un volume final constant, et une température d'équilibre. L'objectif est de vérifier que ces deux paramètres sont cohérents avec l'analyse théorique de Voller.

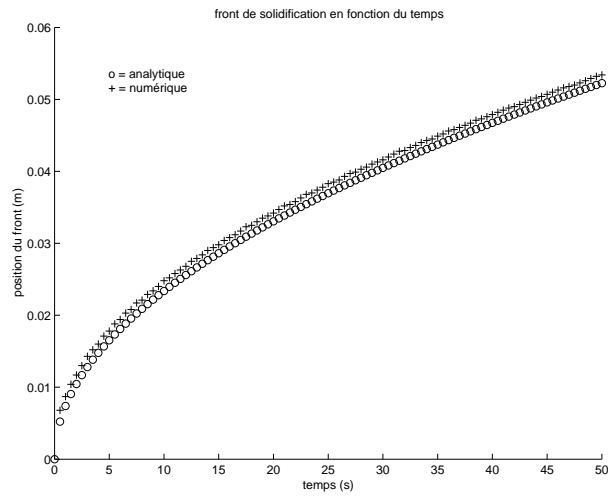


Figure 2.5 : Position du front de solidification dans le problème de Neumann

| Maillage | ξ_{num} | erreur sur ξ |
|----------|-------------|------------------|
| 8 | 0,72 | 8,0% |
| 16 | 0,69 | 2,3% |
| 32 | 0,68 | 1,3% |
| 64 | 0,67 | 0,4% |
| 128 | 0,67 | 0,4% |

Tableau 2.2 : Comparaisons ξ analytique et résultat numérique

– Formulation analytique

Le domaine d'étude est un carré de côté L , soit un volume total de $V_{tot} = L * L * 1$. Initialement, la phase solide est un carré de côté r , soit un volume de $V_{g,i} = r^2 * 1$. Le volume liquide initial est donc: $V_{e,i} = V_{tot} - V_{g,i}$.

Le solide est initialement à température $T_{g,i}$, et le liquide à $T_{e,i}$.

Le système étant isolé, toute l'énergie est conservée.

Initialement, l'enthalpie du système est la suivante:

$$\rho_g C_{pg} T_{g,i} V_{g,i} + \rho_e C_{pe} T_{e,i} V_{e,i} \quad (2.65)$$

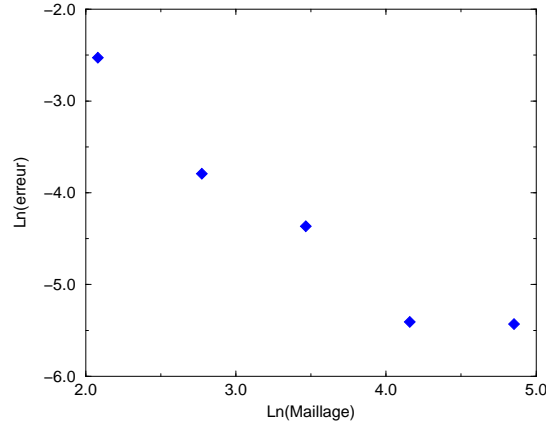


Figure 2.6 : *Convergence du problème de Neumann*

A l'équilibre, tout le domaine est à la même température T_m . Les énergies des deux phases sont:

$$\rho_g C_{pg} T_m V_{g,f} + \rho_e C_{pe} T_m V_{e,f} \quad (2.66)$$

$V_{g,f}$ et $V_{e,f}$ sont respectivement les volumes solide et liquide finaux.

La différence entre ces deux énergies correspond à l'enthalpie de changement d'état:

$$\rho_m L_f (V_{e,f} - V_{e,i}) \quad (2.67)$$

L_f est la chaleur latente de fusion.

Lorsque tout le solide fond, $V_{g,f} = 0$, $V_{e,f} = V_{tot}$. La température d'équilibre est notée T_m .

$$\rho_g C_{pg} T_{g,i} V_{g,i} + \rho_e C_{pe} T_{e,i} V_{e,i} - \rho_e C_{pe} T_m V_{tot} = \rho_m L_f (V_{tot} - V_{e,i}) \quad (2.68)$$

La température d'équilibre est:

$$T_m = -\frac{\rho_m L_f (V_{tot} - V_{e,i}) - \rho_e C_{pe} T_{e,i} V_{e,i} - \rho_g C_{pg} T_{g,i} V_{g,i}}{\rho_e C_{pe} V_{tot}} \quad (2.69)$$

– Résultats numériques

Les paramètres de simulation sont les suivants:

Dimensions du domaine: $L = 0,1m$

Coté du domaine solide (carré): $r = 0,04m$

Température initiale liquide: $T_{e,i} = 200^{\circ}C$

Température initiale solide: $T_{g,i} = 150^{\circ}C$

Les caractéristiques du fluide utilisé (indium) sont les suivantes:

Masses volumiques liquide et solide: $\rho_e = \rho_g = 7300kg.m^{-3}$

Capacités calorifiques liquide et solide: $C_{pe} = 233J.K^{-1}kg^{-1}$ et $C_{pg} = 6000J.K^{-1}.kg^{-1}$

Chaleur latente de fusion: $L_f = 28,6.10^3 J.kg^{-1}$

Température de fusion: $T_f = 156,6^{\circ}C$

Les résultats sont exprimés dans le tableau 2.3.

| maillage | $T_{m,th}$ ($^{\circ}C$) | $T_{m,num}$ ($^{\circ}C$) | erreur |
|----------|----------------------------|-----------------------------|--------|
| 8x8 | 172,4 | 156,7 | 9,1% |
| 16x16 | 172,4 | 167,0 | 3,1% |
| 32x32 | 172,4 | 171,2 | 0,7% |
| 64x64 | 172,4 | 171,9 | 0,3% |
| 128x128 | 172,4 | 172,2 | 0,1% |

Tableau 2.3 : Comparaisons formule analytique et résultat numérique

On compare les températures analytique et numérique pour différents maillages. La solution numérique converge vers la solution théorique avec un ordre de 2.

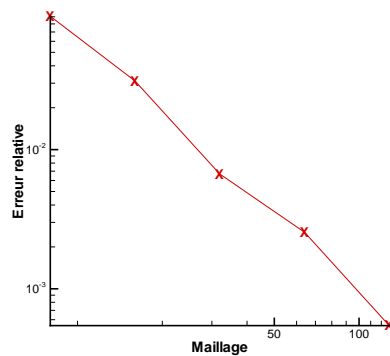


Figure 2.7 : Erreur de température d'équilibre en fonction du maillage

2.3 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons décrit la résolution numérique du système d'équations et nous avons validé les simulations d'impact d'une goutte et d'évolution du front de solidification en fonction d'expressions analytiques. L'étape suivante consiste à réaliser la simulation de l'impact de plusieurs gouttes, soit les unes à côté des autres, soit les unes au-dessus des autres, ces configurations ne faisant pas l'objet d'étude analytique.

Chapitre 3

Résultats numériques

Dans ce chapitre, les résultats des simulations numériques d'impact de gouttes sont présentés pour différentes configurations. Tout d'abord, on considère l'impact simultané de gouttes identiques afin d'observer les phénomènes de recouvrement du substrat et de rencontre des gouttes voisines en fonction des conditions d'impact (distance entre deux gouttes, vitesse d'impact...). Puis à cette configuration, on ajoute la présence de trains de gouttes dans le but d'observer la formation de pièges d'air et d'étudier la progression du front de solidification en fonction des paramètres du système (vitesse des gouttes, températures initiales, fréquence d'impact des gouttes,...).

3.1 Impact simultané de gouttes identiques

Afin de simuler l'impact 2D d'une infinité de gouttes sur le substrat tout en restreignant l'étude à un domaine fini, des conditions limites de symétrie sont utilisées à gauche et à droite. Le but est d'étudier la moitié d'une goutte et de supposer que ce comportement se répète à l'infini. Les conditions limites supérieure et inférieure sont respectivement de type Neumann (composante de vitesse tangentielle nulle) et de type paroi (vitesse nulle). La goutte est initialement en $x = 0$ (axe de symétrie) au-dessus du substrat. L'autre plan de symétrie correspond à la zone de rencontre de deux gouttes voisines. La distance qui sépare les deux axes de symétrie est notée $D_g/2$ telle que D_g corresponde à la distance séparant les centres de deux gouttes voisines. Un exemple de simulation est illustré en figure 3.1 et la configuration initiale est illustrée sur les figures 3.2 et 3.3.

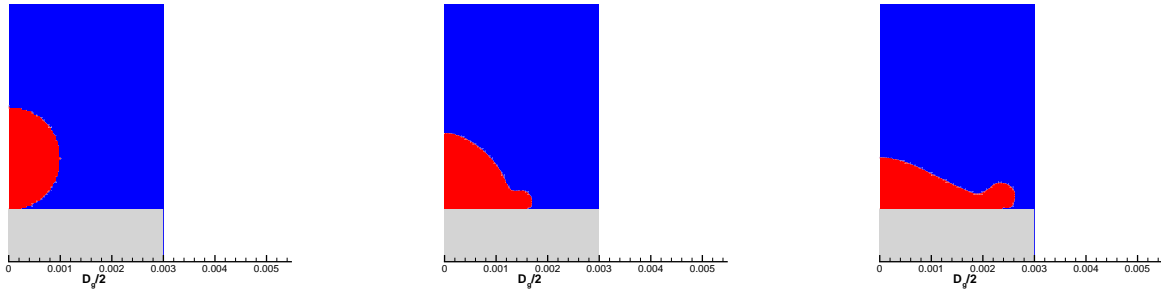
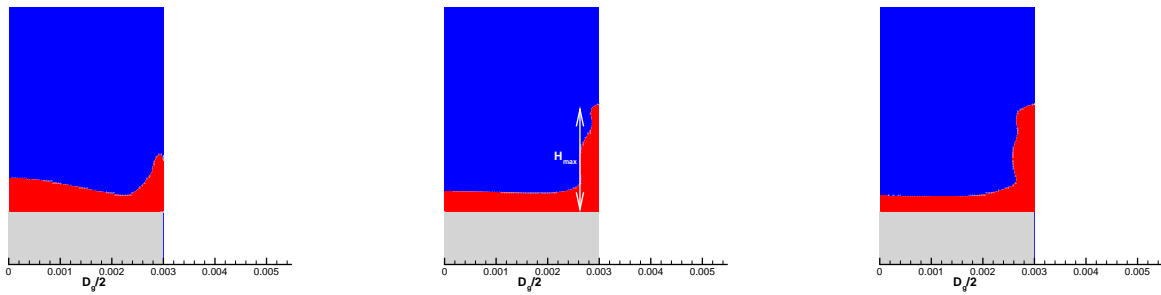
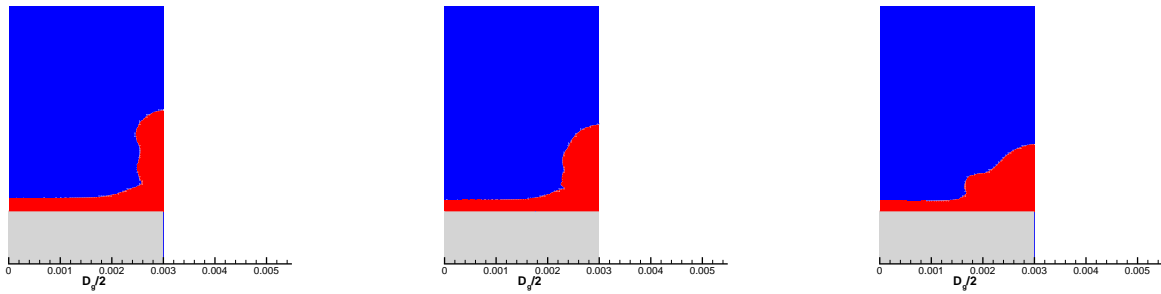
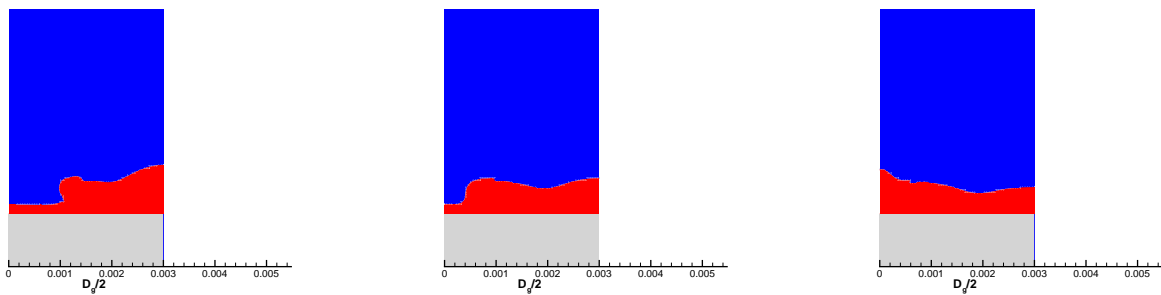
a. $t = 0$ sb. $t = 5$ msc. $t = 10$ msd. $t = 15$ mse. $t = 20$ msf. $t = 25$ msg. $t = 30$ msh. $t = 35$ msi. $t = 40$ msg. $t = 45$ msh. $t = 50$ msi. $t = 55$ ms

Figure 3.1 : Exemple de simulation d'impact de gouttes avec $V_i = 0,1\text{m/s}$ et $D_i = 2\text{mm}$
 ($Re = 1081$ et $We = 29$)

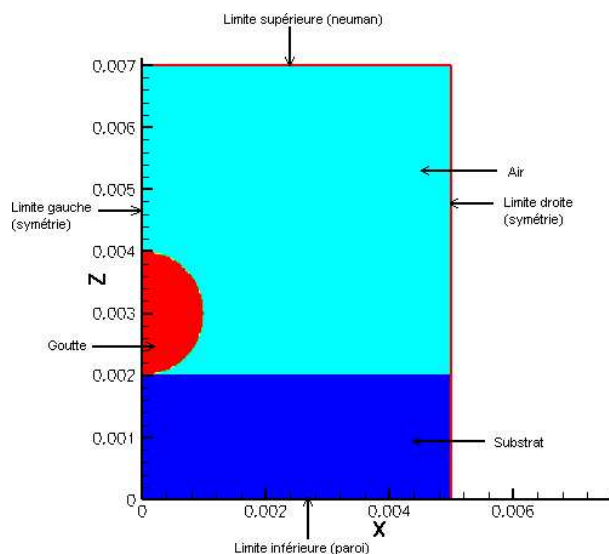


Figure 3.2 : Configuration initiale de l'impact de gouttes simultanées

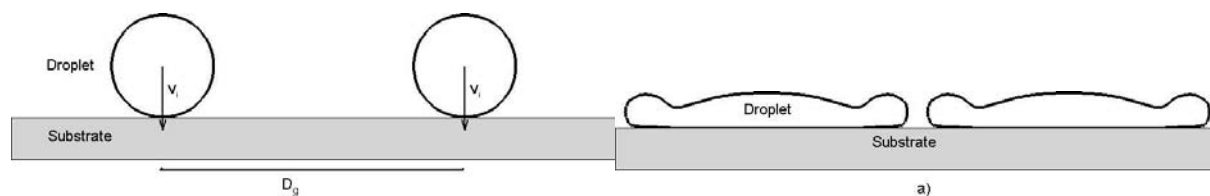


Figure 3.3 : Représentation de l'impact de gouttes simultanées

Lors de l'impact de gouttes simultanées, l'énergie cinétique de chaque goutte est convertie partiellement en énergies de forces visqueuses et de surface et énergie cinétique d'étalement. Cette dernière, au moment de la rencontre de deux gouttes voisines, produit un jet de matière puis un retour du fluide vers le point d'impact initial sous forme d'une onde de retour. Ce mouvement se reproduit jusqu'à stabilisation de la matière, soit par solidification totale du métal, soit par conversion de l'énergie cinétique du fluide. La hauteur de fluide à une position d'équilibre s'exprime par conservation de la masse, soit :

$$\rho \frac{\pi r_i^2}{2} = \rho \frac{D_g}{2} e_{eq} \quad (3.1)$$

Donc :

$$e_{eq} = \frac{\pi r_i^2}{D_g} \quad (3.2)$$

La hauteur du jet de rencontre de deux gouttes et l'instant correspondant à la hauteur maximum du jet sont étudiés en fonction des nombres de Reynolds et de Weber afin de définir la rencontre de gouttes en fonction des paramètres dynamiques du système. Rappelons que ces nombres adimensionnels sont basés sur la vitesse d'impact $V_i = 0,1m.s^{-1}$ de la goutte considérée sphérique et sur son diamètre initial $D_i = 2.10^{-3}m$. Ainsi, ces paramètres sont définis par:

$$Re = \frac{\rho V_i D_i}{\mu} \quad \text{et} \quad We = \frac{\rho V_i^2 D_i}{\sigma}$$

3.1.1 Influence du nombre de Reynolds sur l'impact simultané de gouttes

Plusieurs auteurs ont montré que l'impact d'une goutte est influencé par les valeurs des nombres de Reynolds et de Weber. Afin d'analyser le comportement de plusieurs gouttes en fonction de ces nombres indépendamment les uns des autres, seul un paramètre pertinent est modifié. Dans ce paragraphe, il s'agit de la viscosité qui modifie le nombre de Reynolds sans changer les propriétés de surface et donc le nombre de Weber ($\rho = 7300kg.m^{-3}$, $\sigma = 0,55N.m^{-1}$). Les échanges thermiques ne sont pas traités dans ce paragraphe, c'est pourquoi les conditions initiales en température ne sont pas mentionnées. En changeant la viscosité du fluide, on modifie le travail des forces de frottement visqueux. Les gouttes, lors de l'impact sont donc plus ou moins freinées, et l'énergie cinétique d'impact est davantage convertie lorsque la viscosité est plus grande. Cela résulte en une rencontre de goutte avec une dynamique plus ou moins intense et une hauteur de jet plus ou moins importante. Globalement, les résultats illustrés en figures 3.5, 3.6 et 3.7 montrent que le comportement des gouttes est le même : à la rencontre des gouttes, un jet de matière apparaît sur l'axe de rencontre et retombe sans rupture ni formation de gouttes secondaires, puis il redescend et la matière est redirigée vers l'axe d'impact de la goutte sous forme d'une onde de retour. L'exception à ce comportement concerne le cas où $Re = 10814$ et $We = 27$, ce qui correspond à un nombre de Sommerfeld $K = 52,5$, et donc à l'ordre de grandeur limite ($K = 57,7$) où la goutte peut adopter un comportement soit de déposition, soit d'éclaboussure [Mundo 95]. Le graphique 3.4 montre que lorsque le nombre de Reynolds augmente, la hauteur maximale du jet de rencontre augmente également linéairement selon $Ln(Re)$. La loi qui relie la hauteur de rencontre maximale $H_{ren,max}$ au nombre de

Reynolds Re pour We et D_g fixes est:

$$\frac{H_{ren,max}}{D_i} = 0,09 \cdot \ln(Re) + 0,727 \quad (3.3)$$

Le point concernant $Re = 10841$ n'est pas considéré car la goutte secondaire qui est arrachée à la rencontre des gouttes n'est pas prise en compte dans la détermination de la hauteur du jet de rencontre, la conservation de la masse n'est donc pas vérifiée et cela résulte en une hauteur de jet plus faible, puisqu'elle implique moins de matière. Il est à noter que ces simulations sont réalisées avec $D_i = 2mm$ et $V_i = 0,1m.s^{-1}$.

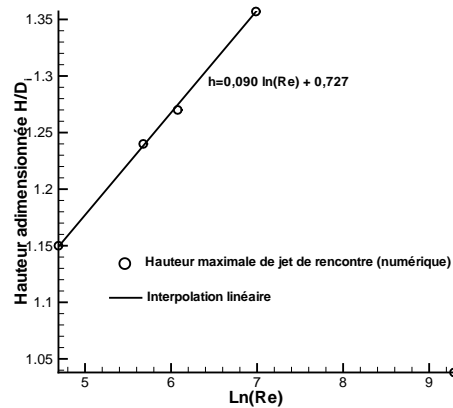


Figure 3.4 : Hauteur adimensionnée du jet de rencontre de deux gouttes en fonction de $\ln(Re)$ pour $We = 27$ et $D_g = 6.10^{-3}m$

| Re | $\ln(Re)$ | h_{ad} |
|-------|-----------|----------|
| 109 | 4,69 | 1,15 |
| 292 | 5,68 | 1,24 |
| 435 | 6,08 | 1,27 |
| 1081 | 6,99 | 1,357 |
| 10814 | 9,29 | 1,038 |

Tableau 3.1 : Influence du nombre de Reynolds sur la hauteur adimensionnée h_{ad} du jet de rencontre pour $We = 27$ et $D_g = 6.10^{-3}m$

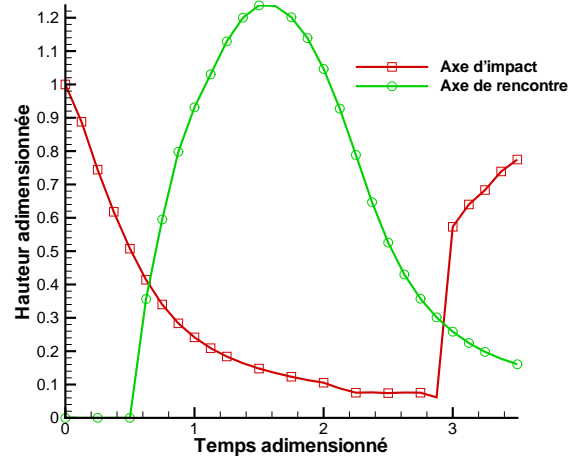


Figure 3.5 : Hauteurs de gouttes adimensionnées sur l'axe d'impact et sur l'axe de rencontre, $Re = 292$, $We = 27$

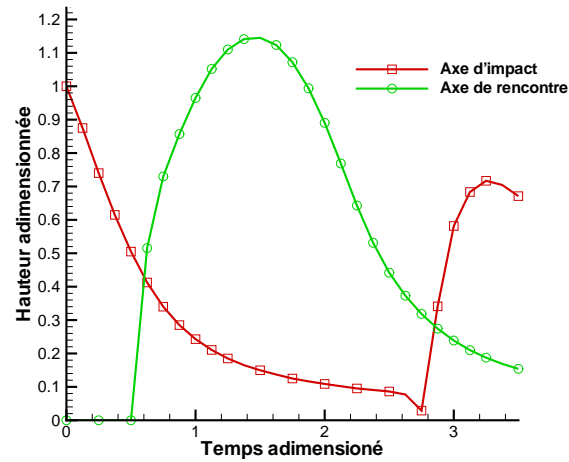


Figure 3.6 : Hauteurs de gouttes adimensionnées sur l'axe d'impact et sur l'axe de rencontre, $Re = 109$, $We = 27$

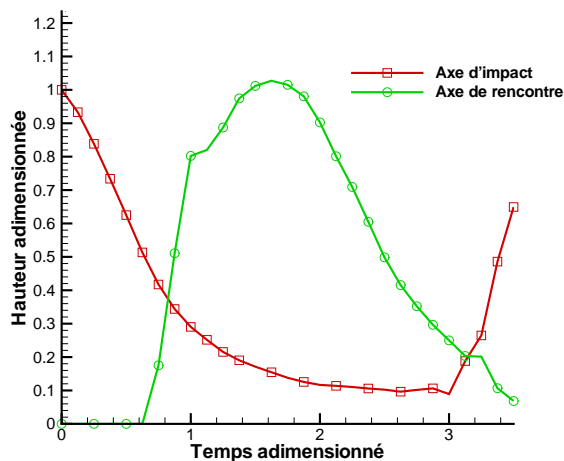


Figure 3.7 : Hauteurs de gouttes adimensionnées sur l'axe d'impact et sur l'axe de rencontre, $Re = 10814$, $We = 27$

Dans les figures 3.5 à 3.7, le temps adimensionné t^* est donné par l'expression :

$$t^* = \frac{tV_i}{D_i} \quad (3.4)$$

L'instant qui correspond à l'obtention de $H_{ren,max}$ sera ainsi noté t_{max}^* . On remarque que pour chaque simulation, le temps t_{max}^* reste constant à une valeur de $t_{max}^* = 1,5$. Tout comme le temps adimensionné d'étalement maximum d'une goutte isolée évalué à $t^* = 8/3$ [Pasandideh-Fard 96], ce temps ne dépend pas du nombre de Reynolds.

3.1.2 Influence du nombre de Weber sur l'impact simultané de gouttes

Seule la tension superficielle est maintenant modifiée afin de vérifier l'influence du nombre de Weber, les autres nombres adimensionnels restant constants. De cette manière, seule l'énergie de surface est modifiée entre deux simulations, les autres formes d'énergie restent identiques par ailleurs.

Lorsque la tension superficielle augmente, les réactions de la goutte face aux déformations de l'interface sont plus intenses et tendent à donner à la goutte sa forme d'équilibre : une sphère. La hauteur maximale du jet de rencontre de gouttes est plus faible car l'énergie

cinétique est davantage convertie en énergie de surface à cause des déformations de l'interface.

Dans les simulations qui suivent, le nombre de Reynolds est fixé à $Re = 1081$, avec $D_i = 2.10^{-3}m$, $V_i = 0,1m.s^{-1}$, $\mu = 1,35.10^{-3}kg.m^{-1}.s^{-1}$ et $D_g = 6mm$. Lorsque la tension superficielle est trop importante, (par exemple $\sigma = 0,1N.m^{-1}$) la rétraction de la goutte débute avant que deux gouttes ne se touchent. La hauteur de rencontre H_{max} est dans ce cas sans objet. A l'inverse, si la tension de surface est trop faible ($\sigma = 10^{-4}N.m^{-1}$) l'impact des gouttes résulte en un splash ($K > 57,7$) et l'étude de la hauteur du jet de rencontre des gouttes n'est plus pertinente dans cette gamme de We . Dans une gamme de nombre de Weber comprise entre 14,6 et 146, la hauteur maximale du jet de rencontre est plus grande lorsque We augmente ce qui correspond à une conversion de l'énergie cinétique en énergie de surface moins importante. Ainsi, un nombre de Weber élevé correspond à une quantité d'énergie cinétique disponible plus importante lors de la rencontre de deux gouttes voisines et donc un jet de rencontre plus haut. Pour des nombres de Weber entre 14,6 et 146, la hauteur maximale du jet de rencontre suit une loi logarithmique en fonction de We (figure 3.8) :

$$\frac{H_{max}}{D_i} = 0,266.ln(We) + 0,118 \quad (3.5)$$

Lorsque la tension de surface est faible, son influence sur la hauteur du jet de rencontre est donc moins prononcée. Cette loi est du même type que l'évolution de H_{max}/D_i en fonction du nombre de Reynolds.

Contrairement à l'étude liée au nombre de Reynolds, l'instant correspondant à la valeur maximale du jet de rencontre dépend de We et augmente avec lui. Son évolution se rapproche d'une loi logarithmique :

$$\frac{tV_i}{D_i} = 0,125.ln(We) + 0,94 \quad (3.6)$$

Lorsque le nombre de Weber augmente, ce temps adimensionné se rapproche de la valeur de 1,5 qui correspond au temps adimensionné constant lors de l'étude sur le nombre de Reynolds à un nombre de Weber fixe. La tension de surface peut donc influencer à la fois la hauteur du jet et sa durée.

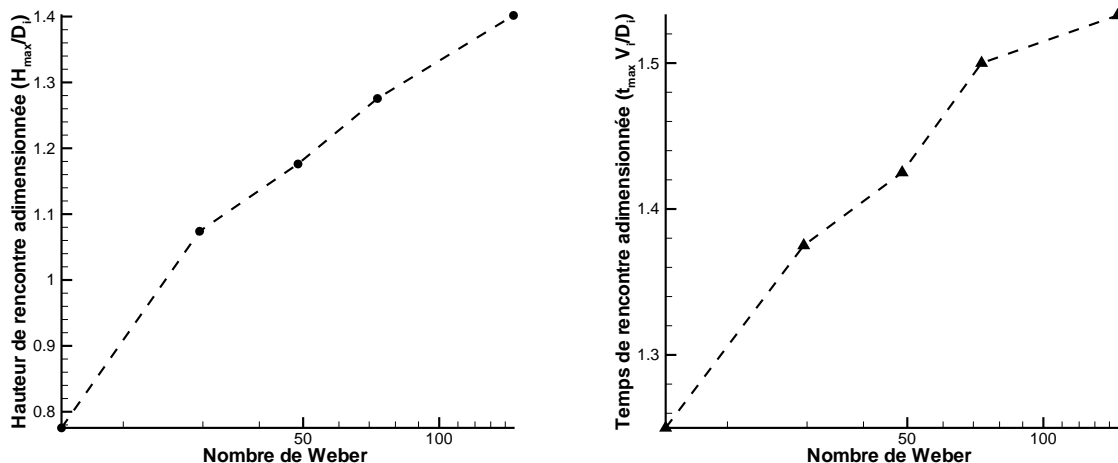


Figure 3.8 : Temps de hauteur de jet maximale t_{max} en fonction du nombre de Weber

3.1.3 Influence de la distance entre gouttes sur l'impact simultané de gouttes

Lorsque la distance entre gouttes est accrue, l'énergie cinétique initiale est davantage convertie dans les autres formes d'énergies. La hauteur du jet est donc moins importante, puisque la matière fournit moins d'énergie cinétique. Lors de la création de l'onde de retour, celle-ci est moins grande et dissipe l'énergie plus rapidement. Pour une configuration définie par $Re = 435$ et $We = 146$, la hauteur maximale du jet de rencontre et l'instant correspondant sont relevés en fonction de l'inter distance D_g (tableau 3.2). Ce paramètre contribue à une conversion de l'énergie cinétique plus ou moins importante et rapide, mais il est indépendant des propriétés mécaniques des matériaux. Il s'agit donc d'une influence de la configuration générale du système.

Il apparaît tout naturellement que lorsque la distance entre deux gouttes D_g augmente, la hauteur maximale du jet de rencontre diminue car une partie de l'énergie cinétique est convertie en travail de forces visqueuses et en énergie de surface durant l'étalement. La distance D_g qui correspond au point où $H_{ren,max} = 0$ correspond au degré d'étalement maximum d'une goutte isolée. Dans ce cas critique, il n'y a pas d'interaction entre les particules fluides, ce qui interdit le recouvrement total de la surface du substrat. Par contre, plus D_g est faible et moins l'énergie se dissipe lors de l'étalement. Cela signifie que lorsque D_g/D_i est proche de 1, l'énergie cinétique disponible dans le jet de rencontre correspon-

draît à l'énergie cinétique d'étalement d'une goutte isolée. Il en résulte que le temps $t_{ren,max}$ tend vers le temps d'étalement maximum d'une goutte isolée en 2D, soit $\pi/2$. Le degré d'étalement de la goutte est par contre plus grand que la hauteur $H_{ren,max}/D_i$ correspondante, car lors de l'ascension du jet de rencontre de deux gouttes, les forces gravitaires qui agissent par la conversion de l'énergie cinétique en énergie potentielle s'opposent à l'élévation du jet de rencontre. Ce phénomène, bien sûr, ne se produit pas lors de l'étalement d'une goutte isolée. Cette différence de phénomènes entre l'étalement d'une goutte isolée et l'élévation du jet de rencontre de deux gouttes ne permet donc pas de comparer les valeurs respectivement du degré d'étalement et de la hauteur du jet de rencontre.

| D_g/D_i | $H_{ren,max}/D_i$ | $t_{ren,max}$ |
|-----------|-------------------|---------------|
| 3 | 1,40 | 1,57 |
| 4 | 1,37 | 1,75 |
| 5 | 1,26 | 2,04 |
| 6 | 1,13 | 2,25 |

Tableau 3.2 : Hauteur maximale du jet de rencontre et instant correspondant adimensionnés en fonction de D_g/D_i

3.1.4 Influence du nombre de Stefan

Jusqu'à présent, les transferts thermiques n'ont pas été pris en considération. Pour comparer l'impact de couches (film métallique sans écoulement) à l'impact de gouttes (prise en compte de l'écoulement du métal), et ainsi quantifier l'influence de l'écoulement sur les transferts thermiques, on s'intéresse au rapport $\Phi_{ad} = \Phi_{goutte}/\Phi_{couche}$. Le terme Φ_{goutte} correspond au flux calculé dans le substrat lors de la simulation d'impact de gouttes sur le substrat (prise en compte de la dynamique). Le terme Φ_{couche} quant à lui, correspond au flux calculé dans les mêmes conditions lors de la simulation d'impact de couches (sans écoulement). Ce dernier terme est donc le flux de référence car il correspond à une configuration simplifiée.

Pour étudier ce nombre Φ_{ad} , deux simulations sont effectuées. La première consiste en l'impact de gouttes d'indium de 2 mm de diamètre distantes les unes des autres de $D_g = 6mm$, à vitesse d'impact $V_i = 0,1m.s^{-1}$, de température initiale $T_i = 190^\circ C$. Le substrat d'acier

d'épaisseur $e_s = 1mm$ est porté initialement à $100^\circ C$. Le maillage est de 90×150 sur un domaine de $3mm \times 5mm$ et le pas de temps est de $\Delta t = 5.10^{-6}s$. Le contact entre la goutte et le substrat est modélisé par une résistance thermique de contact constante de $R_{TC} = 10^{-5}m^2.K.W^{-1}$. Le flux qui traverse l'interface entre la goutte et le substrat est calculé localement sur les axes d'impact et de rencontre et globalement sur toute la surface mouillée par la goutte.

La deuxième simulation correspond à l'impact d'une couche de métal sans écoulement de température initiale $T_i = 190^\circ C$ et d'épaisseur e_m définie par la conservation de la masse, soit :

$$e_m = \frac{\pi D_i^2}{4D_g} \quad (3.7)$$

ce qui correspond à $e_m = 0,52.10^{-3}m$. Le substrat d'épaisseur $e_s = 1mm$ est initialement à $100^\circ C$ et la résistance thermique de contact est à $R_{TC} = 10^{-5}m^2.K.W^{-1}$.

En fonction du temps adimensionné (tV_i/D_i), on obtient en figure 3.9 l'évolution de Φ_{ad} dans le métal. D'une manière générale, les valeurs de Φ_{ad} sont inférieures à 1, ce qui différencie ce nombre d'un nombre de Nusselt dont la valeur 1 est le minimum. En effet, en comparant les flux qui traversent la surface du substrat dans le cas avec et sans dynamique, on ne prend pas en compte l'évolution de l'épaisseur de métal, alors qu'un nombre de Nusselt prend en compte les flux par convection et par conduction sur une même épaisseur. C'est pourquoi Φ_{ad} est défini comme un nombre indépendant et non pas un nombre de Nusselt.

La valeur de Φ_{ad} local sur l'axe d'impact ($\Phi_{ad,loc,imp}$) augmente rapidement et atteint une valeur de 1,42 car l'étalement de la goutte fournit de la chaleur au substrat. Puis lorsque l'épaisseur de goutte sur l'axe d'impact est faible, le transfert de chaleur diminue, ce qui diminue $\Phi_{ad,loc,imp}$ jusqu'à une valeur de 0,41. Lorsque le métal revient sur le plan d'impact sous forme d'une onde de retour, un nouvel apport de chaleur réactive le transfert du flux et $\Phi_{ad,loc,imp}$ augmente de nouveau.

Sur le plan de rencontre, Φ_{ad} ne s'active qu'à partir du moment où la goutte atteint cette zone. Le champ de vitesse est ascendant, ce qui limite fortement la convection. De plus, le métal est à température plus faible qu'au plan d'impact car il se refroidit pendant la durée de l'étalement. Dans ces conditions, le flux capté par le substrat lors de l'impact des gouttes est plus faible que lors de l'impact d'une couche d'épaisseur fixe et $\Phi_{ad,loc,ren}$ atteint un maximum de 0,285.

Le nombre $\Phi_{ad,global}$ est calculé par intégration de Φ_{ad} sur toute la surface du substrat. Il possède une valeur moyenne de 0,32. Cela signifie que le flux Φ_{goutte} correspond à 30% du flux de référence Φ_{couche} (conduction pure). Ce résultat s'explique par l'épaisseur de métal dans les deux configurations. En effet, lors du calcul de $\Phi_{couches}$, l'épaisseur du revêtement est constante alors qu'elle est variable lorsque la dynamique est prise en compte (calcul de Φ_{goutte}). Ainsi, les échanges thermiques entre les gouttes et le substrat dépendent de la vitesse d'étalement et de la variation de l'épaisseur avant stabilisation du revêtement.

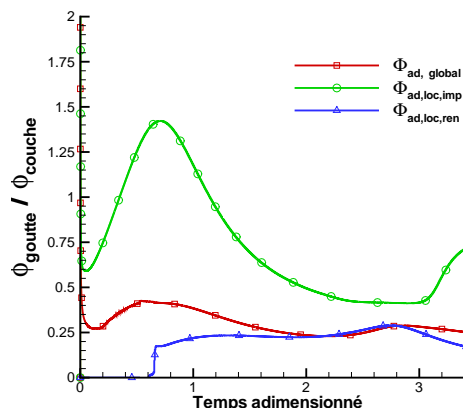


Figure 3.9 : Evolution des Φ_{ad} locaux sur les axes d'impact et de rencontre et du Φ_{ad} global, $Re = 1081$, $We = 14,6$ et $D_g = 6mm$

En se basant sur la même simulation d'impact de gouttes, il est également intéressant d'observer l'évolution du flux à l'interface substrat-goutte au point d'impact et au point de rencontre (figure 3.10). Le décalage des courbes provient du temps nécessaire à la goutte pour parvenir au point de rencontre comme il a été montré sur des simulations de l'impact de gouttes d'eau [Le Bot 02]. Aux deux positions, la valeur maximale de la densité de flux est supérieure au point d'impact par rapport au point de rencontre car c'est lors du contact de la goutte que la différence de température est la plus grande. L'étalement permet non seulement de refroidir une partie de la goutte mais il a également comme rôle de mieux répartir la chaleur dans la goutte. Ainsi après rencontre de deux particules fluides, cette meilleure répartition permet de transmettre un flux de chaleur plus régulier le long du substrat. C'est ce que l'on observe au bout de $t = 0,03s$ où les densités de flux aux deux points d'observation ont des valeurs proches.

De même, l'observation des températures de contact en ces deux points montre qu'au point d'impact, la température atteint une valeur élevée de 143°C alors qu'au point de rencontre, elle n'atteint au maximum que $117,5^{\circ}\text{C}$. Puis après $t = 0,03\text{s}$, les températures exhibent la même allure à des valeurs proches.

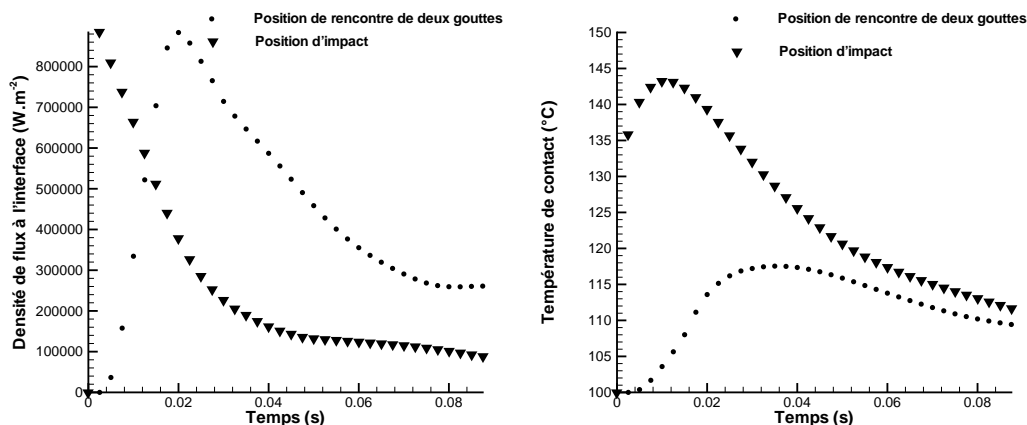


Figure 3.10 : Evolution des densités de flux et températures à l'interface aux points d'impact et de rencontre avec $Re = 1081$, $We = 14,6$, $D_g = 6\text{mm}$, $T_{sub,i} = 100^{\circ}\text{C}$ et $T_{g,i} = 190^{\circ}\text{C}$

Le nombre de Stefan permet de définir l'influence de la solidification sur le système et est défini par :

$$Ste = \frac{C_p \Delta T}{L_f} \quad (3.8)$$

ΔT est la différence de température entre la température de substrat initiale et la température de changement de phase. Selon la valeur du nombre de Stefan, l'écoulement des gouttes peut permettre un large étalement avant de figer la matière, ou au contraire, la solidification peut bloquer la matière et capter une grande partie de l'énergie cinétique. Le film fin peut être plus rapidement stabilisé, mais à une position autre que la position d'équilibre. La solidification a aussi pour action de pouvoir bloquer les pièges d'air et d'empêcher leur éjection. Ainsi, cela favorise la porosité du film fin, et si les pièges d'air sont à la surface du substrat, l'adhérence est dégradée. Il est à noter qu'on ne prend pas en compte la rétraction du métal par effet thermomécanique.

Dans les simulations qui suivent, la chaleur latente L_f de l'indium est de $28,6 \cdot 10^3 J.kg^{-1}$, la température de changement de phase est de $T_f = 156,6^\circ C$ et la température des gouttes est initialement de $190^\circ C$. Afin d'évaluer l'influence du nombre de Stefan Ste , la température initiale du substrat $T_{s,i}$ est modifiée : les températures du substrat à des profondeurs de 0,01mm, 0,2mm et 0,4mm de l'interface goutte-substrat sous les zones d'impact et de rencontre sont extraites de ces simulations, ainsi que les positions du front de solidification sur les mêmes zones en fonction du temps. Les températures initiales du substrat sont successivement de $25^\circ C$ ($Ste = 1,1$), $50^\circ C$ ($Ste = 0,87$) et $100^\circ C$ ($Ste = 0,46$). Le nombre de solidification Φ défini par [Aziz 00] est supérieur à 1 dans tous les cas ce qui suppose que la solidification a une influence sur le degré d'étalement (cf chapitre 1).

$$\Phi = \frac{Ste b_{substrat}}{\sqrt{Pr} b_{goutte}} \quad (3.9)$$

Les figures 3.11 représentent les hauteurs de jet de recontre et les positions du front de solidification à l'impact et à la rencontre de deux gouttes et les températures de substrat pour $Ste = 0,87$. En figures 3.12 le même type de courbes est présenté pour $Ste = 0,46$. La température de contact de ces simulations est comparée à l'expression analytique proposée par [Loulou 97] concernant la température de contact de deux milieux accolés, l'un se solidifiant et sans résistance thermique de contact :

$$T_{int} = \frac{T_f b_c + T_{s,i} b_s erf(\xi)}{b_c + b_s erf(\xi)} \quad (3.10)$$

où ξ est la solution de l'équation transcendante suivante (en considérant identiques les conductivités, masses volumiques et capacités calorifiques des couches liquides et solides) :

$$\frac{exp(-\xi^2)}{erf(\xi)} + \frac{T_f - T_{c,i}}{T_f - T_{int}} \cdot \frac{exp(-\xi^2)}{erfc(\xi)} = \frac{\xi L_f \sqrt{\pi}}{c_{pc}(T_f - T_{int})} \quad (3.11)$$

L'hypothèse forte de cette résolution consiste à supposer cette température de contact comme constante dans le temps, ce qui n'est pas vérifié dans les simulations. Cependant, les ordres de grandeur des températures analytique et numérique sont comparables. Ainsi, lorsque $Ste = 0,46$, l'expression analytique fournit $T_{int} = 152,4^\circ C$ et pour $Ste = 0,87$ on obtient $T_{int} = 137^\circ C$. Par simulation numérique, les températures de contact au niveau du plan d'impact augmentent brusquement lors du contact entre la goutte puis décroît lentement, car non seulement la chaleur se diffuse dans le substrat [Le Bot 03] mais de plus la condition limite inférieure (base du substrat) est maintenue à la température de substrat initiale, ce qui participe au refroidissement du substrat après l'impact de la

goutte. La température diminue lentement entre 157°C et 149°C pour $Ste = 0,46$ ($T_{int} = 152,4^\circ\text{C}$) et entre 150°C et 136°C pour $Ste = 0,87$ ($T_{int} = 137^\circ\text{C}$). Les températures analytiques et numériques ne sont pas identiques car l'hypothèse d'une température de contact constante n'est pas vérifiée et la convection lors de l'étalement éloigne le cas numérique de la configuration analytique. De plus, les deux milieux ne sont pas semi-infinis. L'intérêt de l'expression 3.10 se résume donc à définir la gamme de température de contact atteinte par la surface du substrat lors de l'étalement.

Il est également intéressant de comparer les hauteurs du jet de rencontre et l'évolution des fronts de solidification en fonction de la valeur du nombre de Stefan. On observe que la prise en compte du changement de phase diminue la hauteur maximale du jet de rencontre, au même titre que cela diminue le degré d'étalement maximal d'une goutte isolée. En effet, une partie de l'énergie cinétique est convertie en travail nécessaire pour solidifier le métal. Lors de la rencontre de gouttes, la quantité d'énergie cinétique disponible est plus faible par rapport au cas sans solidification, et le jet de rencontre est donc moins intense.

Lorsque le nombre de Stefan Ste diminue, la différence de température entre le substrat et la goutte diminue également. Les échanges thermiques sont moins intenses et le front de solidification se propage plus lentement. La hauteur du jet de rencontre est par conséquent plus grande lorsque le nombre de Stefan est faible car la solidification étant plus lente, l'énergie cinétique disponible lors de la rencontre de gouttes est plus importante. La goutte a donc plus de temps pour atteindre une position d'équilibre à épaisseur constante $e_{ep} = \frac{\pi D_i^2}{4D_g}$ avant d'être figée par la solidification. A l'inverse, lorsque le nombre de Stefan augmente, la solidification est plus rapide et se propage dans tout le métal avant que celui-ci ait atteint la position stable e_{eq} . La goutte recouvre donc le substrat en formant une couche fine dont l'épaisseur n'est pas constante, ce qui provoque la formation d'un revêtement à l'état de surface non lisse.

De plus, les figures 3.11 et 3.12 montrent que les températures de contact sur la zone d'impact n'ont pas un comportement régulier. Juste après le contact, le refroidissement est modéré car l'évacuation de la chaleur par la condition limite inférieure de type Dirichlet s'oppose à la captation de chaleur due au changement de phase de la goutte sur le plan d'impact. Lorsque cette zone est solidifiée, le substrat ne capte plus localement cette chaleur latente et se refroidit rapidement. Cependant la totalité de la goutte n'est pas solide et le dégagement de chaleur latente se poursuit. Localement à la surface du substrat au point d'impact, le refroidissement ralentit jusqu'à la solidification totale de

la goutte. Cette dernière étape est moins flagrante en figure 3.11 qu'en figure 3.12 car la solidification est plus rapide lorsque $Ste = 0,87$. Au niveau du point de rencontre de deux gouttes, on observe un seul ralentissement du refroidissement correspondant localement à la solidification de la goutte, mais aussi à la solidification totale du métal.

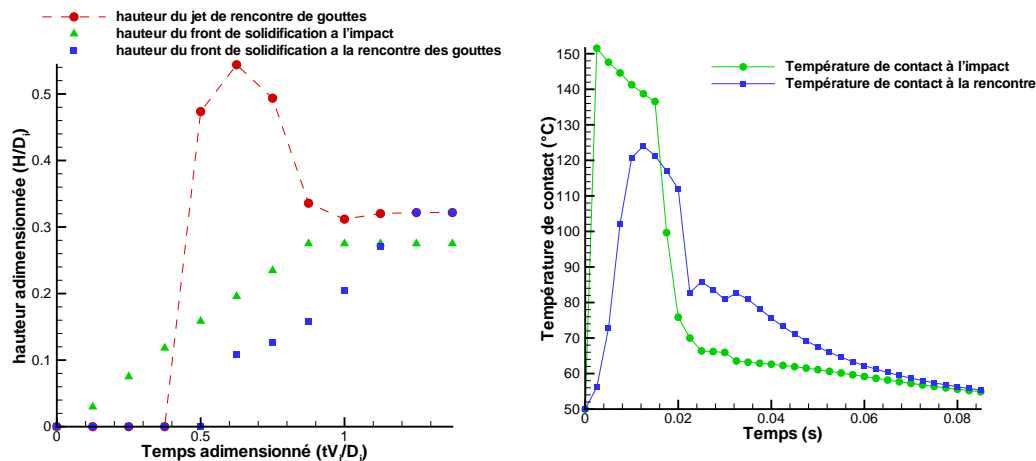


Figure 3.11 : Hauteurs adimensionnées du jet de rencontre et des fronts de solidification sous l'impact et sous la rencontre des gouttes et les températures de contact aux deux positions ($Ste = 0,87$)

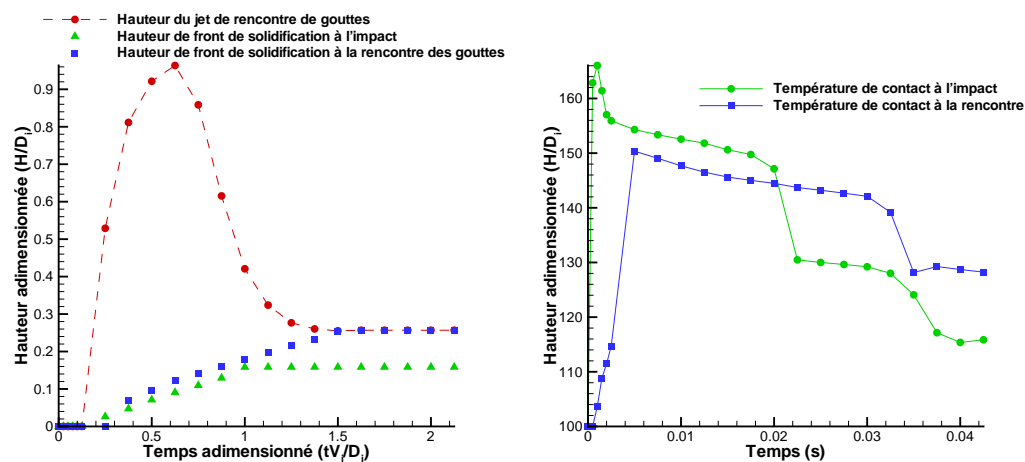


Figure 3.12 : Hauteurs adimensionnées du jet de rencontre et des fronts de solidification sous l'impact et sous la rencontre des gouttes et les températures de contact aux deux positions ($Ste = 0,46$)

Par l'intermédiaire de la température initiale du substrat, le nombre de Stefan influence donc non seulement la distribution des températures dans le substrat, mais aussi la manière dont le métal se solidifie. Lorsque le nombre de Stefan est faible (température initiale de substrat importante) la solidification est plus lente ce qui permet à la goutte de s'étaler davantage. L'état de surface du revêtement est donc lié à ce nombre adimensionnel.

3.2 Impacts consécutifs de gouttes identiques

L'impact consécutif de gouttes sur un substrat fait intervenir à la fois une dynamique complexe qui dépend de l'état du substrat et des échanges thermiques par apport successif d'énergie. Afin de découpler ces deux phénomènes, une étude numérique spécifique préliminaire est réalisée concernant l'impact non pas de gouttes mais de couches de métal les unes sur les autres, sans prendre en compte l'écoulement ni la convection thermique. Selon cette configuration, les échanges thermiques interviennent suivant l'épaisseur des couches, ce qui permet de résoudre ce système en monodimensionnel. Le domaine d'étude correspond au substrat d'épaisseur e_s et à la hauteur maximale de la somme de toutes les futures couches chacune d'épaisseur e_m .

3.2.1 Impacts consécutifs de couches sans dynamique

La configuration d'impact de couches ne fait intervenir que la résolution de l'équation de l'énergie. Les températures sont calculées sur la grille principale et les conductivités sont déterminées sur les faces des volumes de contrôle (grille secondaire). Le domaine 1D d'une taille L_a est initialement constitué du substrat d'épaisseur e_s défini par une fonction couleur $C = 0$ et les propriétés physiques ρ_s , $C_{p,s}$ et λ_s , d'une couche de métal d'épaisseur e_m avec $C = 1$, et dont les propriétés sont ρ_m , $C_{p,m}$ et λ_m et d'air de taille $L_a - (e_s + e_m)$ de couleur $C = 1$ et caractérisée par ρ_a , $C_{p,a}$ et λ_a . Les conditions limites sont de Dirichlet en $x = 0$ (base du substrat) et adiabatique en $x = L_a$. A chaque intervalle de temps t_{car} , une nouvelle couche de métal est posée sur la précédente et remplace la couche équivalent d'air (figure 3.13). Sur l'épaisseur e_s concernée, la fonction couleur C passe de 0 à 1 et les caractéristiques sont actualisées en conséquence :

$$\rho = C\rho_m + (1 - C)\rho_a \quad (3.12)$$

$$C_p = CC_{p,m} + (1 - C)C_{p,a} \quad (3.13)$$

$$\lambda = C\lambda_m + (1 - C)\lambda_a \quad (3.14)$$

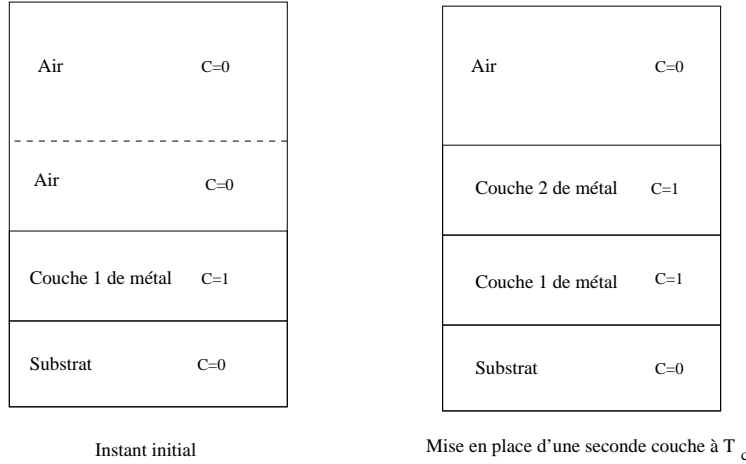


Figure 3.13 : *Impact successif de couches de métal*

L'intérêt de cette méthode est de pouvoir ajouter des couches à des instants différents sans modifier la taille du domaine ni les conditions limites. En actualisant la fonction couleur C en fonction de la présence des couches, les propriétés thermiques sont actualisées, et le changement de phase ne peut être activé que lors de la présence d'une nouvelle couche, sans risque d'être activé dans l'air.

Afin de prendre en compte la résistance thermique de contact entre le substrat et une couche ou entre deux couches, une modification est effectuée à la fois sur le maillage et sur la conductivité localement. Lorsque le nœud i fait partie de la couche A et le nœud $i + 1$ fait partie de la couche B, la conductivité au nœud $i + 1/2$ sur la face commune des deux volumes de contrôle est modifiée en fonction de la résistance thermique de contact (figure 3.14) :

$$\lambda^i = \frac{x_i + x_{i+1}}{\frac{x_i}{\lambda_1} + RTC + \frac{x_{i+1}}{\lambda_2}} \quad (3.15)$$

où x_i et x_{i+1} sont respectivement les distances du nœud i au nœud $i + 1/2$ et du nœud $i + 1/2$ au nœud $i + 1$, λ_1 , λ_2 et λ_i sont respectivement les conductivités du milieu 1, du

milieu 2 et la conductivité modifiée à l'interface.

Le modèle de résistance thermique de contact suppose que l'interface est d'épaisseur nulle. Afin de se rapprocher au mieux de cette définition, le pas d'espace qui sépare les nœuds i et $i + 1$ est fixé à $\Delta x_{RTC} = x_1 + x_2 = 10^{-6}m$ pour des couches d'épaisseur typiquement millimétrique.

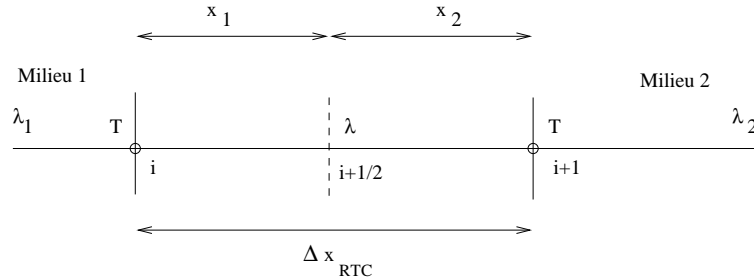


Figure 3.14 : Maillage à l'interface de deux couches

3.2.2 Résultats de l'impact

Les résultats sont donnés en terme de températures de part et d'autre des interfaces entre le substrat et la première couche ou entre deux couches consécutives. Soit T_s^b et T_s^h respectivement les températures de substrat en $x = 0$ (base du substrat) et à l'interface avec la première couche en $x = e_s$, et $T_c^{b,i}$ et $T_c^{h,i}$ respectivement les températures d'interface de couche i en $x = (i - 1) * e_c + e_s$ et en $x = i * e_c + e_s$. Les courbes 3.15 montrent l'évolution de ces températures dans le cas d'impacts de couches de $2mm$ d'épaisseur initialement à $100^\circ C$, d'une période de $0,2s$ sur un substrat initialement d'épaisseur $e_c = 2.10^{-3}m$ à $25^\circ C$. La résistance thermique de contact entre deux couches ou entre le substrat et la première couche est constante et égale à $10^{-5}K.m^2.W^{-1}$. Le pas de temps est de $\Delta t = 10^{-6}s$ et le maillage est de $\Delta x = 3.10^{-5}m$ sauf à l'interface de deux couches où $\Delta x = 1.10^{-6}m$.

Dès le début du contact entre le substrat et la couche 1, les températures suivent l'évolution typiquement déjà observée pour un contact brusque de deux milieux sans changement de phase et avec présence d'une résistance thermique de contact. A l'instant $t = 0,2s$, l'ajout d'une nouvelle couche chaude modifie l'évolution thermique: les températures de couche 1 augmentent brusquement, et on observe entre les couches 1 et 2

le comportement d'un contact brusque avec RTC, comme observé entre le substrat et la couche 1 au temps $t = 0$. L'ajout de la couche 3 à $t = 0,4s$ reproduit le même phénomène entre les couches 2 et 3. Lorsque la couche 2 est ajoutée, la couche 1 se réchauffe de $\Delta T = 5^\circ\text{C}$ en $x = e_s + e_m$, et lors de l'impact de la couche 3, elle ne se réchauffe que de $\Delta T = 3,2^\circ\text{C}$. Ainsi, au fur et à mesure des impacts, les couches antérieures sont de moins en moins sensibles au choc des couches suivantes, et leur température tend vers une valeur asymptotique. Ce phénomène est également visible sur le substrat qui se réchauffe brusquement à l'impact de la première couche, mais qui subit moins de variations de température à l'impact des couches suivantes (figure 3.15).

Lorsque la température initiale des couches est supérieure à la température de fusion T_f , le

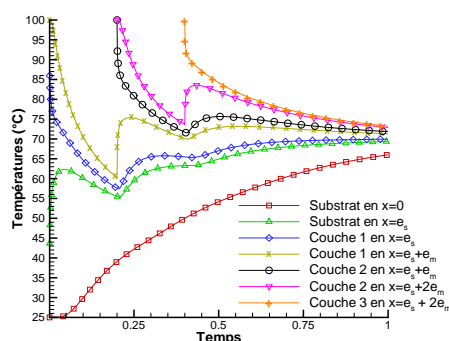


Figure 3.15 : *Impact successif de trois couches d'indium sur substrat d'acier, avec une période de 0,2s ($e_s = 2\text{mm}$ et $e_c = 2\text{mm}$)*

changement de phase intervient et modifie l'évolution des températures (figure 3.16). Pour chaque couche, on observe le plateau de solidification à la température de changement de phase T_f puis à nouveau le refroidissement. Au fur et à mesure des impacts, ce plateau dure de moins en moins longtemps. En effet, la première couche est en contact avec le substrat à 25°C ce qui implique que le refroidissement et la solidification sont rapides. Lorsque la deuxième couche est déposée, elle entre en contact avec une couche d'indium qui n'est pas totalement solidifiée, et dont la température d'interface à $x = x_s + x_m = 4\text{mm}$ est à $156,62^\circ\text{C}$, ce qui induit une vitesse de refroidissement plus faible. Comme la température de contact est supérieure à la température de fusion T_f , la deuxième couche ne peut pas encore solidifier et réchauffe la couche précédente qui refond. Lorsque le refroidissement se poursuit, l'écart de température à l'interface est faible, de telle sorte que la vitesse de refroidissement est plus lente qu'entre la couche 1 et le substrat. Il en résulte que la

solidification est plus lente et que le plateau de solidification dure plus longtemps, puisque les échanges thermiques nécessitent plus de temps pour solidifier le milieu.

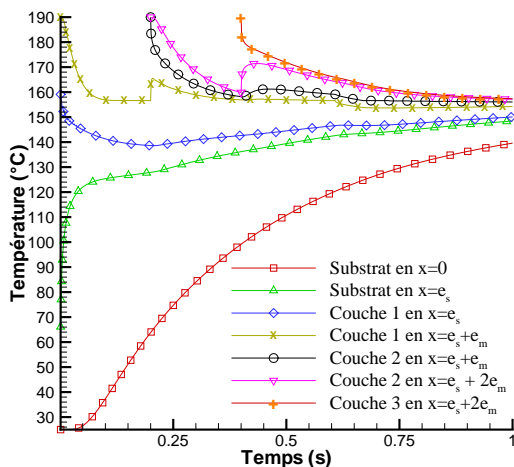


Figure 3.16 : *Températures des couches lors d'impacts successifs avec solidification*

La température du substrat initialement à 25°C augmente rapidement lors de la mise en place de la première couche jusqu'à une température de 120°C (contact brusque de deux milieux), inférieure à la température de contact de deux milieux, l'un en changement de phase et sans résistance thermique de contact. A chaque mise en place des couches suivantes, la température de substrat augmente mais avec une vitesse plus lente. En effet, les échanges thermiques entre les nouvelles couches chaudes et le substrat ne sont plus directs et la diffusion de la chaleur dans tout le système diminue la chaleur apportée au substrat. Il en résulte un réchauffement du substrat moins important et plus lent. Ainsi, après plusieurs impacts, le substrat ne ressent plus l'apport thermique des nouvelles couches.

Influence des températures initiales

[Vardelle 94] ont montré que les températures initiales de goutte et de substrat influencent la morphologie du splat. L'objectif de ce paragraphe est de déterminer le comportement thermique des couches en fonction de la valeur des températures initiales de couches et de substrat.

On considère l'impact de couches d'indium d'épaisseur $e_m = 2mm$ et de température initiale $T_m^i = 190^\circ C$ toutes les $t = 0,1s$ sur un substrat d'acier d'épaisseur $e_s = 2mm$ et de température initiale T_s^i variable. La résistance thermique entre deux éléments consécutifs est de $R = 10^{-5} K.m^2.W^{-1}$. Les pas d'espace et de temps réguliers sont respectivement $\Delta x = 3,34.10^{-5}m$ et $\Delta t = 10^{-6}s$. Une fois la troisième couche déposée, le système poursuit son évolution thermique sans apport de nouvelle couche. Les figures 3.23, 3.17, 3.19, 3.24, 3.18 et 3.20 représentent respectivement les températures des éléments aux interfaces pour $T_s^i = 25^\circ C$, $T_s^i = 50^\circ C$ et $T_s^i = 100^\circ C$, puis la position des fronts de solidification dans les trois cas. Les nombres de Stefan associés à ces simulations s'expriment par :

$$Ste = \frac{C_p(T_f - T_s^i)}{L_f} \quad (3.16)$$

et ont pour valeur respectivement $Ste = 2,25$, $Ste = 1,82$ et $Ste = 0,97$. On remarque que plus Ste est faible, plus l'échange thermique entre la première couche et le substrat est faible. A l'instant $t = 0,1s$ juste avant l'impact de la deuxième couche, la température d'interface côté substrat est de $T = 128^\circ C$ pour $Ste = 2,25$, de $T = 134^\circ C$ pour $Ste = 1,82$ et de $T = 148^\circ C$ pour $Ste = 0,97$, ce qui indique que le réchauffement ($T - T_s^i$) est plus fort quand Ste est plus petit. Réciproquement, le refroidissement des couches est plus rapide lorsque Ste augmente, la solidification commence plus tôt et le plateau de solidification dure moins longtemps. Cela signifie que lors de la progression du front de solidification, l'apport de nouvelles couches est susceptible de ralentir la solidification ou de créer une refusion car à faible nombre de Stefan, les couches sont plus chaudes et tendent à maintenir le milieu soit à un état liquide, soit à un état solide proche de la température de transition. Ainsi, à $t = 0,4s$, lorsque $Ste = 2,25$, l'épaisseur solide est de $1,59mm$, lorsque $Ste = 1,82$, elle est de $1,18mm$ et à $Ste = 0,97$, elle est de $0,24mm$. Ces résultats sont en accord avec les affirmations de [Vardelle 94], et montrent qu'un substrat à haute température limite les échanges de chaleur et donc retarde la solidification. Dans la gamme de nombres de Stefan présentée, l'évolution de l'épaisseur est linéaire en fonction de Ste .

Pour une température initiale de substrat fixée, lorsque la température initiale des couches augmente, les échanges thermiques sont plus rapides. La solidification débute alors plus tardivement à cause de la différence entre la température initiale et celle de début de solidification.

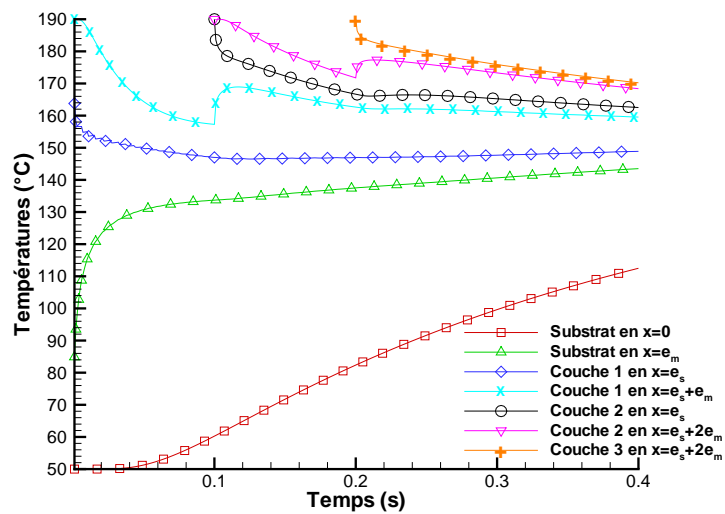


Figure 3.17 : Températures de couches successives avec un substrat initialement à $50^{\circ}C$

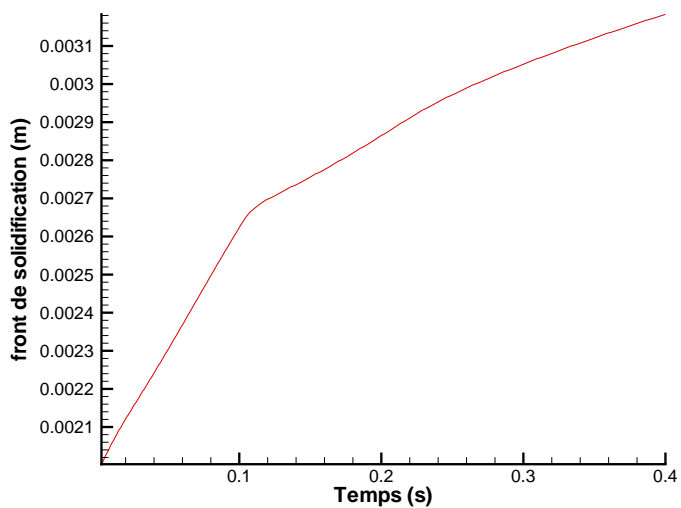


Figure 3.18 : Front de solidification avec un substrat initialement à $50^{\circ}C$

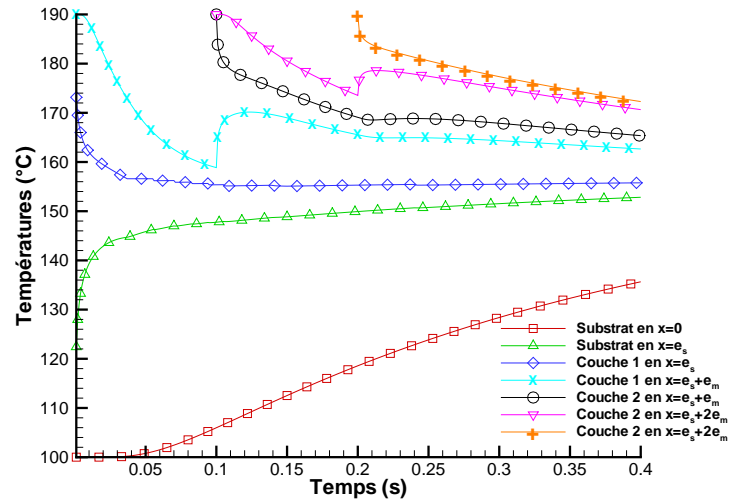


Figure 3.19 : *Températures de couches successives avec un substrat initialement à 100° C*

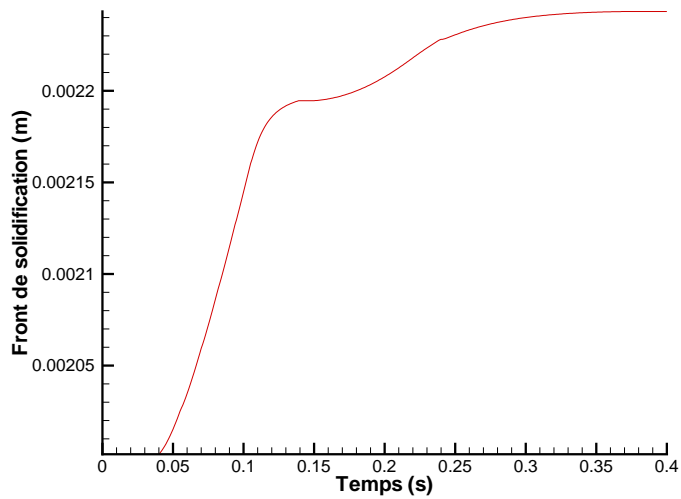


Figure 3.20 : *Front de solidification avec un substrat initialement à 100° C*

Influence de la résistance thermique de contact

On considère que les résistances thermiques de contact entre deux couches ou entre la première couche et le substrat sont constantes et possèdent la même valeur. Les figures 3.21, 3.23, 3.25, 3.22, 3.24 et 3.26 sont respectivement les températures prises aux interfaces du substrat et des couches pour des résistances de $10^{-15} K.m^2.W^{-1}$, $10^{-5} K.m^2.W^{-1}$ et $10^{-4} K.m^2.W^{-1}$, puis les fronts de solidification avec les mêmes résistances. Lorsque la résistance est faible ($10^{-15} K.m^2.W^{-1}$), la température d'interface côté substrat atteint une valeur importante, de l'ordre de $140^\circ C$. Les échanges thermiques sont très rapides et la première couche a le temps de totalement solidifier, comme l'illustre le 'plateau' de la figure 3.22. L'ajout d'une deuxième couche chaude provoque une refusion partielle avant que la solidification ne recommence. Il apparaît que lorsque la résistance augmente, la température du substrat à l'interface avec la première couche atteint une valeur moins importante et est moins sensible aux apports d'énergie des couches suivantes comme le montrent les figures 3.21, 3.23 et 3.25 à l'instant $t = 0,1 s$. Sa valeur influence les températures d'interface du substrat et des couches et donc, par apport d'énergie des couches suivantes, cette résistance modifie la qualité du contact et autorise la solidification et la refusion de l'indium.

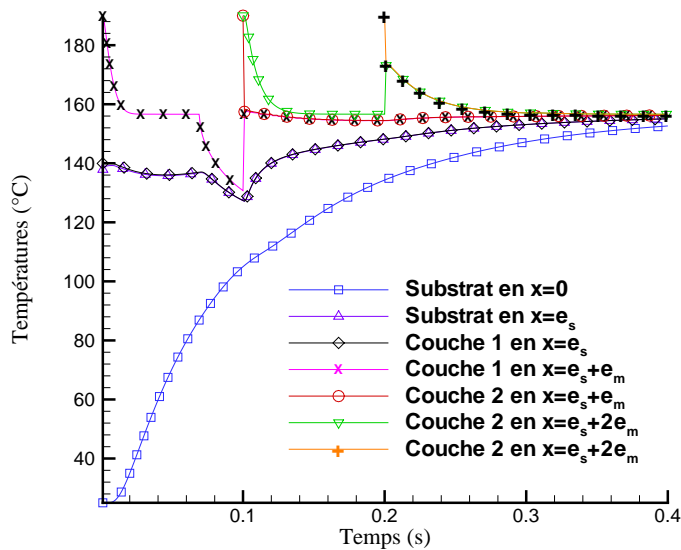


Figure 3.21 : Températures de couches avec $RTC = 10^{-15} K.m^2.W^{-1}$

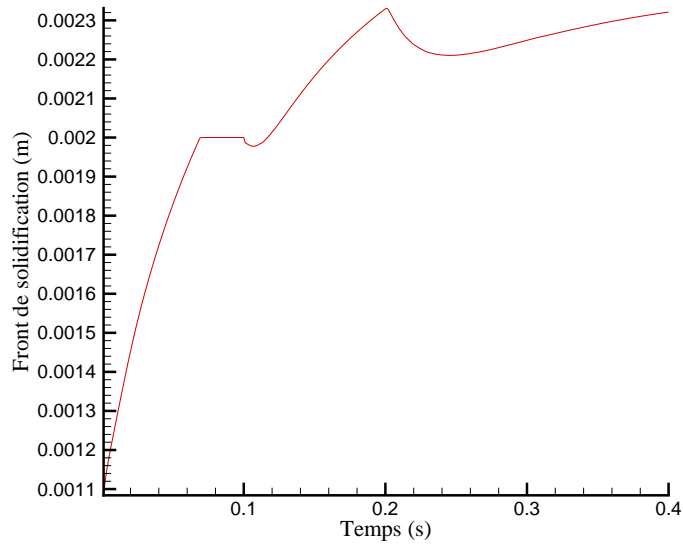


Figure 3.22 : *Front de solidification avec $RTC = 10^{-15} K.m^2.W^{-1}$*

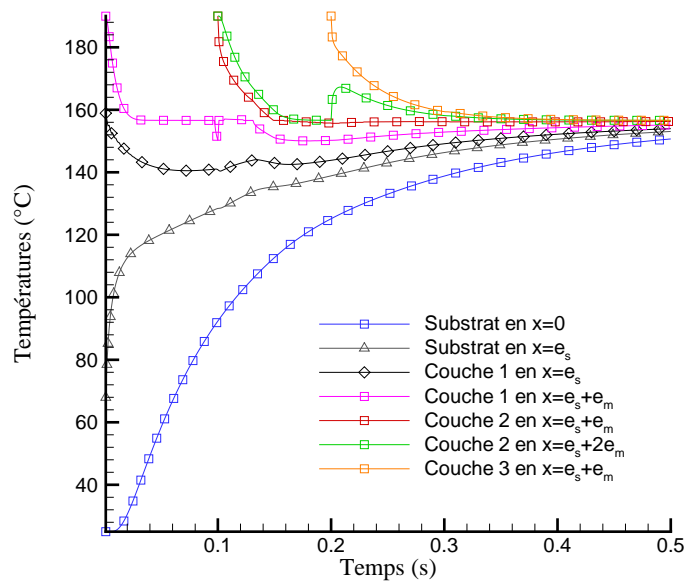


Figure 3.23 : *Températures de couches avec $RTC = 10^{-5} K.m^2.W^{-1}$*

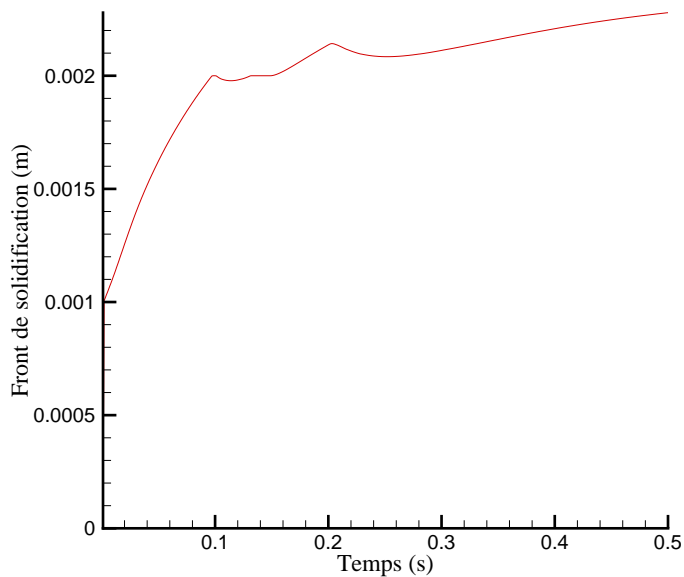


Figure 3.24 : *Front de solidification avec $RTC = 10^{-5} K.m^2.W^{-1}$*

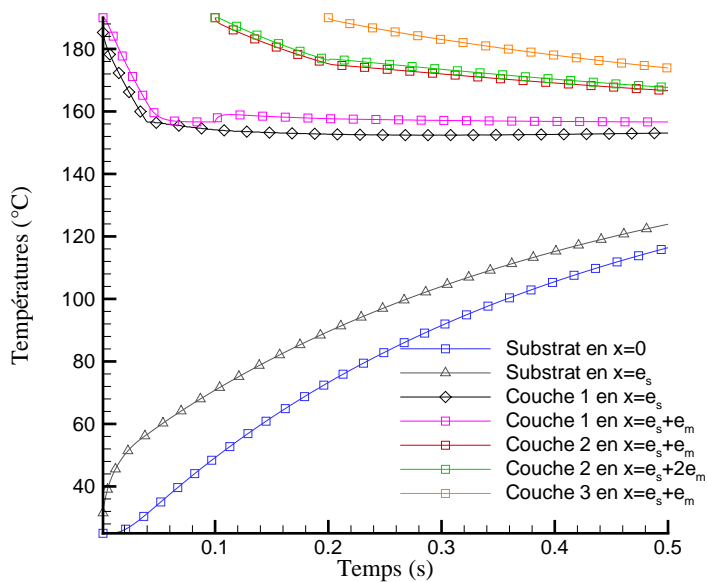


Figure 3.25 : *Températures de couches avec $RTC = 10^{-4} K.m^2.W^{-1}$*

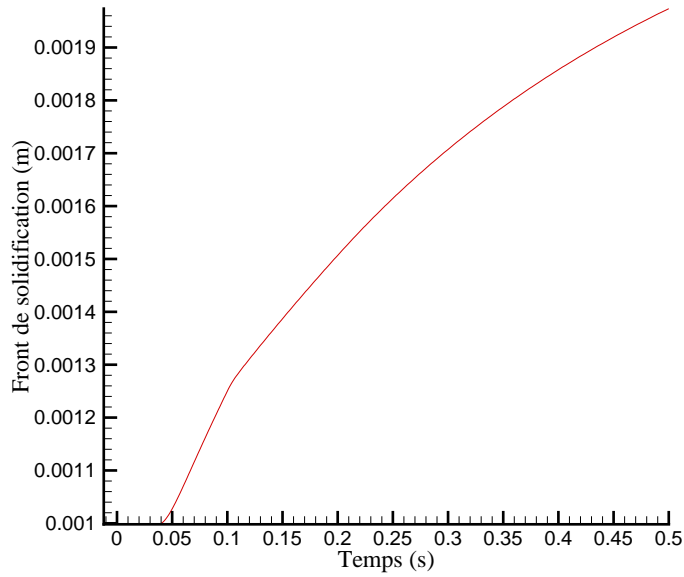


Figure 3.26 : *Front de solidification avec $RTC = 10^{-4} K.m^2.W^{-1}$*

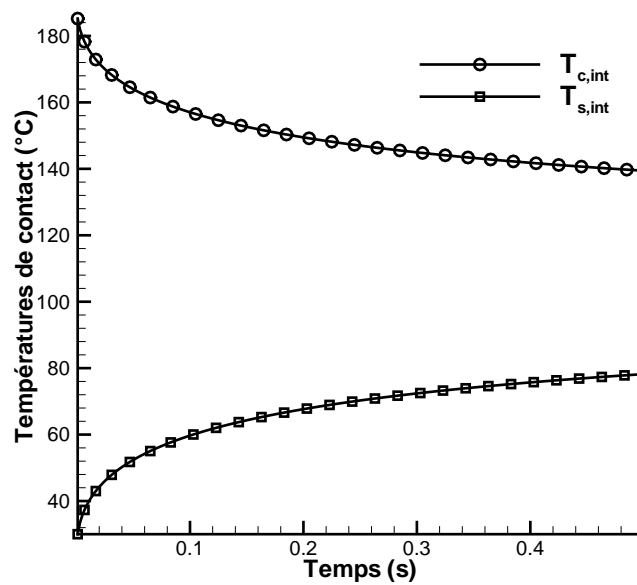


Figure 3.27 : *Températures obtenues par l'expression 3.18 avec $RTC = 10^{-4} K.m^2.W^{-1}$*

De plus, au bout de quelques impacts, la température du substrat de subit plus les variations dues à l'apport d'énergie thermique des impacts suivants. Il n'est donc plus en mesure de pomper la chaleur de l'indium et ne participe plus au refroidissement et à la solidification de l'indium.

Il n'existe pas de solution analytique simple concernant le contact brusque de deux milieux en tenant compte à la fois d'une résistance thermique de contact et de la solidification. Cependant, lorsque la résistance thermique est importante ($R_{TC} = 10^{-4} m^2.K.W^{-1}$ dans le cas présent) la solidification se produit tardivement. Il est alors intéressant de comparer la température de contact obtenue par la simulation à celle décrite par l'expression analytique du contact brusque de deux milieux semi-infinis avec résistance thermique de contact sans solidification, soit :

$$T_{s,int} = T_{s,i} + \frac{b_c}{b_s + b_c} (T_c^\infty - T_s^\infty) [-e^{h^2 t} \operatorname{erfc}(h\sqrt{t}) + 1] \quad (3.17)$$

$$T_{c,int} = T_{c,i} - \frac{b_s}{b_s + b_c} (T_c^\infty - T_s^\infty) [-e^{h^2 t} \operatorname{erfc}(h\sqrt{t}) + 1] \quad (3.18)$$

avec $T_{s,int}$ et $T_{c,int}$ les températures de contact de substrat et de première couche, b_s et b_c les effusivités de substrat et de couche et h défini par :

$$h = \frac{b_s + b_c}{R b_s b_c}$$

Les détails de ce calcul sont en annexe A. Ces températures sont illustrées en figure 3.27. Pendant les tous premiers instants ($t < 0,02s$) les comportements analytique et numérique sont très proches. Puis la solidification intervient ce qui maintient la température côté couche à $156,6^\circ C$ alors que la température analytique continue de descendre. Pendant cette même période, la température d'interface numérique côté substrat augmente davantage que la température analytique car le substrat capte de la chaleur dégagée par changement de phase. Aux temps plus longs, le système reçoit de l'énergie thermique par impact de couches chaudes ce qui laisse la température de contact côté couche à valeur élevée alors que la température analytique continue de diminuer. De même, la température analytique côté substrat est plus faible que la température numérique car les couches successives apportent de plus en plus de chaleur au substrat. La comparaison à l'expression analytique se réduit donc à des temps très courts et ne peut donc pas servir de référence pertinente pour ce type d'étude.

Si on considère à présent le cas où $R_{TC} = 10^{-15} m^2.K.W^{-1}$, il est intéressant de comparer la température de contact à celle que l'on obtient par voie analytique lors du

contact brusque de deux milieux semi-infinis sans résistance thermique de contact, l'un se solidifiant [Loulou 97]. Dans ce cas, la température d'interface s'exprime par :

$$T_{int} = \frac{T_f b_c + T_{s,i} b_s \operatorname{erf}(\xi)}{b_c + b_s \operatorname{erf}(\xi)} \quad (3.19)$$

où ξ est la solution de l'équation transcendante suivante (en considérant que les conductivités, masses volumiques et capacités calorifiques des couches liquides et solides sont identiques) :

$$\frac{\exp(-\xi^2)}{\operatorname{erf}(\xi)} + \frac{T_f - T_{c,i}}{T_f - T_{int}} \cdot \frac{\exp(-\xi^2)}{\operatorname{erfc}(\xi)} = \frac{\xi L_f \sqrt{\pi}}{c_{pc}(T_f - T_{int})} \quad (3.20)$$

Selon les données du problème, la température analytique est $T_{int,th} = 130^\circ\text{C}$, cette température n'ayant de sens que lorsqu'il s'est formé une pellicule solide car l'hypothèse principale de l'expression précédente suppose que la température d'interface $T_{int,th}$ est constante, ce qui n'est pas le cas pendant la transformation. Durant les premiers instants de simulation, la température de contact numérique descend et est maintenue à un palier de 136°C lors de la solidification de la couche, puis diminue pour atteindre la valeur analytique. Lors de l'impact de la seconde couche, la température numérique augmente de nouveau et s'éloigne de la solution théorique à nouveau à cause de l'apport de chaleur par les couches suivantes. Aux temps longs, cette expression analytique n'est donc pas pertinente pour cette étude.

Les deux solutions analytiques de contact brusque de deux milieux ne présentent pas beaucoup d'intérêt par rapport aux simulations car dès l'impact de la deuxième couche, la configuration du système numérique s'éloigne de celle du cas analytique ce qui limite la comparaison.

Influence de la fréquence d'impact

Les couches successives arrivent les unes après les autres à une fréquence donnée f . La fréquence d'impact correspond à la vitesse d'apport d'énergie thermique. Plus elle est élevée, et plus le système reçoit de la chaleur rapidement.

On considère dans les simulations de ce paragraphe que le substrat initialement à $T_s^i = 25^\circ\text{C}$ et les couches d'indium initialement à $T_m^i = 190^\circ\text{C}$ ont une épaisseur respectivement

de $e_s = 2mm$ et $e_m = 2mm$. La résistance thermique de contact entre deux éléments est imposée à $R_{TC} = 10^{-5} K.m^2.W^{-1}$. Les pas d'espace et de temps sont réguliers et de valeurs $\Delta x = 5,33.10^{-5}m$ et de $\Delta t = 1.10^{-6}s$. Plusieurs valeurs de fréquence d'impact f sont utilisées dans les simulations afin d'en vérifier l'influence sur la progression du front de solidification.

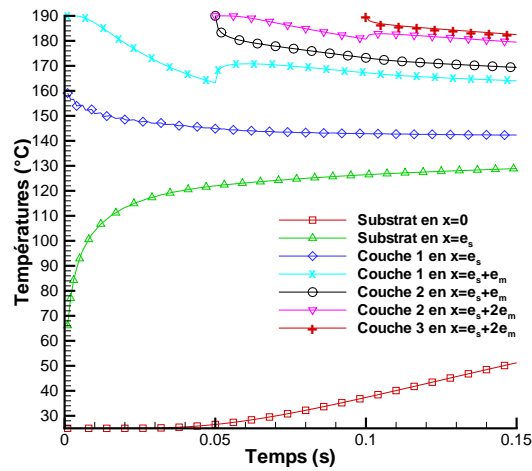


Figure 3.28 : *Températures de couches avec $f = 20s^{-1}$*

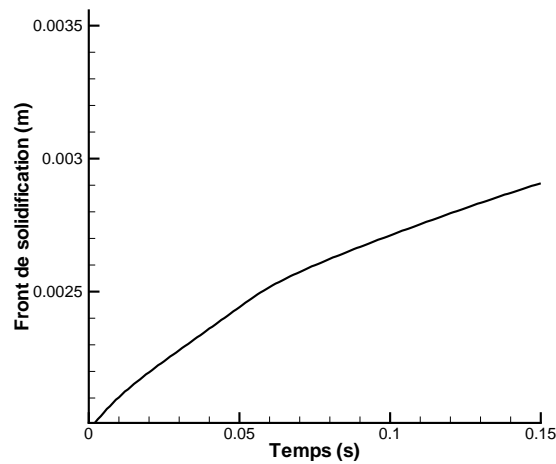


Figure 3.29 : *Front de solidification avec $f = 20s^{-1}$*

En fonction de la fréquence de déposition des couches successives, le système reçoit une quantité de matière qui agrandit la taille du domaine et augmente la quantité de chaleur du système. Afin d'examiner l'influence de la fréquence d'impact sur la solidification, deux types de simulation sont réalisés :

- Impact de couches identiques à différentes fréquences.
- Impact de couches d'épaisseur deux fois plus faible à fréquence deux fois plus grande.

Dans le premier type de simulations, on considère un substrat d'épaisseur $e_s = 2mm$ initialement à $25^\circ C$ sur lequel on dépose à intervalles de temps réguliers t_{car} des couches de métal d'épaisseur $e_m = 2mm$ de température initiale de $190^\circ C$. La position des fronts de solidification est examinée pour des simulations avec des temps t_{car} respectivement de $0,01s$, $0,05s$ et $0,1s$. Les résultats montrent que les comportements en termes de températures et de position du front de solidification sont globalement les mêmes. Lorsqu'une nouvelle couche est déposée sur le système, les températures d'interface de cette couche et de la précédente évoluent en fonction des effusivités des matériaux et des températures juste avant le nouvel impact. Lorsque les couches arrivent rapidement, la température superficielle du système avant le nouvel impact reste à une valeur élevée et lors de la déposition, ces températures de contact restent élevées. A faible fréquence, le niveau de température de contact entre deux impacts successifs baisse davantage ce qui facilite une diminution de la température des couches superficielles au fur et à mesure des impacts. De plus, lorsque t_{car} diminue, ce qui correspond à une fréquence d'impact plus grande, le système récupère rapidement de la chaleur ce qui maintient le système à une température élevée en surface et limite la progression du front de solidification. Ainsi, par exemple lors de l'impact d'une quatrième couche, ce qui correspond respectivement aux instants $t = 0,04s$, $t = 0,2s$ et $t = 0,4s$, les fronts de solidification atteignent les positions de $0,35mm$, $1,07mm$ et $1,59mm$. A plus haute fréquence, le système se solidifie plus difficilement car la chaleur apportée est trop abondante et celle-ci n'a pas le temps de diffuser dans les couches précédentes. La fréquence d'impact joue donc un rôle sur l'épaisseur de couche solidifiée.

Dans le deuxième type de simulations, on compare les résultats obtenus par l'impact de couches de métal de $2mm$ d'épaisseur impactant à intervalles de temps $t_{car} = 0,1s$ à ceux obtenus lors de l'impact de couches de $1mm$ d'épaisseur et impactant avec $t_{car} = 0,05s$. De cette manière, toutes les $0,1s$, les quantités de matière et de chaleur apportées sont

conservées mais réparties différemment dans le temps. La comparaison des températures montre qu'au niveau du substrat, les températures sont relativement proches. Lorsque $t_{car} = 0,05s$, la température de substrat en $x = e_s$ subit les variations dues à l'imposition de la première et de la deuxième couche puis reste rapidement insensible à l'apport des couches suivantes. Au bout de $t = 0,2s$, les deux simulations affichent un comportement de température de substrat pratiquement identique ($T(x = e_s, t = 0,2s, t_{car} = 0,05s) = 146^\circ\text{C}$ et $T(x = e_s, t = 0,2s, t_{car} = 0,1s) = 141^\circ\text{C}$). Au niveau des couches de métal, les températures subissent également les évolutions dues à l'impact de couches suivantes, c'est à dire une légère élévation par transfert de matière à 190°C . Les températures aux mêmes cotes pour les deux fréquences d'impact présentent des profils légèrement différents à cause de la distribution temporelle de l'apport de chaleur par les nouvelles couches.

Par comparaison des fronts de solidification résultants, les évolutions des deux courbes sont relativement proches, tant en profil qu'en valeur. Lors des impacts, la vitesse de solidification varie, passant d'une valeur importante à une valeur plus faible à cause de l'apport de chaleur par l'impact d'une couche qui s'oppose à la progression du changement de phase. Lorsque $t_{car} = 0,05s$, cette variation de la vitesse de solidification intervient plus souvent que pour $t_{car} = 0,1s$ mais la différence de température entre la nouvelle couche et la précédente est plus faible lorsque $t_{car} = 0,05s$ car la nouvelle couche de 1mm d'épaisseur apporte moins d'énergie thermique (par rapport à la couche d'épaisseur de 2mm de l'autre simulation) et la température de la couche précédente est encore importante, ce qui entraîne une variation de la vitesse de solidification moins prononcée que lorsque $t_{car} = 0,1s$. De plus, lorsque $t_{car} = 0,1s$, la température de la nouvelle couche diminue au cours du temps. Ainsi, dans cette simulation, à $t = 1,5s$, la température dans toute la nouvelle couche est inférieure à 190°C par transferts thermiques. Dans le cas où $t_{car} = 0,05s$, à $t = 1,5s$ une nouvelle couche est imposée avec une température uniforme de 190°C . Cette situation contribue au retard à la solidification par rapport au cas où $t_{car} = 0,1s$. On obtient par conséquent un front de solidification de plus grande épaisseur dans le cas où $t_{car} = 0,1s$, que lorsque $t_{car} = 0,05s$. Par exemple, lorsque $t_{car} = 0,05s$, une épaisseur de front solide est observée à l'instant $t = 4,01s$ alors qu'avec $t_{car} = 0,1s$, cette même épaisseur est atteinte lorsque $t = 3,47s$.

De manière générale, diminuer la quantité de matière tout en augmentant la fréquence d'impact permet de réduire la vitesse de solidification et donc de garder un film liquide à la surface du système.

Lorsque la fréquence d'impact des couches est élevée, l'apport de chaleur est tel qu'il

limite la progression du front de solidification. En effet, le temps nécessaire à la diffusion de la chaleur dans le substrat froid et donc au refroidissement des couches est supérieur à l'intervalle de temps qui sépare l'impact de deux couches successives. Ainsi, lors de l'impact de la première couche, la solidification est initiée très rapidement, mais le système accumule de l'énergie ce qui interdit la progression de la solidification et finit par refondre la zone solidifiée lors de l'impact de la première couche.

Inversement, lorsque la fréquence d'impact est faible, l'apport d'énergie est plus espacé et le système a plus de temps pour diffuser la chaleur vers le substrat. Lors de la déposition d'une nouvelle couche, le front de solidification peut régresser par refusion partielle du métal, puis la diffusion de la chaleur permet le refroidissement du système de couches et donc sa solidification : il n'y a donc pas accumulation de la chaleur et la position du front de solidification augmente. Cependant, au fur et à mesure des impacts successifs, la température du système augmente globalement, ce qui se traduit par une diminution de la vitesse de propagation du front de solidification.

L'intérêt du choix de la fréquence d'impact est de pouvoir globalement solidifier le système en refondant partiellement et périodiquement la surface du film afin de lisser l'état de surface du revêtement. De plus, le choix de la température initiale des nouvelles couches influence l'épaisseur de métal refondu.

Jusqu'à présent, les études d'impact consécutifs de couches n'ont pas pris en compte l'influence de la dynamique sur le système. La partie suivante consiste donc à reprendre la section consacrée à l'impact simultané de gouttes et d'ajouter la présence de gouttes consécutives.

3.2.3 Prise en compte des phénomènes hydrodynamiques

La configuration de l'impact simultané de plusieurs gouttes est reprise, à laquelle on ajoute la présence de gouttes suivantes de même rayon, vitesse et température initiaux. Les impacts sont définis par une fréquence f . Cette configuration est illustrée en figure 3.30.

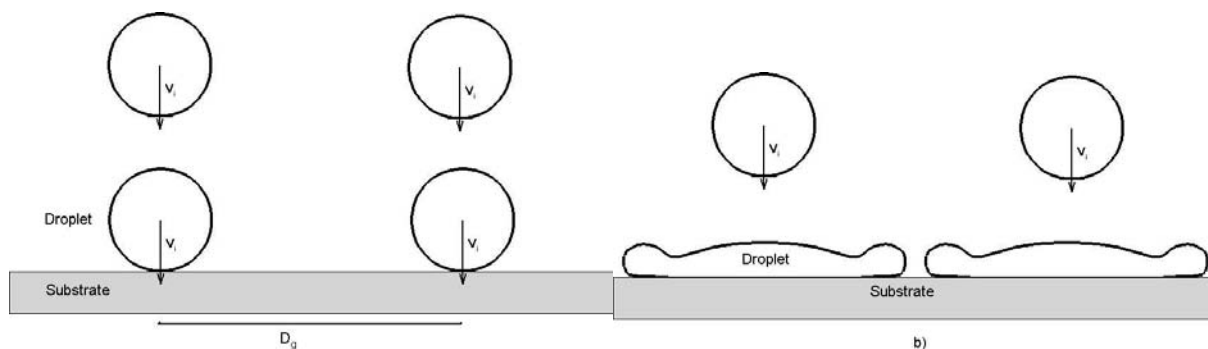


Figure 3.30 : Configuration d'impacts successifs de gouttes identiques

Les gouttes étudiées ont un diamètre de $D_i = 2\text{mm}$, une vitesse d'impact de $V_i = 0,1\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ et sont constituées d'indium. Selon la fréquence d'impact, une goutte suivante peut s'écraser sur la précédente soit pendant la phase d'étalement de cette dernière, ce qui contribue à augmenter l'énergie cinétique de l'ensemble et ce qui va donc impliquer un jet de rencontre plus haut, soit pendant le retour de la matière après la rencontre de sa voisine, ce qui limite l'énergie cinétique contenue dans le fluide, mais ce cas est susceptible d'entraîner l'éjection de matière sous forme de gouttes secondaires.

La figure 3.31 illustre le comportement général de l'impact de gouttes successives. Les courbes correspondent aux hauteurs de métal sur l'axe d'impact et l'axe de rencontre de deux gouttes. Au niveau de l'axe d'impact, la hauteur de métal diminue lors de l'étalement de la première goutte, puis augmente soudainement car elle correspond à l'arrivée de la seconde particule fluide. Puis la hauteur diminue et atteint une valeur supérieure à la hauteur minimale de la première goutte. De proche en proche, la hauteur de métal sur l'axe d'impact montre un comportement cyclique mais à une hauteur de plus en plus importante. De même, sur l'axe d'impact, la hauteur augmente lors de la rencontre de la première série de goutte puis commence à diminuer lorsque le jet de matière repart vers l'axe d'impact. La seconde série de gouttes, qui apporte de l'énergie cinétique, limite le retour de la matière vers l'axe d'impact et contribue à une seconde montée du jet sur l'axe de rencontre, plus haute que lors de la première série. Au fur et à mesure des impacts de gouttes suivantes, cette hauteur augmente en gardant une évolution cyclique.

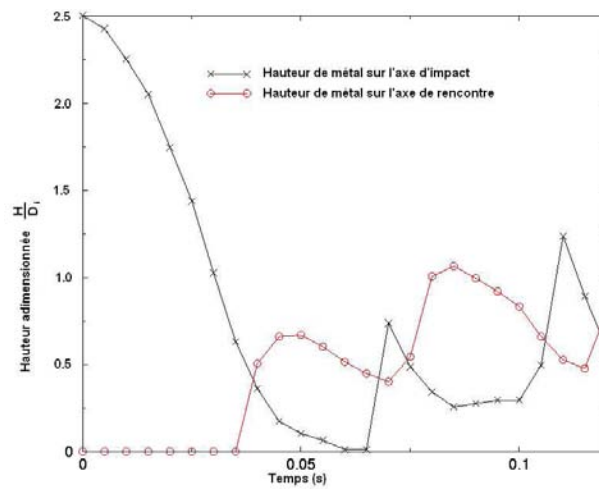


Figure 3.31 : Hauteurs de métal sur les axes d'impact et de rencontre. $Re = 1081$ et $We = 1,3$

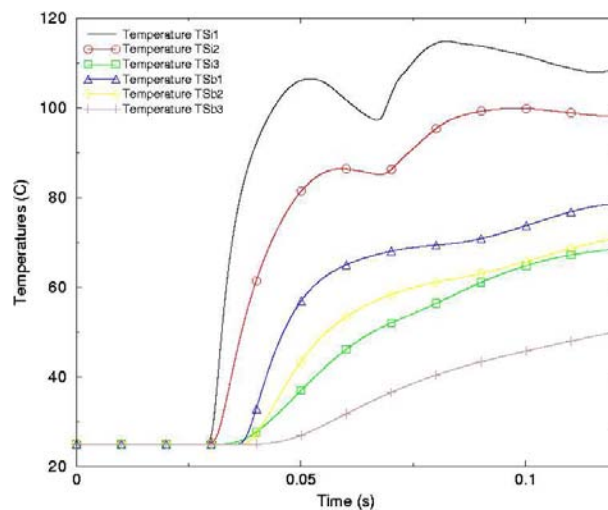


Figure 3.32 : Températures de substrat au niveau des axes d'impact et de rencontre. $Re = 1081$ et $We = 1,3$

Influence du nombre de Stefan

Lorsque le changement de phase est pris en compte, le métal se solidifie au contact du substrat ce qui modifie l'écoulement. Les figures 3.33 et 3.34 représentent les hauteurs de métal avec et sans changement de phase dans le cas de gouttes d'indium de diamètre

initial $D_i = 4.10^{-3}m$ de vitesse $V_i = 0,05m.s^{-1}$ et de température initiale $T_i = 190^\circ C$, impactant un substrat d'acier (tableau 3.3) à $T_{sub}^i = 25^\circ C$. Une résistance thermique de contact constante de $10^{-4}m.K.W^{-1}$ est prise en compte entre le substrat et les gouttes. Les dimensions du domaine d'étude sont de $6mm$ sur $10mm$ (soit $D_g = 12mm$), le pas d'espace est de $\Delta x = 1.10^{-4}m$ et le pas de temps est de $\Delta t = 1.10^{-5}s$.

| | Masse volumique ($kg.m^{-3}$) | Conductivité ($W.m^{-1}.K^{-1}$) | Chaleur spécifique ($J.K^{-1}.kg^{-1}$) |
|----------|------------------------------------|---------------------------------------|--|
| Substrat | 7350 | 36,5 | 465 |

Tableau 3.3 : *Caractéristiques du substrat d'acier*

On remarque que lorsque le changement de phase n'est pas actif, la hauteur sur l'axe d'impact subit une amplitude plus importante. Lors de l'impact de la troisième goutte, la hauteur est plus grande lorsque le changement de phase est activé. En effet, lorsque la solidification intervient, la matière est figée, entre autres sur l'axe d'impact, et la troisième goutte s'écrase donc sur une hauteur de métal plus importante. A l'inverse, lorsque la solidification n'intervient pas, la matière continue de s'écouler et lors de l'impact, la couche de métal liquide possède une épaisseur localement sur l'axe d'impact moins grande (figure 3.33). Sur l'axe de rencontre, comme montré en figure 3.34, le changement de phase ne modifie pas l'instant où les gouttes se rencontrent. Pendant la première montée du jet de rencontre, il y a peu de différences entre les deux courbes, car la couche solidifiée en surface du substrat influence peu la dynamique de l'ensemble. Lors de l'impact de la seconde série de gouttes, la hauteur du jet de rencontre est plus grande lorsque la solidification n'est pas prise en compte. En effet, le changement de phase fige le métal et bloque la dynamique. Ainsi, avec moins d'énergie cinétique disponible, le jet de rencontre atteint une altitude plus petite que dans le cas sans solidification.

Au même titre que les hauteurs de goutte, il est intéressant d'observer les épaisseurs de couche solidifiée sur les axes d'impact et de rencontre. Sur la figure 3.35 sont représentées les hauteurs de goutte et les épaisseurs de métal solide pour $Re = 1081$, $We = 1,3$ et $Ste = 0,3$. Les hauteurs de gouttes suivent les évolutions décrites précédemment. Les épaisseurs de métal, quant à elles, ont pratiquement les mêmes comportements, ce qui correspond à une évolution quasi 1D. Grâce aux allers-retours du métal liquide entre

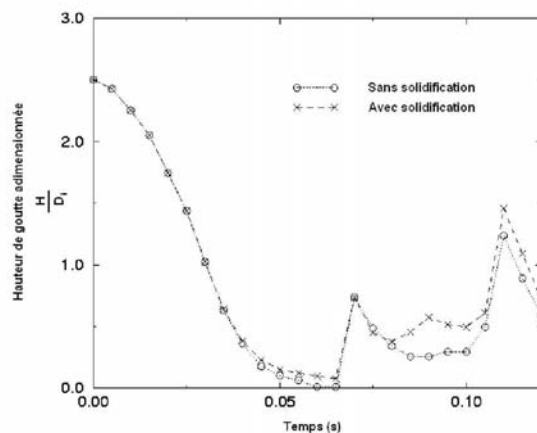


Figure 3.33 : Comparaison des hauteurs de métal avec et sans solidification sur l'axe d'impact. $Re = 1081$ et $We = 1,3$

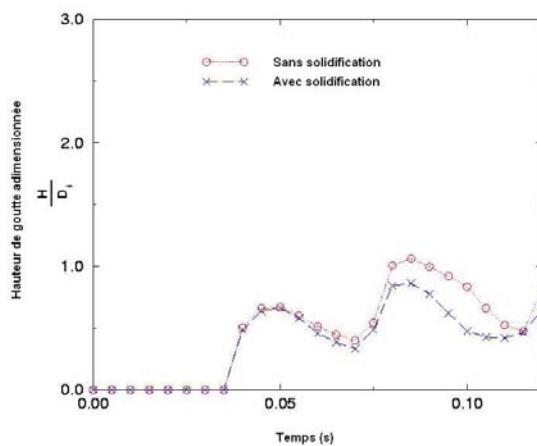


Figure 3.34 : Comparaison des hauteurs de métal avec et sans solidification sur l'axe de rencontre. $Re = 1081$ et $We = 1,3$

les axes d'impact et de rencontre, la température devient uniforme ce qui autorise une propagation homogène du front de solidification.

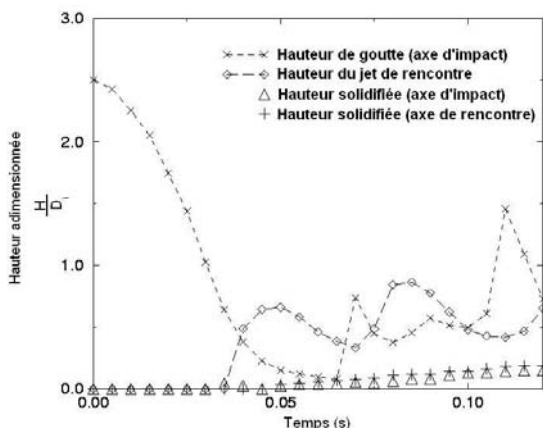


Figure 3.35 : Hauteurs de goutte et de métal solidifié aux positions d'impact et de rencontre. $Re = 1081$, $We = 1,3$ et $Ste = 0,3$

En portant notre attention sur les fronts de solidification (figure 3.36) on remarque que le comportement n'est pas tout à fait 1D. Sur l'axe d'impact, la solidification commence à $t = 0,031s$, le front s'épaissit jusqu'à $H/D_i = 0,05$ puis diminue. Lors de l'étalement de la goutte, la chaleur apportée par convection réchauffe localement la goutte et refond la zone solide du métal. L'étalement continue ce qui produit une faible épaisseur de métal sur l'axe d'impact et la solidification peut à nouveau s'activer. Lorsque la deuxième goutte chaude s'écrase, l'apport de chaleur produit une refusion partielle, ce qui se traduit par une régression du front de solidification à la position d'impact à $t = 0,07s$. Au niveau de l'axe de rencontre, le front de solidification débute plus tardivement (à $t = 0,044s$) au moment où le jet de rencontre commence sa phase descendante. Cela correspond à l'instant où la convection est faible puisque les vitesses ascendantes s'annulent pour initier la phase descendante. La solidification peut alors se réaliser dans des conditions plus favorables. Une fois le changement de phase actif, la vitesse de ce front est plus grande que celle du front sur l'axe d'impact. En effet, entre les axes d'impact et de rencontre, le métal chaud en écoulement se refroidit ce qui permet à la matière de se solidifier plus facilement sur l'axe de rencontre, en étant moins sujet à une éventuelle refusion.

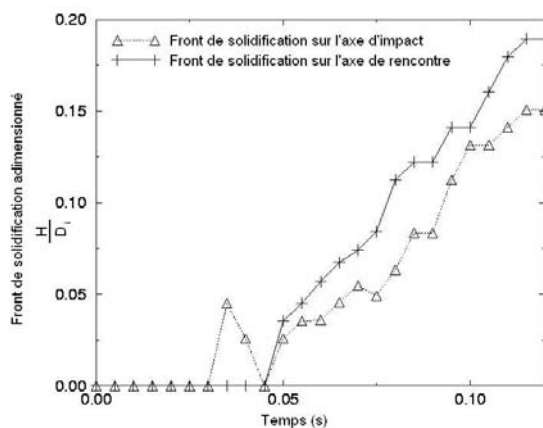


Figure 3.36 : Hauteurs de métal solidifié sur les axes d'impact et de rencontre.

$$Re = 1081, We = 1,3 \text{ et } Ste = 0,3$$

Les défauts éventuels du dépôt

Les études des paragraphes précédents ont montré que la dynamique des gouttes influence le comportement de solidification du métal. Réciproquement, la vitesse de solidification peut modifier la dynamique et par conséquent la structure du revêtement. En effet, en fonction de la fréquence d'impact, les gouttes s'écrasent sur le film liquide en mouvement du plan d'impact vers le plan de rencontre ou au contraire en mouvement du plan de rencontre vers le plan d'impact. Dans le premier cas, la nouvelle goutte fournit davantage d'énergie cinétique ce qui tend à augmenter la hauteur du jet de rencontre lorsque le nouveau système atteint le plan de rencontre. La solidification est alors perturbée par l'apport d'énergie thermique au point d'impact. Le métal se solidifie plus difficilement sur cette zone ou même refond alors qu'au plan de rencontre, la solidification continue de progresser. Cependant, cet apport rapide de chaleur permet de maintenir le revêtement à l'état liquide pendant un temps suffisamment long pour permettre l'évacuation d'éventuelles bulles d'air.

Dans le cas où la couche liquide est en mouvement du plan de rencontre vers le plan d'impact lors de l'écrasement d'une goutte suivante, l'impact génère des pièges d'air entre la nouvelle particule fluide et le revêtement liquide. Lorsque la solidification est rapide (nombre de Stefan important) les bulles d'air restent emprisonnées dans le métal en solidification ce qui augmente la porosité de la couche de métal. Un compromis entre fréquence

d'impact (vitesse d'apport de chaleur) et température de substrat (vitesse de refroidissement) permet donc non seulement de maîtriser la hauteur de rencontre des gouttes et donc leur stabilisation, mais aussi de modifier la porosité du revêtement en permettant le rejet des bulles d'air ou en les figeant.

Il est cependant nécessaire de rappeler que cette étude est bidimensionnelle. L'air ne peut donc pas être évacué selon la troisième dimension et reste prisonnier. Ainsi, il serait utile de réaliser des simulations en 3D afin de vérifier si ces défauts sont réels ou s'ils ne sont dus qu'aux propriétés bidimensionnelles des simulations. C'est pourquoi nous ne nous étendrons pas davantage sur cet aspect.

3.3 Conclusion du chapitre

Lors de l'impact de gouttes identiques simultanément ou successivement, les simulations numériques ont montré que la hauteur du jet de rencontre est fonction de plusieurs paramètres. Les nombres de Reynolds, de Weber ont chacun un rôle sur la hauteur du jet de rencontre et sur le temps de stabilisation du film fin résultant. De plus, la fréquence d'impact des gouttes influence l'apparition de pièges d'air susceptibles de rester emprisonnés dans le film et d'augmenter la porosité du revêtement. Ainsi, en modifiant les paramètres initiaux en termes de vitesse de particules fluides et de température de substrat ou de gouttes, il est possible de contrôler la morphologie du revêtement final. Les simulations ont été réalisées en 2D ce qui a permis de mettre en évidence la formation de certains défauts en les accentuant. Des simulations 3D permettraient de quantifier ces défauts et de vérifier qu'ils ne sont pas issus d'un effet 2D. De plus, certains phénomènes ne sont pas pris en compte dans la modélisation numérique actuelle. Il est donc nécessaire de compléter cette étude par des analyses thermiques expérimentales présentées dans le chapitre suivant.

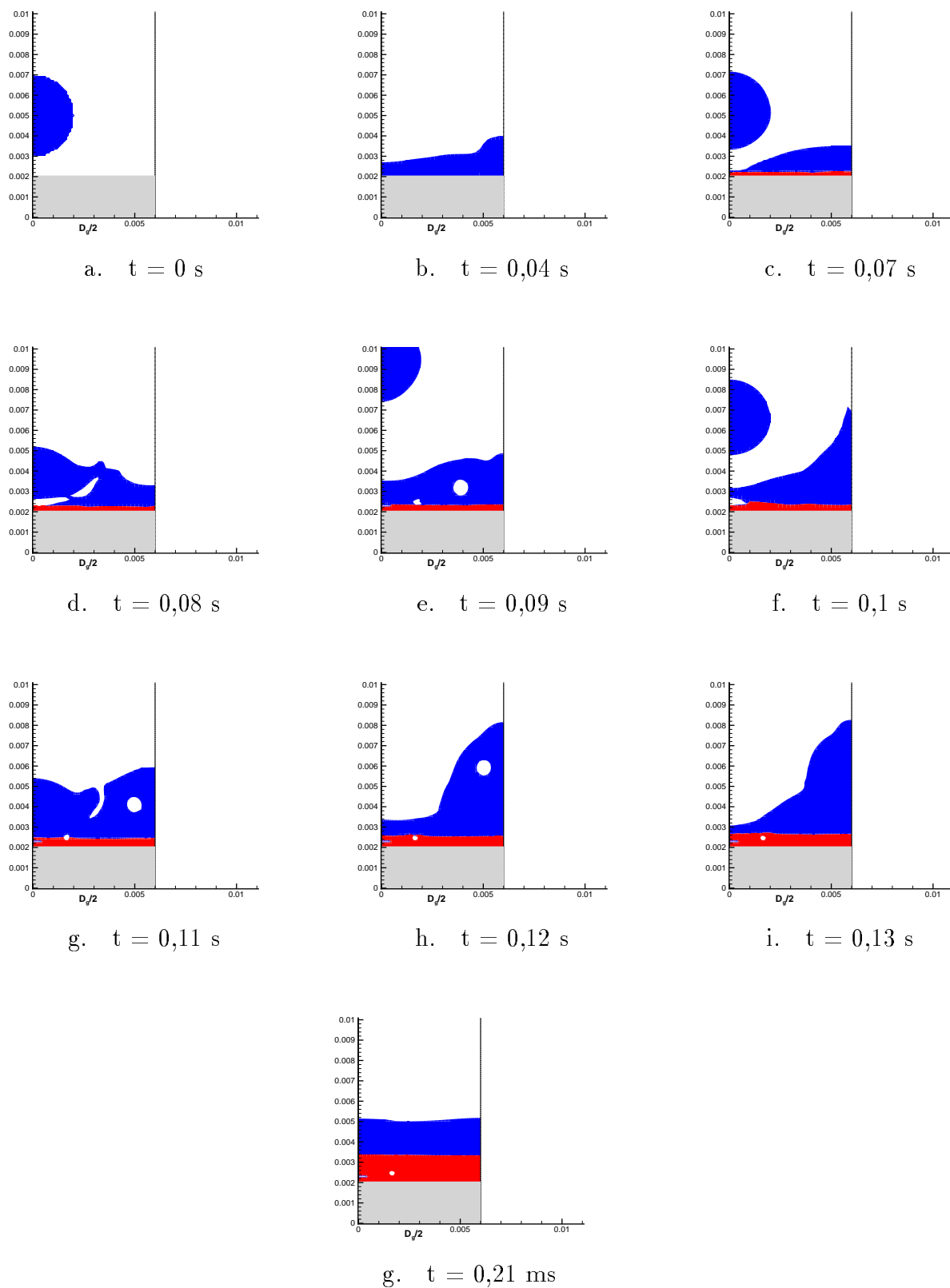


Figure 3.37 : Simulation numérique de l'impact de gouttes successives à faible fréquence sur substrat ($f = 25\text{s}^{-1}$, $Re = 108$, $We = 0,1$ et $Ste = 1$) (Bleu: liquide, rouge: solide)

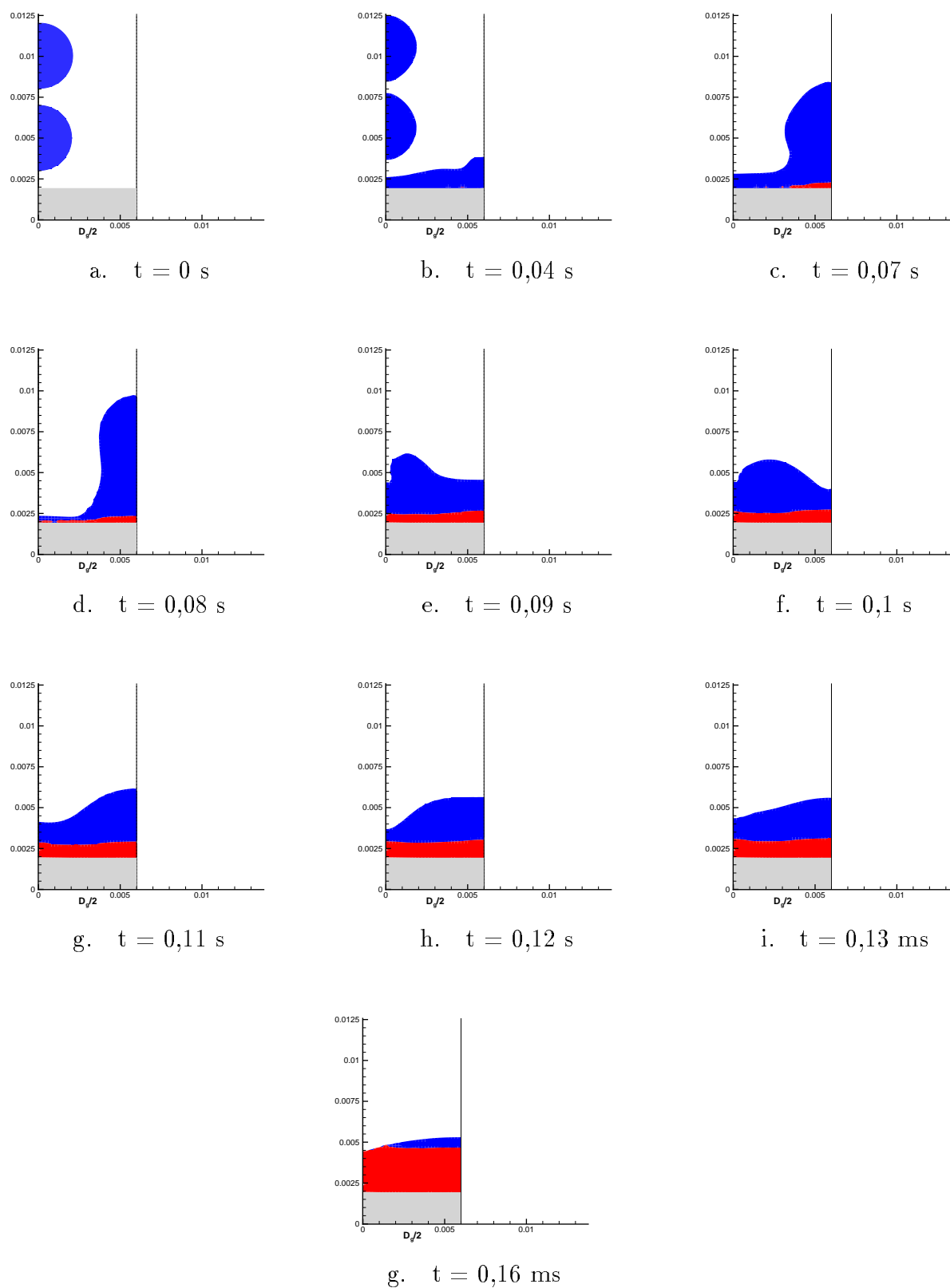


Figure 3.38 : Simulation numérique de l'impact de gouttes successives à fréquence élevée ($f = 50\text{s}^{-1}$, $Re = 108$, $We = 0,1$ et $Ste = 1$) (Bleu: liquide, rouge: solide)

Chapitre 4

Analyse expérimentale

L'étude numérique de l'impact de gouttes permet de définir la constitution du revêtement en fonction de la vitesse, de la dimension des gouttes et des températures de goutte et de substrat. Certains phénomènes, tel que la cinétique de solidification, sont cependant difficiles à déterminer seulement par voie numérique. L'analyse expérimentale devient nécessaire pour observer le comportement réel des matériaux et pour compléter les résultats obtenus par les simulations.

L'impact de plusieurs gouttes de métal sur un substrat et l'analyse à la fois hydrodynamique et thermique des particules sont difficiles à réaliser à cause des échelles de temps et d'espace. Beaucoup d'études se limitent à l'impact d'une particule fluide sur un substrat, ou bien à l'étude de l'influence de paramètres comme la vitesse de projection ou la température sur un spray thermique. Afin de découpler les phénomènes thermiques des phénomènes dynamiques, deux dispositifs expérimentaux sont mis au point. Le premier est un banc d'essai qui permet d'étudier les phénomènes thermiques lors du contact brusque de deux matériaux [Poutot 01]. Le second est un calorimètre différentiel à balayage utilisé pour déterminer le comportement du métal (l'indium) lors de sa solidification. Le premier dispositif permet donc de comparer les résultats numériques du contact brusque à l'analyse expérimentale et de vérifier si la prise en compte d'une résistance thermique constante est une hypothèse suffisante. Les expériences en DSC permettent quant à elles d'analyser plus précisément les phénomènes de solidification du métal par rapport aux simulations numériques où le changement de phase est considéré comme une transition franche. Ces approches expérimentales apportent donc des précisions sur les propriétés thermiques et cinétiques lors du contact du métal avec un substrat.

4.1 Contact brusque de deux milieux

Afin de déterminer le comportement thermique de la goutte au contact avec le substrat, un dispositif expérimental qui permet de réaliser le contact brusque de deux milieux est mis au point. Ce dispositif s'affranchit de l'aspect convectif des échanges thermiques, et seule la conduction peut intervenir, avec ou sans changement de phase. Pour déterminer la résistance thermique de contact entre les deux milieux ainsi que le flux surfacique qui traverse l'interface et les températures de contact de chaque milieu, les données expérimentales en terme de températures sont introduites dans un code de détermination de condition limite par méthode inverse.

4.1.1 Dispositif expérimental

L'appareil [Poutot 02] a été conçu pour permettre de fondre un matériau à changement de phase (MCP) en obtenant un état initial en phase fondue bien contrôlé. De plus, il a été réalisé de façon à mettre en contact rapide avec le MCP une paroi froide tout en suivant finement les flux échangés. Il a également une conception telle que dans les premiers instants, les transferts restent 1D selon la normale au plan de contact. Les modèles seront ainsi simplifiés. Le schéma 4.1 illustre le concept et le dispositif est montré sur la figure 4.2.

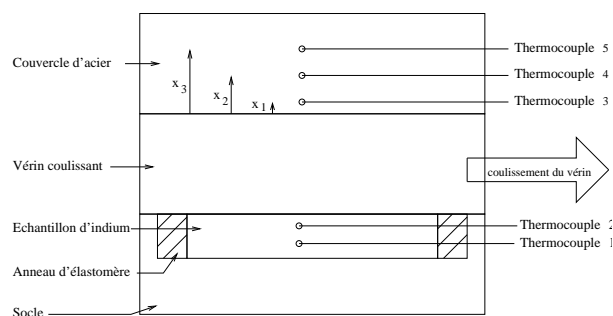


Figure 4.1 : Schéma du dispositif de contact brusque

Ce dispositif est constitué d'une mini presse permettant d'imposer une pression constante pendant le contact (0,7 MPa). Ce paramètre essentiel pour fixer les conditions d'interface est donc bien maîtrisé. L'échantillon de forme cylindrique (diamètre de 49mm et épaisseur de 5mm) est placé sur un plateau chauffant régulé. Un anneau d'élastomère l'entoure et est emboîté dans le plateau inférieur. Cet anneau joue le rôle de garde thermique, il suit

le retrait du métal en autorisant le maintien du contact, et enfin, il assure la rétention du métal liquide lors de sa fusion.

Le plateau supérieur, qui joue le rôle de plaque froide, est constitué par un cylindre d'acier de 78mm de diamètre. Il est mobile sur les colonnes de la presse, et est abaissé au moment du contact. Un capteur de flux [Quilliet 98] non intrusif est implanté en son centre permettant de remonter à la température de surface de l'acier et au flux à l'interface MCP/acier.

Un couvercle mobile latéralement recouvre l'échantillon pendant sa fusion. Ce couvercle est muni d'un chauffage dans sa partie en vis-à-vis du MCP et d'un écran réglé sur sa surface en vis-à-vis de la plaque d'acier. Le flux à l'instant initial reste donc quasi-nul. On place ainsi l'échantillon dans une sorte de four isotherme assurant un champ initial uniforme. Simultanément au déplacement vers le bas du plateau supérieur portant le cylindre d'acier refroidi et avant sa mise en contact avec le MCP, le couvercle est dégagé latéralement.

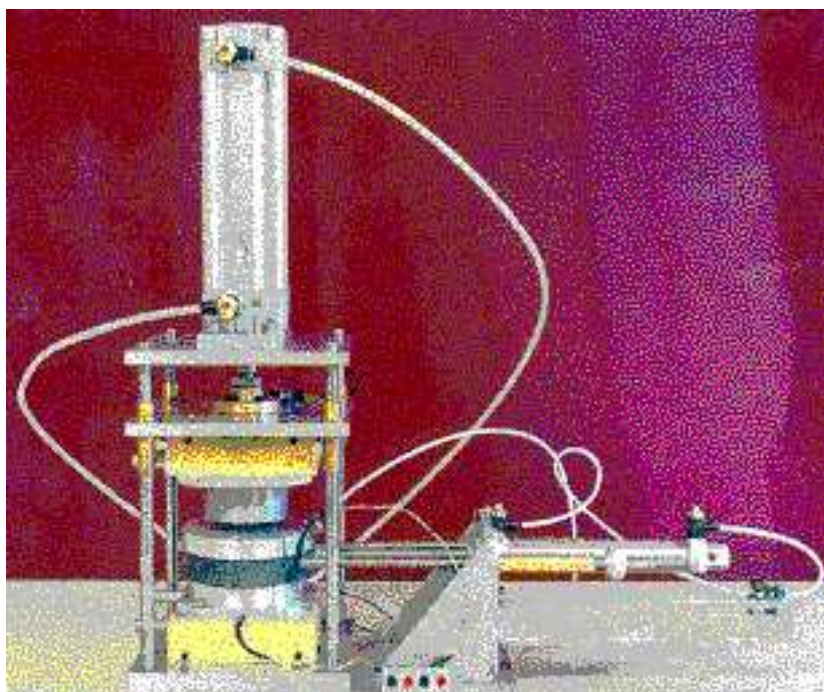


Figure 4.2 : *Dispositif expérimental*

Le capteur de flux est muni de trois microthermocouples de $25\mu m$ de diamètre dont les cotes sont mesurées expérimentalement à $x_1 = 0,274mm$, $x_2 = 2,036mm$ et $x_3 = 4,898mm$ de la surface de contact ($\pm 6\mu m$). L'échantillon de MCP est aussi équipé de deux thermocouples. L'un est à mi-épaisseur, l'autre sur la surface de l'échantillon en contact avec le plateau inférieur de la presse. Ces thermocouples de $80\mu m$ de diamètre sont tendus selon les isothermes et sortent de la cellule au travers de l'anneau d'élastomère. Le matériau utilisé pour les essais est de l'indium à 99,99% de pureté [Goodfellow] dont les caractéristiques thermiques sont données dans le tableau 4.1.1.

Ce dispositif nous a conduit à des résultats intéressants en terme de solidification et de résistance thermique de contact entre le métal et le moule.

La figure 4.3 montre l'évolution des températures mesurées dans l'acier (capteur de flux) et dans l'indium. Dans celui-ci, après une phase de refroidissement rapide, on note un plateau dû au changement de phase. Il se prolonge jusqu'à l'instant $t = t_s$ où le changement de pente du refroidissement du thermocouple 1 indique la fin de la solidification. On a ensuite un profil classique de diffusion thermique.

Du côté acier, dans le capteur de flux, un comportement tout à fait intéressant est observé. Alors que les thermocouples 4 et 5 suivent un échauffement régulier, le thermocouple 3 situé très près de l'interface montre une évolution caractéristique. Jusqu'à $t = t_1$, il s'échauffe rapidement avec une dynamique révélant une résistance thermique de contact. En effet, pour une valeur nulle de celle-ci, on serait très proche de l'échelon, la température de contact étant instantanément atteinte en surface. Ce thermocouple situé à $200\mu m$ de celle-ci indiquerait une température s'élevant alors de manière très abrupte. Une rapide estimation de la résistance conduit à une valeur de l'ordre de $5.10^{-4}m^2K/W$. A $t = t_1$, on observe une sorte "d'épaule", l'élévation de la température accélérant. Ce type de comportement aussi observé par [Le Bot 98] sur des polymères et [Loulou 95] sur du métal est très caractéristique de la solidification rapide (figure 4.4). Dans les thermoplastiques, ce type d'allure imputable aux effets cinétiques est mis en évidence par simulation numérique (figure 4.5), la numérotation des thermocouples est identique à celle de la figure 4.3. L'effet de "trempe" du refroidissement rapide limite le dégagement de chaleur latente et conduit à un comportement de type conduction pure entre le MCP resté liquide et l'acier. A $t = t_1$, le dégagement de chaleur latente provoque le réchauffement de la surface par

arrêt de la décroissance du flux. L'instant t_1 pourrait donc correspondre à la rupture de la surfusion. Après $t = t_s$, la solidification est complète, la température de surface baisse légèrement. Ces résultats semblent donc indiquer que les effets cinétiques sont à examiner plus en détail pour l'indium, afin de mieux analyser l'évolution de la résistance d'interface.

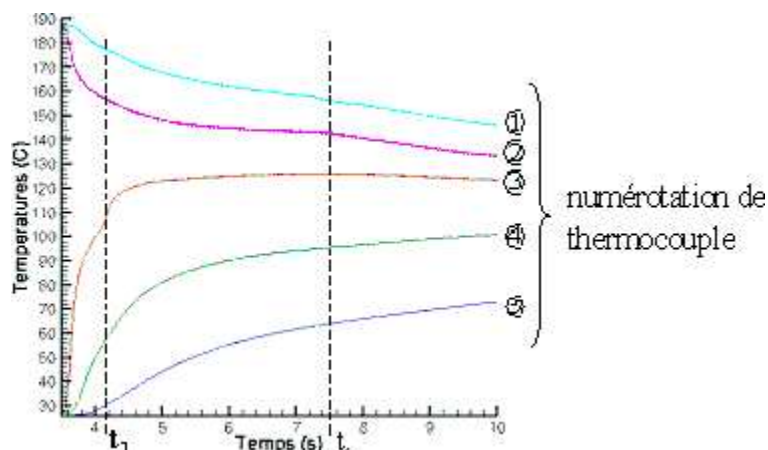


Figure 4.3 : Températures d'indium et d'acier par voie expérimentale. La numérotation des thermocouples correspond à celle de la figure 4.1

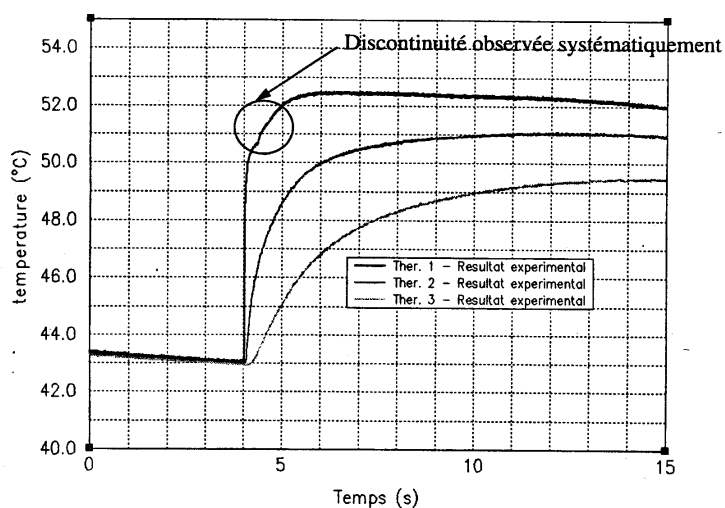


Figure 4.4 : Températures de moule lors du contact avec un polymère ([Le Bot 98])

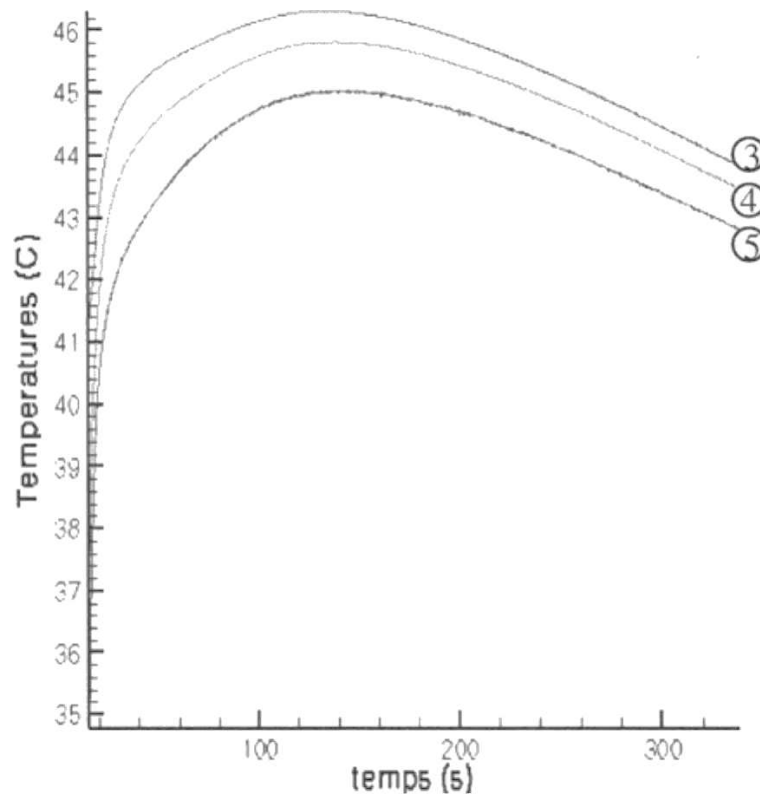


Figure 4.5 : Températures de moule lors du contact avec un polymère ([Poutot 02])

| | ρ (kg/m^3) | C_p ($J/K.kg$) | λ ($W/m.K$) | T_f ($^{\circ}C$) | H_f (J/kg) |
|------------------|---------------------|--------------------|-----------------------|-----------------------|------------------|
| Indium (liquide) | 7020 | 273,5 | 81,1 | 156,6 | 28500 |
| Indium (solide) | 7300 | 233 | 81,6 | ***** | ***** |
| Acier | 7345 | 465 | 36,5 | ***** | ***** |

Tableau 4.1 : Caractéristiques de l'indium et de l'acier

4.1.2 Méthodes inverses

Par définition, un modèle permet de prévoir le comportement d'un phénomène physique sous l'effet d'un stimulus. Cette définition s'applique à la résolution des problèmes directs: Par l'introduction d'un jeu de grandeurs d'entrée et de paramètres caractéristiques de l'étude dans un modèle, le problème direct permet de déterminer la valeur de grandeurs de sortie, résultats du modèle. Lorsqu'une ou plusieurs variables d'entrée (état initial, paramètres du système) sont inconnues, le problème est dit mal posé. La méthode

directe ne permet pas de résoudre ce problème. La méthode qui a pour objet de déterminer cette ou ces inconnues s'appelle méthode inverse. Il en existe de plusieurs sortes, en fonction de l'inconnue à analyser.

Le problème de *reconstruction d'état initial* vise à déterminer la configuration de l'instant initial grâce à la connaissance de données aux instants suivants.

Le problème d'*estimation de paramètres* (ou d'identification) permet de déterminer des caractéristiques du modèle (conductivité thermique, capacité calorifique...)

Le problème d'*estimation de sources* apparaît souvent en thermique, lorsqu'il s'agit de déterminer des flux surfaciques (condition limite) ou des sources de chaleur ponctuelles dans le domaine.

Le problème d'*estimation de formes* vise à déterminer la dimension ou la géométrie du domaine d'étude, ce qui permet entre autres d'estimer la forme des défauts dans une pièce.

Chacun de ces problèmes nécessite une information additionnelle, le plus souvent par voie expérimentale. Ces données supplémentaires sont comparées aux résultats numériques dans le but de diminuer l'écart entre ces deux types d'information. Ces mesures s'accompagnent d'une incertitude, et celle-ci doit donc être analysée afin de fournir des résultats cohérents.

Détermination de flux par méthode inverse

Dans cette partie, nous n'utilisons que les températures expérimentales données par les thermocouples du moule d'acier. L'objectif est de déterminer la condition limite en flux (q) qui minimise l'écart de température entre les valeurs expérimentales TC1 et TC2, et les valeurs numériques de températures aux mêmes points de mesure, par méthode séquentielle.

La méthode séquentielle réalisée par Beck [Beck 85], fait appel aux concepts de "spécification de fonction " et de pas de temps futurs. Elle consiste à déterminer le flux q , en le supposant constant à l'instant k , mais aussi pendant quelques pas de temps futurs, que l'on note r . Le système direct à résoudre est le suivant :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad 0 \leq x \leq e \text{ et } t_n \leq t \leq t_{n+r} \quad (4.1)$$

$$T(x = L) = TC_3 \quad t_n \leq t \leq t_{n+r} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(x = 0) = -\frac{q^n}{\lambda} \quad \text{pour } t_n \leq t \leq t_{n+r} \quad (4.3)$$

$$T(x, t = 0) = T_n(x) \quad (4.4)$$

Les données additionnelles nécessaires à la résolution du problème inverse sont notées $Y_i(t_k)$. Elles correspondent aux relevés de températures expérimentales à la position i à l'instant t_k . Nous avons donc $t_k = (k - 1) \cdot \Delta t$, $i = 1 \dots J + 1$ et $k = 1, M + 1$. J est donc le nombre de thermocouples utilisés moins un (ce dernier servant de condition limite). Autrement dit, Y_{J+1} correspond à TC_3 .

Pour déterminer les coefficients de sensibilité, on introduit la fonction résidu $Z(q)$:

$$Z(q) = \sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^J [T_j^{n+k}(q) - Y_j^{n+k}]^2 \quad (4.5)$$

Le but étant de minimiser ce critère, on cherche la valeur q^* telle que :

$$\frac{dZ(q)}{dq}(q^*) = 0 \quad (4.6)$$

On obtient :

$$\sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^J [T_j^{n+k}(q^*) - Y_j^{n+k}] \frac{\partial T_j^{n+k}(q^*)}{\partial q} = 0 \quad (4.7)$$

Pour résoudre le système direct, une solution consiste à utiliser la linéarité de l'équation de l'énergie, et de décomposer la solution T comme somme de deux contributions: $T = u + v$.

On obtient ainsi deux systèmes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad 0 \leq x \leq e \text{ et } t_n \leq t \leq t_{n+r} \\ u(x = L) = 0 \quad t_n \leq t \leq t_{n+r} \\ \frac{\partial u}{\partial x}(x = 0) = -\frac{q^n - q_1}{\lambda} \quad \text{pour } t_n \leq t \leq t_{n+r} \\ u(x, t = 0) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial v}{\partial t} = a \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad 0 \leq x \leq e \text{ et } t_n \leq t \leq t_{n+r} \\ v(x = L) = TC_3 \quad t_n \leq t \leq t_{n+r} \\ \frac{\partial v}{\partial x}(x = 0) = -\frac{q_1}{\lambda} \quad \text{pour } t_n \leq t \leq t_{n+r} \\ v(x, t = 0) = T_n(x) \end{array} \right.$$

q_1 est une constante quelconque, que l'on peut éventuellement prendre nulle.

La dérivée $S_j^{n+k} = \frac{\partial T_j^{n+k}}{\partial q}$ est introduite afin de résoudre les équations de sensibilité de la température calculée par rapport au flux de chaleur estimé.

$$\frac{\partial S(x, t)}{\partial t} = a \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \quad 0 \leq x \leq e \text{ et } t_n \leq t \leq t_{n+r} \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial S(0, t)}{\partial x} = 1 \quad t_n \leq t \leq t_{n+r} \quad (4.9)$$

$$S(L, t) = 0 \quad t_n \leq t \leq t_{n+r} \quad (4.10)$$

$$S(x, t_n) = 0 \quad 0 \leq x \leq e \quad (4.11)$$

Par combinaison des systèmes précédents, et par linéarité, on obtient l'expression :

$$u_i^{n+k} = (q - q_1) S_i^{n+k} \quad (4.12)$$

En introduisant cette expression dans celle de la fonction résidu $Z(q)$, on obtient :

$$\frac{dZ}{dq} = \sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^J [(q - q_1) S_i^{n+k} + v_i^{n+k} - Y_j^{n+k}] S_j^{n+k} \quad (4.13)$$

La solution q^* qui minimise ce critère vérifie donc :

$$q^* - q_1 = - \frac{\sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^J [v_j^{n+k} - Y_j^{n+k}] S_j^{n+k}}{\sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^J [S_j^{n+k}]^2} \quad (4.14)$$

En posant :

$$K_j^k = \frac{S_j^k}{\sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^J [S_j^k]^2} \quad (4.15)$$

ce qui correspond au gain calculé à partir des coefficients de sensibilité, la valeur finale de flux q^* vaut :

$$q^* = q_1 + \sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^J [Y_j^{n+k} - v_j^{n+k}] K_j^{n+k} \quad (4.16)$$

Si on prend $q_1 = q^n$, alors la composante v_j^{n+k} est directement la prédiction de la température basée sur l'estimation q^n .

La température à l'instant $n+1$ est alors :

$$T_i^{n+1} = v_i^{n+1} + (q^{n+1} - q^n) S_i^1 \quad (4.17)$$

On peut remarquer que la valeur de q^{n+1} dépend non seulement de la valeur q^n (donc de son passé), mais aussi du présent et du futur par le biais des mesures Y_i^{n+k} , pour j de 1 à J , et k de 1 à r . On calcule donc le flux q en retard des mesures expérimentales, et ce retard correspond au produit $r\Delta t$. Il est donc intéressant de prendre une valeur relativement faible de r pour éviter une estimation trop " tardive ", de l'ordre de $r = 2$ à 10.

4.1.3 Résultats de la méthode de Beck

Validation du code

Pour s'assurer de la précision du code, des cas de validations sont réalisés sur des solutions analytiques simples dans les cas où le flux à déterminer est une constante, ou lorsque la résistance thermique de contact est une constante.

– Solution à flux constant

Le système direct 1D à résoudre est l'équation de la chaleur sans changement de phase avec conditions limites à l'infini constantes :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0 \quad (4.18)$$

$$T(x \rightarrow -\infty, t) = T_1 \quad (4.19)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x}_{x=0} = q \quad (4.20)$$

$$T(x, t = 0) = T_1 \quad (4.21)$$

Soit le changement de variable $\theta = T - T_1$. Le nouveau système s'écrit :

$$\rho C_p \frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = 0 \quad (4.22)$$

$$\theta(x \rightarrow -\infty, t) = 0 \quad (4.23)$$

$$-\lambda \frac{\partial \theta}{\partial x}_{x=0} = q \quad (4.24)$$

$$\theta(x, t = 0) = 0 \quad (4.25)$$

Par transformée de Laplace, la variable $\theta^* = L(\theta)$ vérifie :

$$p\theta^* - a \frac{d^2 \theta^*}{dx^2} = 0 \quad (4.26)$$

$$\theta^*(x \rightarrow -\infty) = 0 \quad (4.27)$$

$$-\lambda \frac{d\theta^*}{dx}_{x=0} = \frac{q}{p} \quad (4.28)$$

où $a = \frac{\lambda}{rho C_p}$, et donc :

$$\theta^* = A \exp(-\sqrt{\frac{p}{a}}x) + B \exp(\sqrt{\frac{p}{a}}x) \quad (4.29)$$

Les conditions limites fournissent : $B = 0$ et $A = \sqrt{\frac{a}{p}} \frac{q}{p\lambda}$ Ainsi,

$$\theta^* = \frac{\sqrt{a}}{\lambda} q \frac{1}{p^{3/2}} \exp(-\sqrt{p} \frac{x}{\sqrt{a}}) \quad (4.30)$$

Par transformée inverse :

$$\theta = \frac{\sqrt{a}}{\lambda} q [2\sqrt{\frac{t}{\pi}} \exp(-\frac{x^2}{4at}) - \frac{x}{\sqrt{a}} \operatorname{erfc}(\frac{x}{2\sqrt{at}})] \quad (4.31)$$

Finalement :

$$T(x, t) = \frac{\sqrt{a}}{\lambda} q [2\sqrt{\frac{t}{\pi}} \exp(-\frac{x^2}{4at}) - \frac{x}{\sqrt{a}} \operatorname{erfc}(\frac{x}{2\sqrt{at}})] + T_1 \quad (4.32)$$

La validation porte sur le cas direct où la densité de flux est constante et égale à $\phi = 3.10^5 W.m^{-2}$. Les températures des thermocouples sont calculées à des cotes $x_1 = 0.00114m$, $x_2 = 0.005m$ et $x_3 = 0.008m$. La méthode séquentielle agit comme une anticipation au calcul du flux. Ainsi, au lieu d'envisager le problème direct initialement soumis à un flux constant, les premiers instants sont tout d'abord portés à flux nul avant d'activer à l'instant t_0 le flux à la valeur fixée.

Influence du nombre de pas de temps futurs

Le maillage est fixé à 70 nœuds et le pas de temps est de $2.10^{-3}s$. Pour un nombre de pas de temps futurs compris entre 2 et 50, le résultat est proche de la solution analytique. Lorsque le nombre de pas de temps futurs augmente, la valeur de flux obtenue devient moins précise (tableau 4.2) et la discontinuité du flux est moins bien représentée. En effet, accroître le nombre pas de temps futurs revient à une plus grande anticipation du signal et donc activer le flux avant le temps t_i . Par contre, l'augmentation de ces pas de temps restreint le nombre d'oscillations numériques pendant les r premiers instants de simulation par filtrage du signal. Il est donc nécessaire à chaque simulation d'adapter le nombre de pas de temps afin d'avoir un bon compromis entre la précision de la solution et l'amplitude et la durée des oscillations numériques qui interviennent aux premiers instants de simulation.

| Nombre de pas de temps futurs | erreur absolue ($W.m^{-2}$) | erreur relative | instant final |
|-------------------------------|-------------------------------|-----------------|---------------|
| 2 | $5,98.10^3$ | 2,0% | 2s |
| 5 | $6,0.10^3$ | 2,0% | 2s |
| 10 | $6,03.10^3$ | 2,0% | 2s |
| 50 | $6,52.10^3$ | 2,2% | 2s |

Tableau 4.2 : Influence du nombre de pas de temps futurs

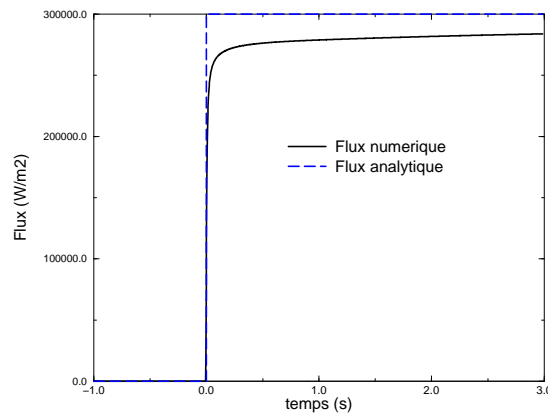


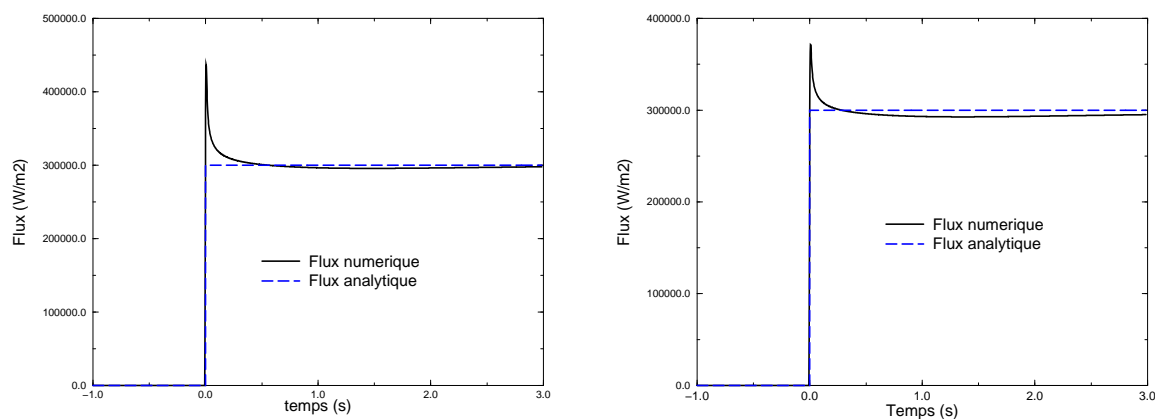
Figure 4.6 : Flux analytique et déterminé par méthode inverse

Influence du maillage

Le calcul montre que la précision lorsque le nombre de mailles augmente, et l'ordre de convergence de la solution est en moyenne de 0,9 pour l'ensemble des nombres de pas de temps réalisés. Ceci est cohérent avec la méthode de résolution utilisée qui est d'ordre 1. Une restriction est cependant à prendre en compte : les positions des deux thermocouples ne doivent pas correspondre au même nœud de maillage. Ainsi, le maillage doit être suffisamment fin pour éviter ce cas.

Influence de la position des thermocouples

La position des thermocouples est un paramètre important sous deux aspects : il apparaît tout d'abord que le calage de la position des thermocouples sur le maillage favorise la stabilité de la solution, comme le montrent les résultats des figures 4.7. Lorsque la position du thermocouple coïncide avec un nœud de la grille, la solution subit moins d'oscillations numériques.



a) Thermocouple positionné sur un nœud du maillage

b) Thermocouple positionné entre deux nœuds du maillage

Figure 4.7 : *Influence de la position par rapport au maillage*

Lorsque la position du premier thermocouple coïncide avec la grille, l'erreur relative est de 2,0% et l'erreur absolue est de $5,98.10^3 W.m^{-2}$. Lorsque le thermocouple se trouve en $x = 5.10^{-4}m$, l'erreur absolue atteint $5,99.10^4 W.m^{-2}$ et l'erreur relative reste à 2,0%, ce qui est donc minime car le maillage est suffisamment fin pour que ce léger décalage n'altère pas la précision des résultats.

Le deuxième aspect concerne la position absolue du premier thermocouple. En effet, il apparaît que celui-ci doit se trouver à proximité de la condition limite indéterminée afin d'obtenir convergence de la simulation. Au-delà d'une distance critique, les oscillations numériques sont trop importantes et le flux n'est pas déterminé avec précision bien que sa valeur moyenne soit proche de la solution escomptée (figure 4.8).

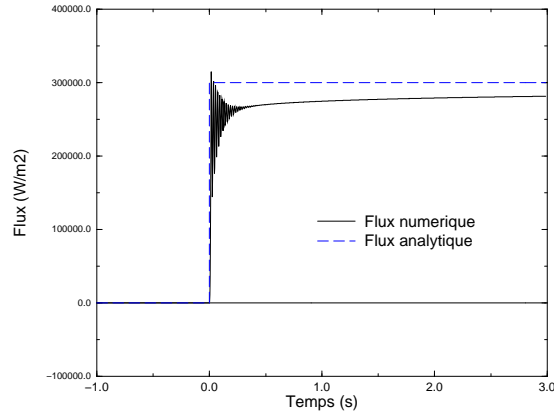


Figure 4.8 : *Solution de flux lorsque $x_1 = 2\text{mm}$ pour $r=5$ et $Lx=70$*

Lorsque la position du thermocouple est à $x = 2\text{mm}$ de la condition limite, l'erreur relative est de 18,6% et l'erreur absolue est de $5,57 \cdot 10^4 \text{W} \cdot \text{m}^{-2}$.

Incertitude sur la position de la mesure

Il est souvent difficile de déterminer la position exacte des thermocouples. La méthode numérique employée doit donc être en mesure de supporter une incertitude sur cette position. La position théorique du thermocouple est de $2 \cdot 10^{-4} \text{m}$ mais pour apprécier l'influence d'une éventuelle erreur sur cette position, on considère successivement les valeurs $x_1 = 2,5 \cdot 10^{-4} \text{m}$ et $x_1 = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{m}$, c'est à dire avec $\pm 25\%$ d'erreur ce qui surestime largement l'erreur des mesures expérimentales de l'ordre du demi rayon du thermocouple. Les flux estimés sont alors proches du flux estimé lorsque la position est supposée exacte à $x_1 = 2 \cdot 10^{-4} \text{m}$ (figure 4.9). Lorsque la position x_1 supposée est plus grande que la cote exacte, le flux à fournir doit être plus intense pour permettre l'obtention de la température fournie par le thermocouple. A l'inverse, si elle est plus petite que la cote exacte, le flux à fournir est plus faible.

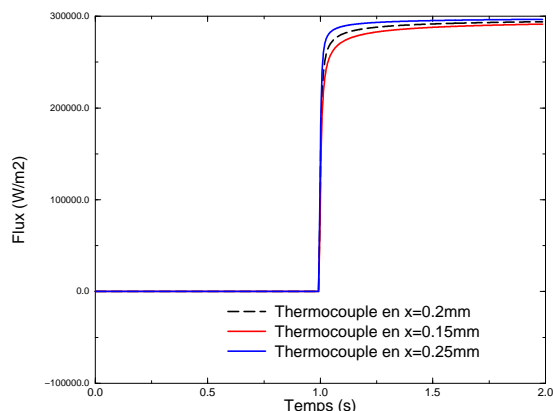


Figure 4.9 : Flux déterminés avec une position de thermocouple inexacte

Afin de vérifier l'influence de la position du thermocouple le plus éloigné, qui sert de condition limite au système, les autres capteurs sont disposés à des distances connues de $x_1 = 0,5 \cdot 10^{-3}m$ et $x_2 = 5 \cdot 10^{-3}m$. Le dernier thermocouple est positionné à une cote de $x_3 = 8 \cdot 10^{-3}m$. Lorsque cette dernière position est mal estimée, on observe que le flux est estimé avec peu d'écart pour une distance supposée de $x_3 = 7mm$ ou $x_3 = 9mm$ de la condition limite inconnue au lieu de $x_3 = 8mm$. Cette position est en effet beaucoup moins sensible que le thermocouple proche de la condition limite à déterminer (figure 4.10). La détermination de la position du thermocouple en x_1 a donc plus d'influence sur la convergence que celui en x_3 .

Influence de l'erreur sur les propriétés physiques

Une erreur de 10% est ajoutée sur la connaissance des propriétés physiques de capacité calorifique et de conductivité thermique. Lorsque la conductivité thermique est initialisée à $41,15W \cdot m^{-1}K^{-1}$ au lieu de $36,5W \cdot m^{-1}K^{-1}$, cette erreur entraîne une surestimation du flux de 4,47%. De même, une conductivité d'une valeur de $32,85W \cdot m^{-1}K^{-1}$ implique une sous-estimation de 7,35%. Les erreurs de conductivité et de flux estimé sont donc de même ordre de grandeur (figure 4.11).

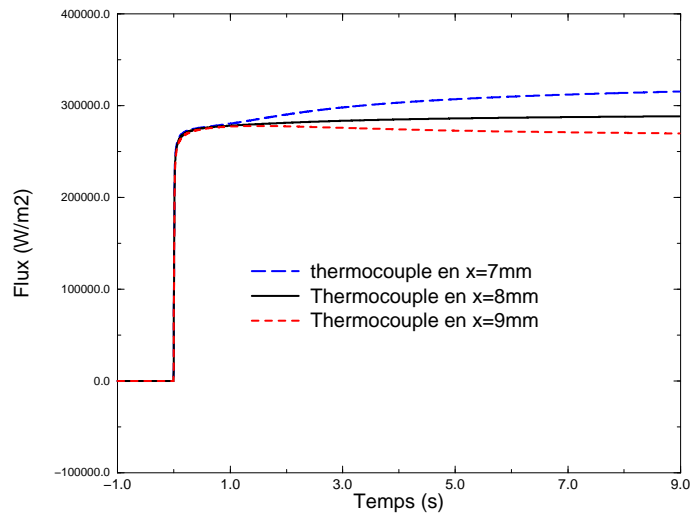


Figure 4.10 : Flux déterminés avec une position de condition limite inexacte

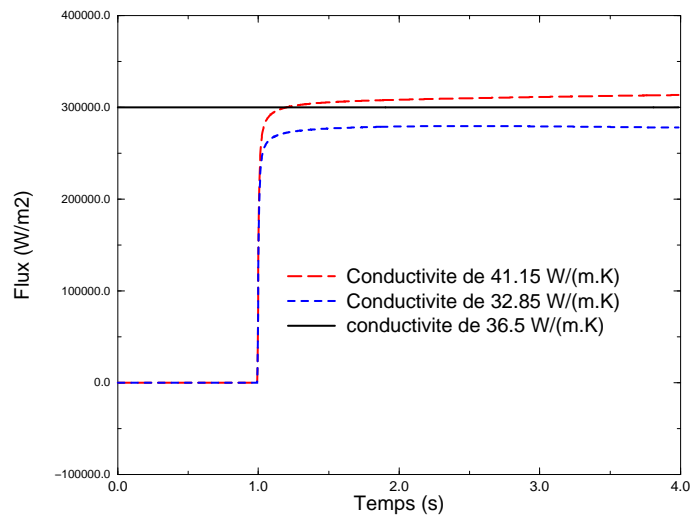


Figure 4.11 : Flux estimés avec une erreur sur la conductivité thermique

De la même façon, une erreur de 10% est ajoutée à la capacité calorifique. Pour une valeur de $C_p = 418,5 J.kg^{-1}K^{-1}$ au lieu de $C_p = 465 J.kg^{-1}K^{-1}$, le flux est sous-estimé de 5,38%, alors qu'une valeur de $C_p = 511,5 J.kg^{-1}K^{-1}$ surestime le flux de 2,5% (figure 4.12).

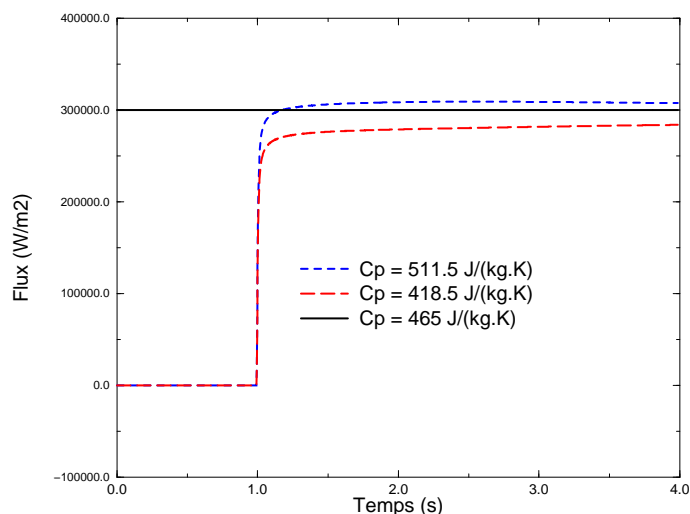


Figure 4.12 : Flux estimés avec une erreur sur la capacité calorifique

Une erreur sur les propriétés thermiques entraîne donc une erreur de même ordre sur le flux estimé.

Influence du bruit sur la mesure

Un bruit blanc d'amplitude de $0,02^{\circ}C$ et de variance 0,4 est ajouté aux températures analytiques. Le flux identifié possède lui aussi un bruit blanc dont l'amplitude et la variance dépendent du nombre de pas de temps futurs utilisés. Plus le nombre de pas de temps est important, plus le flux déterminé est lissé et se rapproche du flux déterminé sans bruit. Un grand nombre de pas de temps futurs permet donc une meilleure définition du flux lorsque les données sont bruitées (figures 4.13).

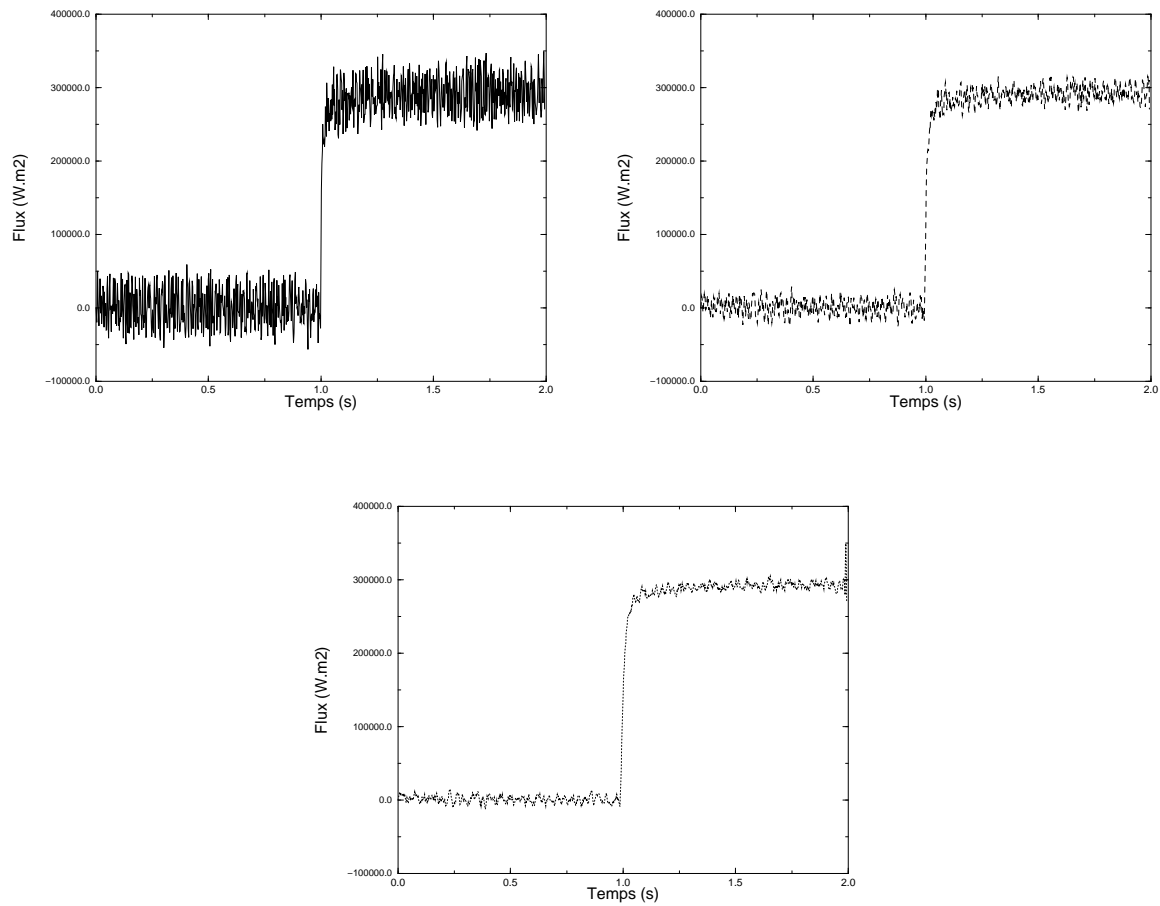


Figure 4.13 : Influence du bruit sur la détermination du flux pour $r=2$, $r=5$ et $r=8$

4.1.4 Résultats du contact brusque

- Expérience sans changement de phase

Les thermocouples 1 à 5 (figure 4.14) fournissent les évolutions de température à l'intérieur des deux milieux. Dans l'expérience où la solidification n'intervient pas, la forme du champ de température est caractéristique de la présence d'une résistance thermique de contact. Les températures atteignent au bout de 7s des valeurs quasi-constantes mais différentes qui indiquent un contact imparfait. En comparant les températures d'interface de chaque milieu en régime permanent, on obtient des valeurs de température de :

$$T_{contact}^{indium} = 64,4^{\circ}\text{C} \text{ et } T_{contact}^{acier} = 63,1^{\circ}\text{C}$$

alors que la température de contact analytique sans résistance thermique de contact dans les mêmes conditions donne une valeur de :

$$T_{contact} = \frac{b_{indium} T_{indium}^0 + b_{acier} T_{acier}^0}{b_{indium} + b_{acier}} \quad (4.33)$$

Soit $T_{contact} = 63,8^\circ\text{C}$.

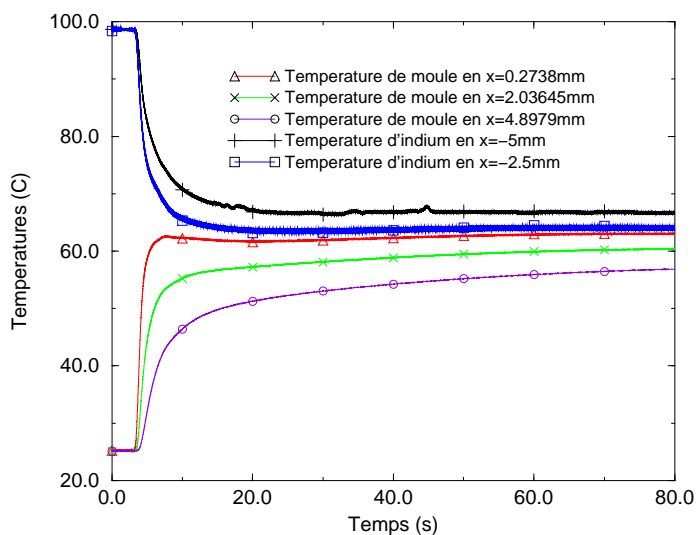


Figure 4.14 : *Températures expérimentales d'indium et d'acier lors du contact sans changement de phase*

En considérant une résistance thermique constante et égale à $R_{TC} = 1,4 \cdot 10^{-4} \text{m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{W}^{-1}$, les températures analytiques et expérimentales sont proches à 5% pour un temps $t > 10\text{s}$, mais aux temps courts, les divergences de comportement soulignent la présence d'une résistance thermique dépendant du temps. La méthode inverse permet de déterminer l'évolution de cette résistance.

L'évolution du flux est décrite en figure 4.15. Dès le début du contact, on observe un pic de flux qui diminue progressivement par relaxation. Sur des échelles de temps et de températures différentes, ce phénomène a été observé par [Le Bot 98] et [Poutot 02] sur le contact brusque d'un polymère avec un moule d'acier. La portion linéaire de la courbe (montée du flux) correspond à la mise en contact des deux matériaux et ne doit pas être

considérée. Le flux est supposé infini au moment du contact, puis il diminue par transfert entre les métaux et diffusion thermique dans l'acier initialement froid.

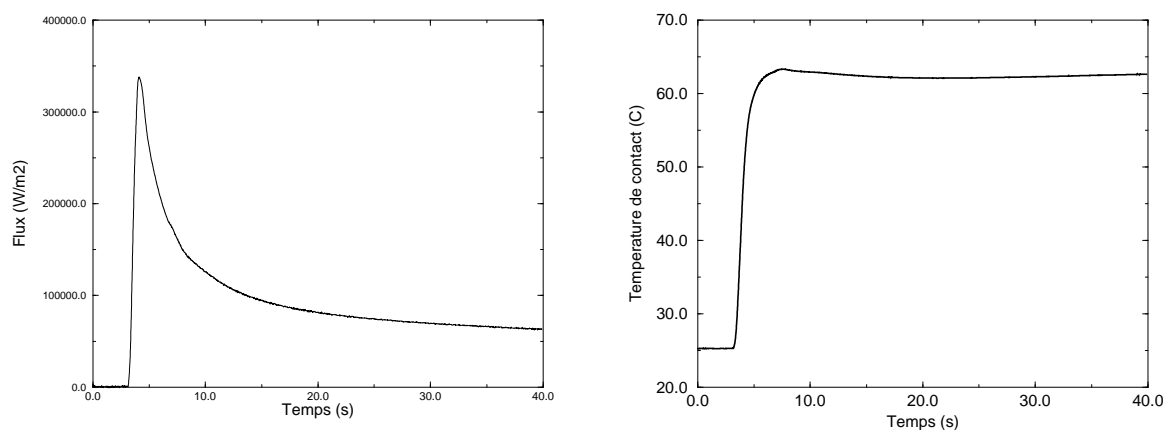


Figure 4.15 : *Flux surfacique et température de contact d'acier lors du contact sans changement de phase*

La même méthode inverse est employée dans l'échantillon d'indium d'épaisseur de 5mm , où un thermocouple est placé à cœur à une cote mesurée à $0,5\text{mm}$. On obtient de la sorte un jeu complet de données nécessaires à la détermination de la résistance thermique de contact, c'est-à-dire les températures de contact de chacun des deux milieux et le flux à l'interface (figure 4.16).

En comparant ce type d'allure à celui obtenu dans le chapitre précédent (figure 3.10, on constate une différence majeure : dans les expériences en conduction pure, la température de contact reste à une valeur stable rapidement, alors que par simulation d'une goutte, cette température atteint une valeur importante avant de diminuer vers une valeur plus stable. Par contre, les évolutions générales des flux dans les deux cas sont qualitativement très proches, ce qui signifie que la majeure partie des transferts s'effectue lors du contact brusque (expérience) ou de l'impact (simulation).

L'évolution de la résistance thermique de contact illustrée en figure 4.17 montre qu'avant le contact, cette résistance est considérée comme infinie. Puis lorsque le contact est initié, elle diminue rapidement et se stabilise à une valeur de $1,42 \cdot 10^{-5} \text{K} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{W}^{-1}$ avec une constante de temps caractéristique de $\tau = 0,13\text{s}$. Comme le montre la figure 4.17, l'initiation de la résistance correspond au sommet du flux, c'est-à-dire le début du contact.

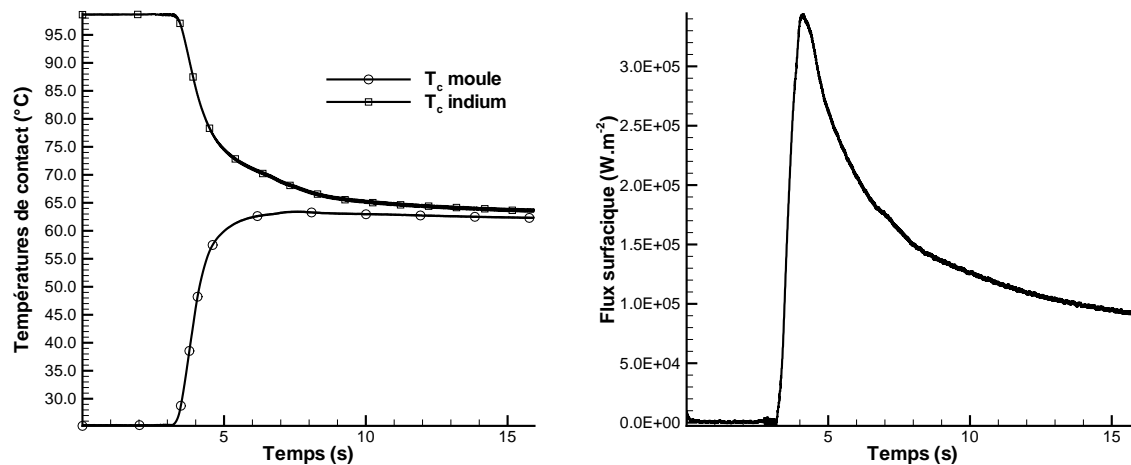


Figure 4.16 : *Contact brusque sans changement de phase: températures de contact et flux à l'interface*

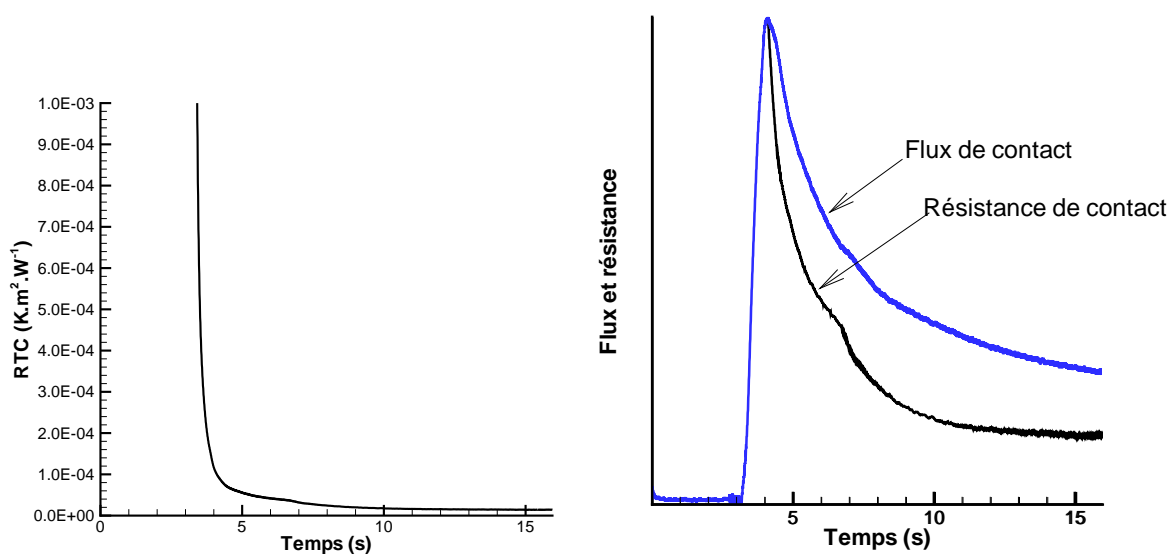


Figure 4.17 : *Contact brusque sans changement de phase: résistance thermique de contact et comparaison RTC/flux*

- Expérience avec changement de phase

L'indium est initialement porté à l'état liquide à une température de $T_{indium}^i = 190^\circ\text{C}$, sa température de fusion étant égale à $T_f = 156,6^\circ\text{C}$ et le moule d'acier est initialement à $T_{acier}^i = 25^\circ\text{C}$.

Jusqu'à $t = 3,5\text{s}$, les températures sont constantes à 25°C dans le moule d'acier et à 190°C dans l'indium car le contact n'est pas encore réalisé. Lors du contact entre les deux milieux, les températures dans le moule augmentent rapidement mais à l'instant $t_s = 4,17\text{s}$, soit $0,67\text{s}$ après le début du contact, on observe une discontinuité des températures, plus nette près du contact avec l'indium. Puis la température augmente lentement. La température proche du contact subit peu de variations après cet instant t_s et se stabilise à une température de $121,4^\circ\text{C}$. Les températures côté indium affichent trois étapes distinctes. De $t = 3,5\text{s}$ à $t = 4,17\text{s}$, le refroidissement se réalise dans l'indium liquide. Puis de $t = 4,17\text{s}$ à $t = 7,51\text{s}$, le refroidissement est beaucoup plus lent et les températures présentent un plateau, d'évolution typique: pendant cette étape, l'indium change de phase. Localement, la solidification se produit au moment de la discontinuité de température du thermocouple concerné et la stabilisation de la température correspond à la régulation de la chaleur latente, la solidification se propageant dans le reste du métal. La température en $x = -2,5\text{mm}$ (figure 4.18) présente une forme similaire à un palier mais à température inférieure à T_f . En effet, l'échantillon n'étant pas isotherme, la chaleur latente dégagée par l'indium lors de la solidification limite le refroidissement de l'indium déjà solide. A $t = 7,51\text{s}$, soit $4,01\text{s}$ après la mise en contact, la solidification est achevée dans tout l'échantillon d'indium. Le refroidissement se poursuit dans le métal à l'état solide (figure 4.18).

Une simulation a été par la suite effectuée afin d'examiner l'effet de la convection sur le refroidissement de l'échantillon. L'algorithme utilisé dans la méthode inverse suppose en effet que la convection n'intervient pas. Cette hypothèse est éprouvée par la simulation réalisée avec Aquilon. Le domaine est un cylindre de 5mm d'épaisseur et $46,5\text{mm}$ de diamètre. Les températures expérimentales à la base de l'indium (au niveau du socle) et la température obtenue par méthode inverse sont utilisées comme conditions limites du système afin de reproduire le plus fidèlement l'expérience et les conditions limites latérales sont adiabatiques. Lors du refroidissement de l'échantillon et de sa solidification, le champ de vitesse ne se développe pas, ce qui confirme l'hypothèse selon laquelle seule la diffusion intervient, sans effet convectif.

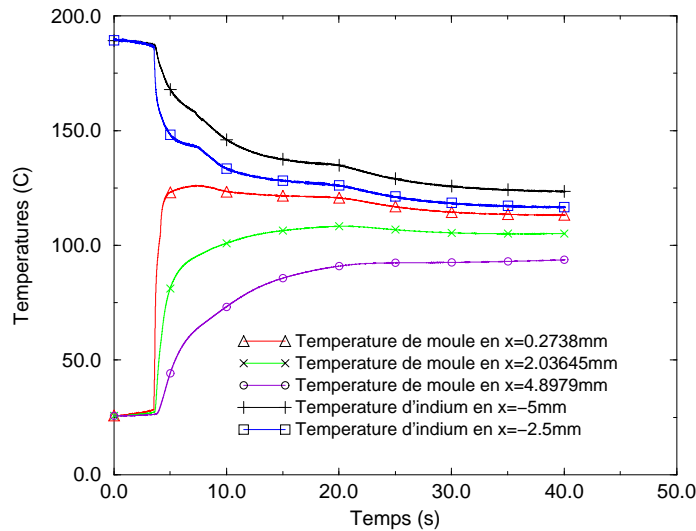


Figure 4.18 : *Températures expérimentales d'indium et d'acier lors du contact avec changement de phase*

La méthode de détermination du flux en condition limite du côté moule est identique au cas précédent. Les résultats montrent que le flux, comme précédemment, possède une valeur très élevée ($17.10^5 W.m^{-2}$) qui théoriquement tend vers l'infini. Lors du contact, ce flux diminue, mais à $t = 4,17s$, le flux remonte par dégagement de chaleur dans l'indium qui est captée par le moule, dû à la solidification, et atteint un maximum de $11,9.10^5 W.m^{-2}$ à $t = 7,51s$ ce qui correspond à la fin de la solidification (figure 4.19). Par relaxation, le flux diminue progressivement. Ce type de profil a été également étudié pour des polymères [Le Bot 98], [Poutot 02]. Le pic de flux de solidification est plus large et moins grand dans le cas de polymères, car la transition est étalée, alors que dans le cas d'un métal, la solidification est rapide et franche.

La même expérience, nécessaire pour estimer la résistance thermique de contact entre le moule et l'indium liquide est plus délicate car elle est le siège de deux phénomènes :

- La résistance thermique de contact est évolutive comme dans le cas précédent. Sa détermination nécessite l'emploi d'une méthode inverse.
- L'indium subit la solidification à la température de changement de phase $T_f = 156,6^\circ C$. L'algorithme de méthode inverse précédent n'est pas suffisant pour traiter

ce problème car il ne distingue pas la solidification de la résistance thermique de contact.

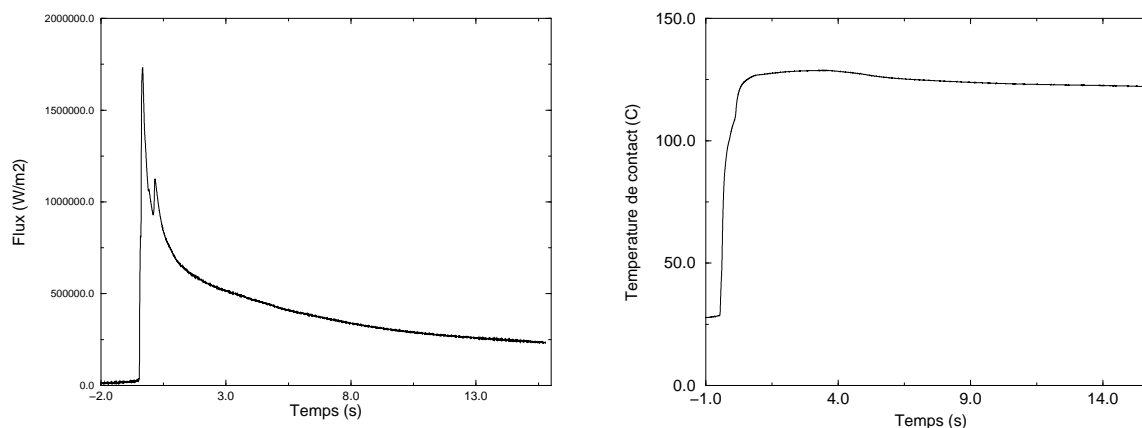


Figure 4.19 : *Flux surfacique et température de contact d'acier lors du contact sans changement de phase*

4.2 Cinétique de changement de phase: principe de la calorimétrie

Dans la partie précédente, la solidification lors du contact brusque a été interprétée comme une transition franche, sans cinétique. Des essais de solidification à vitesse constante sont réalisés dans la présente partie afin d'examiner plus en détail la cinétique de changement de phase d'un échantillon d'indium. Ces expériences sont réalisées par calorimétrie différentielle à balayage (DSC) de type Perkin-Elmer.

La DSC est constituée de deux fours distincts (figure 4.20), l'un possède une coupelle vide ou avec un échantillon inerte de référence, l'autre possède une coupelle dans laquelle on dispose un échantillon d'indium de masse connue (de l'ordre de 10mg). Les températures des deux fours sont soumises à la même évolution (la consigne) et le dispositif est conçu de telle sorte que la puissance de chauffage du four contenant l'échantillon soit ajustée afin de minimiser l'écart de température entre les deux fours. La mesure de cette

différence de puissance entre les deux fours permet ainsi de déterminer le flux capté ou dégagé par l'échantillon lors de son changement de phase.

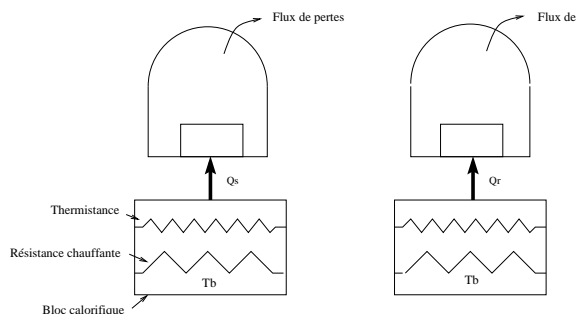


Figure 4.20 : Schéma du principe de la DSC

La masse de l'échantillon et son enthalpie de changement de phase sont connues et on suppose que le pic de flux obtenu correspond à la chaleur de cristallisation, soit: $\Phi = mL_f \frac{d\alpha}{dt}$. Afin d'analyser le flux et les températures, il est nécessaire de régler correctement la DSC, puis de calculer les pertes thermiques dues à l'appareillage.

4.2.1 Réglages de la DSC

Avant de réaliser les séries de mesures, trois étapes préopératoires sont nécessaires :

a) Réglage de la ligne de base à vide.

Une manipulation est effectuée sur une coupelle vide, avec un refroidissement à vitesse constante. L'appareil est réglé de telle sorte que la réponse en flux mesuré soit constante.

b) Etalonnage en température

Une expérience est réalisée sur un échantillon d'indium dont la température de fusion est connue et égale à $T_f = 156,6^\circ\text{C}$.

c) Etalonnage en flux

4.2.2 Expériences sur un échantillon d'indium

A l'aide de l'échantillon d'indium, une nouvelle expérience est réalisée avec changement de phase. L'aire du pic correspond à la chaleur latente de fusion connue et égale à $L_f = 28,6 \cdot 10^3 \text{ J.kg}^{-1}$

Des expériences sur un échantillon d'indium ont été réalisées avec des vitesses de refroidissement de $5K.min^{-1}$ à $40K.min^{-1}$. Les résultats sont illustrés en terme de température d'échantillon par la figure 4.21. La température à cœur suit la pente de vitesse de refroidissement générée par la DSC jusqu'à $155^\circ C$, ce qui constitue donc un degré de surfusion de $1K$. De la température de fusion $T_f = 156,6^\circ C$ jusqu'à $155^\circ C$, les germes solides apparaissent, tentent de croître mais n'atteignent pas la taille critique et refondent dans le métal encore liquide. A $155^\circ C$, cette étape s'achève, des germes dépassent la barrière de potentiel et dépassent le rayon critique. L'étape de nucléation est ainsi suivie de l'étape de croissance des nuclei que l'on considère sphériques. Durant cette étape, par phénomène de recalescence, la température remonte jusqu'à une température T_{sur} inférieure à la température de fusion T_f , par régulation de la chaleur latente dégagée par le métal. Durant la dernière étape, la température reste constante à T_{sur} : les nuclei supposés sphériques entrent en contact les uns avec les autres et ne peuvent plus croître. La solidification s'achève par transformation des espaces entre nuclei. En fin de transition, la température reprend le refroidissement imposé par la DSC dans le milieu totalement solidifié.

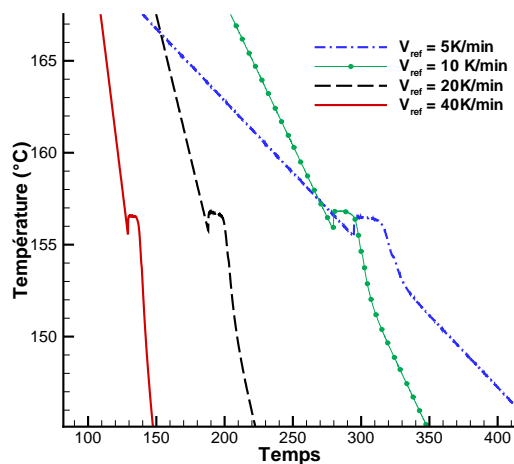


Figure 4.21 : *Température et visualisation de la surfusion de l'indium pour différentes vitesses de refroidissement V_{ref}*

Il est intéressant de constater que les valeurs des degrés de surfusion, définis par $\Delta T_{surf} = T_f - T$ sont du même ordre de grandeur pour les différentes vitesses de refroidissement. Elles atteignent des valeurs maximales de 1,115s, 0,744s, 0,963s et 0,962s

(juste avant la recalescence) pour les vitesses de refroidissement respectives de $5K.min^{-1}$, $10K.min^{-1}$, $20K.min^{-1}$ et $40K.min^{-1}$. De même, les plateaux ont quasiment la même valeur à $T = 156,47^\circ C$, $T = 156,82^\circ C$, $T = 156,58^\circ C$ et $T = 156,5^\circ C$ pour les vitesses de refroidissement respectives de $5K.min^{-1}$, $10K.min^{-1}$, $20K.min^{-1}$ et $40K.min^{-1}$. Il est à noter qu'en ce qui concerne la vitesse de refroidissement de $V_{ref} = 10K.min^{-1}$, ce degré est plus petit, car la valeur du plateau de solidification est estimée à $156,8^\circ C$, alors que $T_f = 156,6^\circ C$. Cette erreur provient vraisemblablement d'une mauvaise température de référence, ce qui explique cette anomalie (mauvais réglage de la ligne de base).

Par contre, la recalescence (augmentation de la température) et la durée du plateau de solidification varient en fonction de la vitesse de V_{ref} : plus V_{ref} augmente, plus la recalescence et le plateau sont courts, car les germes croissent et se touchent plus vite sous l'effet d'une baisse rapide de la température.

4.2.3 Modélisation de la cristallisation

Sur des polymères cristallins, il a été montré [Bénard 95] que les conditions de refroidissement jouent un rôle important sur la nucléation et la croissance cristalline. Le modèle est basé sur le fait que la chaleur peut être représentée par une fonction enthalpie :

$$H(T) = \int_{T_0}^T \rho(\theta)C_p(\theta)d\theta + \rho L_f(1 - f_s(T)) \quad (4.34)$$

où C_p est la capacité calorifique, ρ la masse volumique et T_0 une température fixée en dessous du point de fusion. La fonction f_s permet de lisser la discontinuité du changement de phase que l'on retrouve à échelle macroscopique. En dérivant par rapport au temps cette expression, on obtient :

$$\frac{\partial H(T)}{\partial t} = \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4.35)$$

Le terme source de l'équation de l'énergie que l'on rappelle en équation 4.36 s'écrit en fonction du taux de la fraction cristallisée :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + S_c \quad (4.36)$$

$$S_c = \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4.37)$$

En faisant intervenir les nombres adimensionnels de Stefan Ste , rapport de la chaleur latente et de la chaleur sensible imposée par la différence de températures, et de Deborah thermique De qui correspond au rapport du temps caractéristique de cristallisation et du temps caractéristique de diffusion, l'équation 4.36 s'écrit :

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = De \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + Ste \frac{\partial f_s}{\partial t^*} \quad (4.38)$$

avec $Ste = L_f / (C_p(T_i - T_f))$ et $De = at_c / \epsilon^2$ où t_c est le temps caractéristique de cristallisation et ϵ l'épaisseur de l'échantillon.

Cette équation montre que lorsque $Ste \rightarrow 0$, la cinétique n'a pas d'influence, et lorsque $De \rightarrow 0$, elle domine le système.

Plusieurs modèles de cinétique ont été proposés pour prendre en compte l'évolution de la fraction cristallisée. Astarita et Kenny [Astarita 87] considèrent le modèle suivant :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t^*} = (1 - f_s)^m T^{*n} (1 - T^*)^p \quad 0 < T^* < 1 \quad (4.39)$$

Cette cinétique reproduit bien la transition des polymères mais ne s'adapte pas aux phénomènes de recalescence observés.

Modèle de Nakamura

Le modèle de Nakamura [Nakamura 72] exprime le terme source comme produit d'une fonction de la température et d'une fonction de la fraction cristallisée :

$$\frac{df_s}{dt} = nK(T)(1 - f_s)[-ln(1 - f_s)]^{(n-1)/n} \quad (4.40)$$

Ce modèle est une extension du modèle d'Avrami [Avrami 39] [Avrami 40] [Avrami 41] qui considère le refroidissement isotherme (équation 4.41) et de celui d'Ozawa [Ozawa 71] qui suppose une vitesse de refroidissement constante.

$$x(t) = 1 - \exp(-k(T)t^n) \quad (4.41)$$

Ici, n est l'exposant d'Avrami et la fonction $K(T) = (k(T))^{1/3}$ est une fonction à déterminer. La forme de cette fonction K dépend du matériau et de la cinétique de changement de phase [Poutot 01] [Baïlon 00]. Une forme usuelle pour les polymères et l'eau [Poutot 02], [Gibout 99] est du type :

$$k(T) = A \exp\left(-\frac{B}{T\Delta T^2}\right) \quad (4.42)$$

avec A et B des constantes qui dépendent respectivement de la vitesse de refroidissement et des propriétés des matériaux, et ΔT le degré de surfusion.

Les résultats obtenus par DSC sont comparés à l'étude numérique du refroidissement et de la solidification de l'échantillon en utilisant le modèle d'Avrami et la formulation d'Hoffman-Lauritzen. Cette méthode a été utilisée pour différents matériaux afin de mettre en évidence la surfusion [Gibout 99], [Poutot 02]. La difficulté repose sur la présence de deux constantes inconnues: A et B . Afin d'évaluer l'évolution de la température lors du refroidissement à 40K/min et la solidification de l'indium par voie numérique, des valeurs arbitraires sont assignées à A et B .

D'une manière générale, on observe le refroidissement de l'indium avec une pente de 40 K/min qui se poursuit jusqu'à une température inférieure T_{sf} à la température de changement de phase T_f . Ensuite, un plateau de solidification (température constante) apparaît, témoin de la rupture de surfusion. Puis en fin de solidification du domaine, la température redescend en suivant la vitesse de refroidissement de 40 K/min.

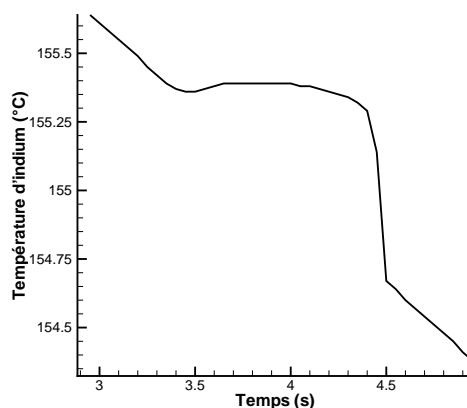


Figure 4.22 : Profil de température obtenu par voie numérique avec le modèle de Nakamura ($A = 7,3 \cdot 10^4$ et $B = 7,3 \cdot 10^3$)

Le profil de température obtenu de cette manière (figure 4.22) est qualitativement relativement proche de la théorie proposée pour un métal (figure 4.23) mais la fonction K utilisée n'est pas adaptée car le degré de surfusion observé expérimentalement reste plus grand que celui obtenu numériquement quelles que soient les valeurs de A et de B utilisées dans les simulations.

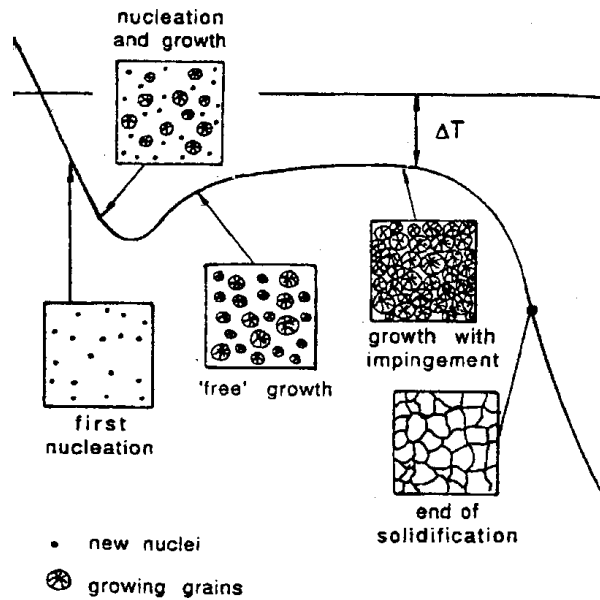


Figure 4.23 : *Forme générale de la température lors de la surfusion [Chao 99]*

Il apparaît que la simulation peut faire état de la présence d'un plateau de solidification en dessous de la température de fusion T_f , mais ne rend pas compte de la recalescence. Ce modèle, basé sur une forme particulière de la fonction $K(T)$ n'est donc pas adapté au comportement d'un métal à solidification rapide.

Modèle de séparation des variables

Afin de déterminer si la forme de la fonction $K(T)$ proposée par Nakamura s'applique au cas de la solidification de l'échantillon d'indium, les résultats de la DSC sont utilisés avec la relation suivante :

$$g(\alpha) = n(1 - \alpha)[-ln(1 - \alpha)]^{(n-1)/n} \quad (4.43)$$

où α est la fraction cristallisée et $g(\alpha)$ et la forme $K(T)$ déterminée par voie expérimentale (que nous appellerons $K_{exp}(T)$) définies par :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = g(\alpha)K_{exp}(T) \quad (4.44)$$

Le flux que l'on obtient par DSC correspond à la compensation du dégagement de chaleur lors du changement de phase :

$$\phi(t) = \rho L_f \frac{\partial \alpha(t)}{\partial t} \quad (4.45)$$

Par intégration :

$$\alpha(t) = \int_{\tau=0}^t \frac{\phi(\tau)}{\rho L_f} d\tau \quad (4.46)$$

La fonction g est déterminée à chaque instant grâce à l'expression 4.43. Puis on détermine la fonction K_{exp} en fonction du temps :

$$K_{exp}(T) = \frac{\phi}{g(\alpha)} \quad (4.47)$$

Enfin, la connaissance par DSC de la température en fonction du temps permet d'avoir une relation entre K_{exp} et la température.

Selon ce principe, les résultats sont obtenus à partir des données en température et flux. En figures 4.24, les formes de température et de flux sont rappelées. L'évolution temporelle de la fraction cristallisée est illustrée en figure 4.25 après intégration de la vitesse de cristallisation.

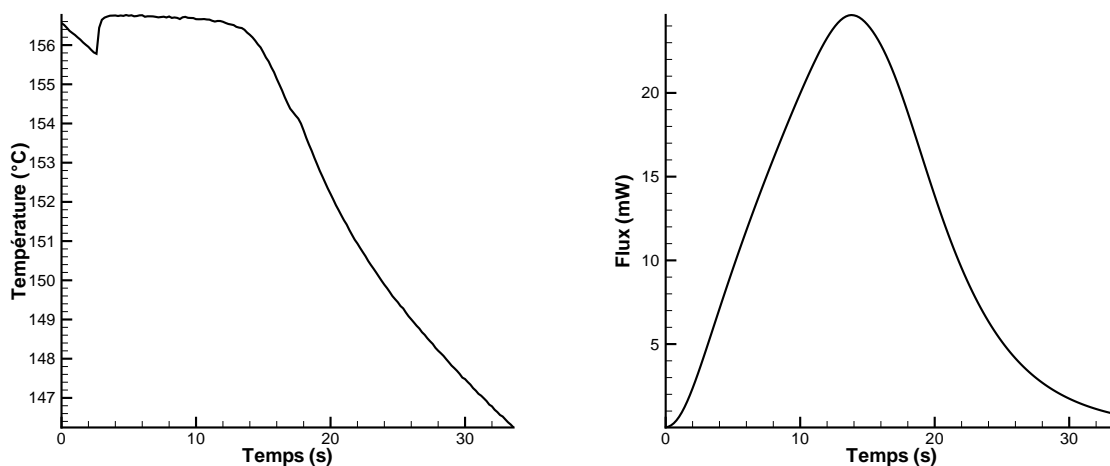


Figure 4.24 : Température et flux dans l'indium soumis à une vitesse de refroidissement de $20K/min$

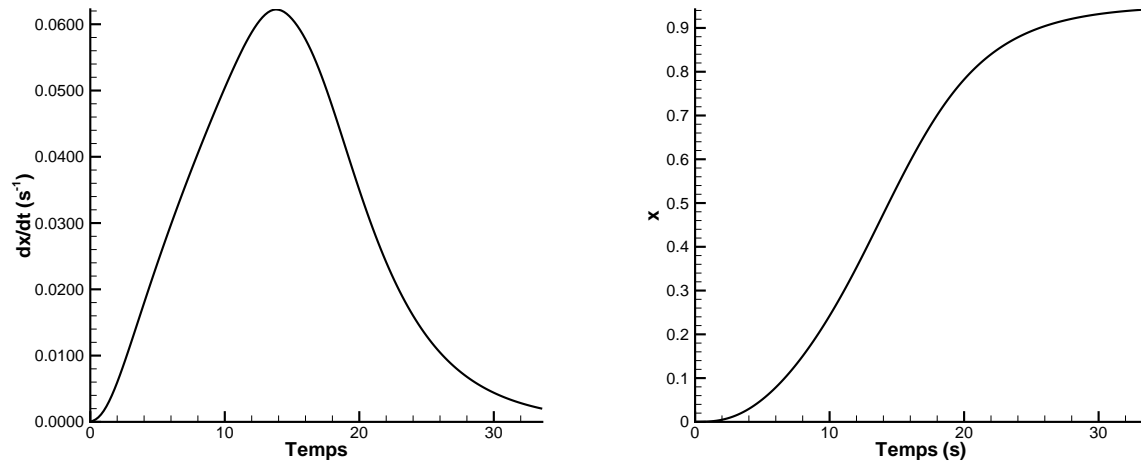


Figure 4.25 : *Evolution de la cristallisation dans l'indium soumis à une vitesse de refroidissement de 20K/min*

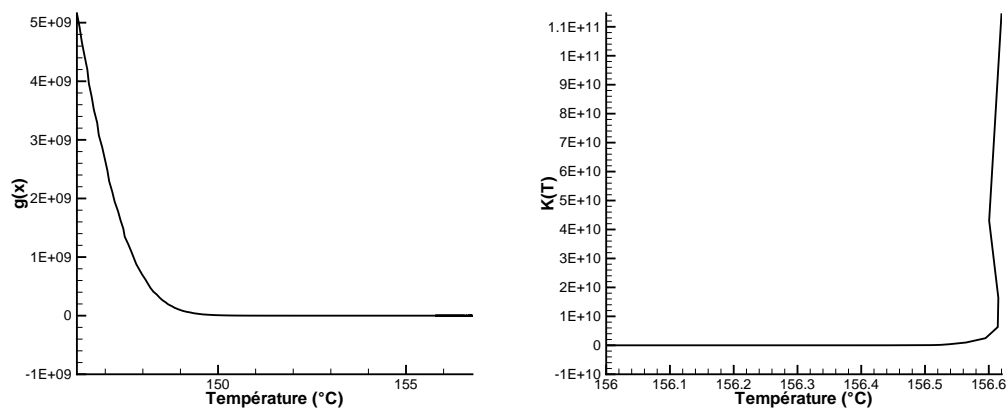


Figure 4.26 : *Fonctions g et K_{exp} pour l'indium soumis à une vitesse de refroidissement de 20K/min*

A partir de ces données, on obtient les formes des fonctions g et K_{exp} (figure 4.26). L'allure de ces fonctions montre que lors de la rupture de la surfusion, la fonction K_{exp} tend vers 0, car l'étape de nucléation s'achève et celle de croissance des germes débute. Ainsi la probabilité de nucléation diminue rapidement et celle de croissance augmente. Ces fonctions montrent non seulement que la forme $K(T)$ n'est pas la même pour un métal

(K_{exp}) et pour un polymère ($K_{nakamura}$), mais également que dans le cas des métaux et à grande vitesse de refroidissement, la formulation de Nakamura est difficile à exploiter car la fonction $K_{exp}(T)$ associée possède une pente quasi infinie. Il est donc souhaitable de déterminer numériquement la cinétique de surfusion par un autre modèle.

Modèle micro-macroscopique

Les cinétiques de solidification d'un métal et d'un polymère étant différentes, la formulation de Nakamura et d'Hoffman-Loritzen s'adapte mal au cas de l'indium. Une modélisation de solidification par approche micro-macroscopique a été réalisée [Chao 99] afin de prendre en compte les étapes de la solidification avec surfusion par des considérations microscopiques. Le modèle est basé sur l'équation de l'énergie avec terme source :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4.48)$$

La fraction solide f_s est calculée en considérant que les germes sont des sphères de rayon $R(t)$ et dont le nombre présent dans le métal est $N(t)$:

$$f_s = \frac{4}{3} \pi R^3(t) N(t) \quad (4.49)$$

Par dérivation :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = 4\pi R^2(t) N(t) \frac{dR}{dt} + \frac{4}{3} \pi R^3(t) \frac{dN}{dt} \quad (4.50)$$

Pendant l'étape de nucléation, le rayon des germes est très petit, ce qui permet de négliger le dernier terme de l'équation précédente :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = 4\pi R^2(t) N(t) \frac{dR}{dt} \quad (4.51)$$

Afin de résoudre ces équations, deux modèles sont présentés. Le premier suppose que la phase de nucléation est instantanée. Dans ce cas, on considère que le nombre de nuclei est une constante N . L'équation 4.51 devient :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = 4\pi R^2(t) \cdot N \cdot \frac{dR}{dt} \quad (4.52)$$

L'étape de croissance cristalline est ensuite définie par le modèle de Johnson-Mehl qui définit la vitesse de croissance par :

$$\frac{dR}{dt} = \mu_{JM} \Delta T^2 \quad (4.53)$$

où μ_{JM} est une constante liée à la croissance et $\Delta T = T_f - T$ le degré de surfusion. Par intégration de cette expression :

$$R(t) = r_0 + \int_0^t \mu_{JM}(T_f - T(\tau))^2 d\tau \quad (4.54)$$

Enfin, l'étape de contact (palier de solidification) est modélisée en ajoutant un facteur F à l'expression 4.51 défini par $F = 1 - f_s$ selon la théorie d'Avrami :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = 4\pi R^2(t).N.\frac{dR}{dt}(1 - f_s) \quad (4.55)$$

En intégrant, on obtient :

$$f_s(t) = 1 - \exp[-N\frac{4}{3}\pi R^3(t)] \quad (4.56)$$

Le deuxième modèle proposé suppose que la nucléation n'est pas instantanée mais suit une loi Gaussienne :

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{N_{max}}{\sqrt{2}\Delta T_\sigma} \exp\left[-\frac{(\Delta T - \Delta T_0)^2}{2\Delta T_\sigma}\right] \frac{dT}{dt} \quad (4.57)$$

où ΔT_0 est le sous-refroidissement au sommet de la courbe dN/dt , ΔT_σ l'écart-type et N_{max} la densité de grains totale. Cette formulation n'est valable que lorsque $T < T_f$, $f_s < 0,8$ et $\partial T/\partial t < 0$.

Lors de l'étape de croissance, la nucléation est achevée : $dN/dt = 0$. Le modèle de Johnson-Mehl est à nouveau utilisé pour définir la vitesse de croissance. Lors du contact des nuclei, l'expression 4.51 est modifiée par un terme ϕ [Chao 99] tel que :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = \phi 4\pi R^2(t).N.\frac{dR}{dt} \quad (4.58)$$

$$\phi = -10,32 \ln(f_s) \quad 0,8 < f_s < 1 \quad (4.59)$$

$$\phi = 1 \quad f_s < 0,8 \quad (4.60)$$

Cette méthode permet d'adapter l'expression de la fraction solide en fonction de l'étape de solidification considérée.

4.2.4 Résultats numériques

L'algorithme du modèle micro-macroscopique est réalisé par voie numérique autour de l'équation de la chaleur de manière explicite. L'équation de l'énergie est résolue à l'instant k avec un terme source S_c déterminé à l'aide des variables à l'instant $k - 1$. Cet algorithme est décrit en annexe B.

Une étude paramétrique est réalisée sur chacun des paramètres du modèle afin d'observer leur influence sur la surfusion. Il est en effet difficile de définir par avance la valeur de μ ou bien N_{max} par de simples considérations macroscopiques.

L'ordre de grandeur des variables ΔT_σ et ΔT_0 est défini grâce aux expériences effectuées en DSC, en considérant le degré de surfusion maximum (juste avant la recalescence) et le degré de surfusion minimum (lors du plateau de solidification). Une moyenne est effectuée sur les expériences aux vitesses de refroidissement de 5, 20 et $40 K.min^{-1}$. On obtient ainsi:

$$\Delta T_\sigma = 1,1285K \quad \text{et} \quad \Delta T_0 = 0,133K$$

La forme générale de la température obtenue par ce modèle est représentée en figure 4.27. On observe que la température diminue jusqu'à une valeur $T_a < T_f$ sans activation de la cristallisation. Puis la rupture de la surfusion intervient et la température remonte et reste quasi constante à la température $T_b < T_f$, période pendant laquelle les germes croissent. A la fin de la solidification, la température diminue à nouveau en suivant la vitesse de refroidissement imposée. La figure 4.27 montre que la solidification commence dès la rupture de la surfusion avec une faible vitesse de croissance. Puis au début du plateau, la fraction cristalline augmente rapidement et se stabilise à 1, une fois tout le milieu solidifié, ce qui correspond à la fin du plateau de solidification.

Influence de N_{max}

La valeur de N_{max} , qui correspond au maximum de la distribution gaussienne, varie entre $1,2 \cdot 10^{20}$ et $1,20 \cdot 10^{30}$. Les autres paramètres sont respectivement $\mu = 3 \cdot 10^{-8} m.s^{-1}.K^{-1}$, $\Delta T_\sigma = 1,1285K$ et $\Delta T_0 = 0,133K$. Les résultats montrent que lorsque N_{max} augmente, la durée et la valeur de la température du plateau de solidification augmentent (tableau 4.3).

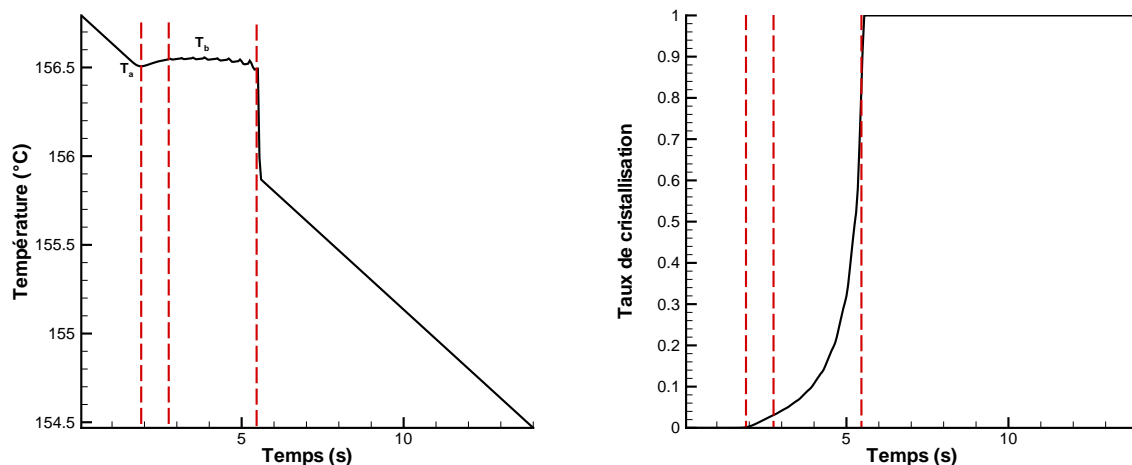


Figure 4.27 : Température et taux de cristallisation obtenus par le modèle micro-macroscopique avec $N_{max} = 1,20 \cdot 10^{30}$, $\mu = 3 \cdot 10^{-8}$, $\Delta T_\sigma = 11,285K$ et $\Delta T_0 = 0,133K$ et un refroidissement de $10K \cdot \text{min}^{-1}$

| Valeur de N_{max} | Température T_a | Durée du plateau de solidification | Température T_b |
|----------------------------|-------------------|------------------------------------|-------------------|
| $1,2 \cdot 10^{20} m^{-3}$ | 155,6°C | 1,11s | 155,7°C |
| $1,2 \cdot 10^{25} m^{-3}$ | 156,4°C | 2,12s | 156,4°C |
| $1,2 \cdot 10^{30} m^{-3}$ | 156,6°C | 3,11s | 156,6°C |

Tableau 4.3 : Influence de N_{max}

Influence de μ

L'ordre de grandeur de ce paramètre est de $3 \cdot 10^{-10} m \cdot s^{-1}$ à $3 \cdot 10^{-8} m \cdot s^{-1}$. Les autres paramètres sont fixés à $N_{max} = 1,2 \cdot 10^{25} m^{-3}$, $\Delta T_\sigma = 1,1285K$ et $\Delta T_0 = 0,133K$. On remarque que lorsque μ augmente, les températures T_a et T_b sont plus hautes et la durée du plateau de solidification est plus longue (tableau 4.4). Le paramètre μ , qui représente la vitesse de croissance des germes est lié au maximum de la distribution gaussienne N_{max} .

L'étude de ces différents paramètres a permis d'identifier leur influence sur le comportement de la température lors de la surfusion. Il apparaît que les valeurs des températures de la rupture de la surfusion et du plateau sont fonction de N_{max} et de μ . De par leur défi-

| Valeur de μ | Température T_a | Durée du plateau de solidification | Température T_b |
|--------------------|-------------------|------------------------------------|-------------------|
| $3.10^{-10}m^{-3}$ | 155,3°C | 0,98s | 155,4°C |
| $3.10^{-9}m^{-3}$ | 156,1°C | 1,67s | 156,1°C |
| $3.10^{-8}m^{-3}$ | 156,4°C | 2,12s | 156,4°C |

Tableau 4.4 : *Influence de μ*

dition dans la distribution gaussienne dN/dt , les termes ΔT_0 et ΔT_σ influencent la valeur de T_a . Par contre, aucun de ces paramètres n'a permis de modifier l'écart de température entre T_a et T_b .

4.3 Conclusion du chapitre

Les expériences réalisées sur un échantillon d'indium ont permis d'étudier les phénomènes thermiques en les découplant des phénomènes dynamiques. Les expériences sur le contact brusque du métal avec un moule montrent que lors de l'impact, la résistance thermique entre les deux matériaux n'est pas constante et suggère que la solidification et la modélisation du contact imparfait sont couplées. Les expériences par DSC, quant à elles, montrent que la grande vitesse de refroidissement que génère l'impact et le faible volume des gouttes sont susceptibles d'initier le phénomène de surfusion, ce qui retarde la solidification du métal et dans le cas d'étalement de gouttes, peut prolonger l'étalement. Ces expériences ont donc pour intérêt de déceler les phénomènes qui ne sont généralement pas pris en compte dans la littérature.

Conclusion et perspectives

La pulvérisation de gouttelettes métalliques sur un substrat froid en vue de la fabrication d'un revêtement fin est un procédé industriel largement utilisé. Mais les phénomènes qui interviennent à l'échelle des gouttes ne sont encore que partiellement maîtrisés car les interactions entre ces particules fluides, la solidification ainsi que la refusion éventuelle par projection de gouttes sur les précédentes sont difficiles à analyser expérimentalement à cause des échelles de temps et d'espace de l'ordre respectivement de la milliseconde et du millimètre. Il est donc nécessaire de faire appel à un outil numérique complexe pour prendre en compte les divers aspects physiques de la pulvérisation. Ces travaux ont eu pour objectif d'apporter une meilleure compréhension des phénomènes dynamiques et thermiques qui se produisent à l'échelle de plusieurs gouttes impactant un substrat froid.

Le chapitre I a fait l'objet de l'état de l'art sur le sujet de l'impact d'une goutte sur un substrat et les études sur la physique associée. Les phénomènes hydrodynamiques et thermiques qui interviennent dans le comportement d'une particule fluide isolée sont nombreux et suscitent encore de nos jours des interrogations. Outre la vitesse, le diamètre de la goutte et ses caractéristiques, l'interface entre la goutte et le substrat et avec l'air sont des propriétés intrinsèques qui définissent le comportement de déposition ou d'éclaboussure. Mais l'impact de plusieurs gouttes a été très peu étudié expérimentalement à l'échelle des particules fluides et les études numériques se résument à des configurations particulières.

Le chapitre II a été consacré à la description des méthodes numériques employées pour prendre en compte le caractère diphasique de l'évolution de gouttes dans l'air, tout en résolvant l'écoulement de chaque fluide et la thermique couplée à la solidification dans la goutte. La configuration du domaine a été choisie en 2D cartésien. Bien que des différences majeures apparaissent entre l'impact d'une goutte sphérique et le cylindre de cette confi-

guration, l'intérêt est de mettre en valeur les comportements des interactions entre les gouttes en fonction des conditions initiales. Des cas de validations des équations résolues sont également décrits afin de s'assurer du bon fonctionnement du code de calcul utilisé.

Dans le chapitre III, les simulations sont réalisées en 2D cartésien tout d'abord sur l'impact simultané de gouttes identiques, puis sur l'impact consécutif de ces mêmes gouttes. Lors de l'impact simultané de gouttes, les résultats présentés montrent que les conditions initiales d'impact jouent un rôle important sur la hauteur du jet de rencontre de deux gouttes voisines. En fonction des nombres de Reynolds et de Weber associés au diamètre et à la vitesse d'impact initiaux de la goutte, l'énergie cinétique initiale est convertie plus ou moins rapidement en énergie de surface et en travail de forces visqueuses, et la couche finale se stabilise après un temps plus ou moins long. La solidification qui intervient lorsque la goutte atteint une température inférieure à la température de fusion contribue à figer plus rapidement la matière. Par convection, le champ de température à l'intérieur de la goutte devient homogène et le front de solidification prend rapidement une forme plane. La solidification peut donc rapidement être considérée comme 1D. De plus, en figeant le métal, la solidification diminue l'énergie cinétique du système et atténue en conséquence la hauteur du jet de rencontre de deux gouttes voisines.

Afin d'analyser le comportement thermique de l'impact consécutif de gouttes, une étude a été réalisée sur la déposition de couches les unes sur les autres sans prendre en compte l'aspect dynamique. Il apparaît que les températures initiales du substrat et des couches de métal, la résistance thermique de contact entre deux éléments et la fréquence d'impact ont chacune un rôle important sur l'évolution du front de solidification. En paramétrant convenablement le système, il est possible d'obtenir une progression régulière du front de solidification, ou au contraire, par une fréquence élevée, l'ajout de nouvelles couches chaudes peut permettre la refusion partielle du système. L'avantage de refondre le métal sous forme d'une pellicule est d'atténuer les risques d'une rugosité de surface élevée à cause d'une solidification mal contrôlée.

Suite à cette étude, des simulations sur l'impact successif de goutte ont été réalisées et montrent que lorsqu'une particule fluide rencontre le film liquide encore en mouvement, des pièges d'air sont générés. Lorsque la vitesse de solidification est forte, ces pièges sont emprisonnés dans le revêtement ce qui augmente la porosité du film fin. Par contre, lorsqu'on augmente la fréquence d'impact de gouttes chaudes, l'apport de chaleur que cela induit s'oppose à la solidification ce qui permet aux bulles d'air d'être éjectées du film fin

avant d'être piégées par le changement de phase.

Dans le chapitre IV, deux études expérimentales sur un métal particulier (indium) sont réalisées afin d'analyser le comportement thermique lors du contact brusque d'une fine couche de métal et d'un substrat froid et sa cinétique de cristallisation. L'étude numérique de l'impact de gouttelettes ne permet pas en effet de tenir compte de tous les phénomènes thermiques et cinétiques qui interviennent. Les expériences ont pour but de souligner les phénomènes qu'il serait intéressant de modéliser et d'ajouter à la simulation numérique.

Le premier dispositif constitué d'un socle où on place l'échantillon d'indium et d'un couvercle d'acier froid permet de réaliser le contact des deux milieux. Par acquisition des températures à des cotes précises et à l'aide d'une méthode inverse séquentielle, le flux qui traverse l'interface ainsi que la résistance thermique de contact ont été analysés. Cette étude montre que l'hypothèse selon laquelle la résistance thermique de contact entre une goutte et le substrat est constante est vérifiée aux temps longs mais qu'elle dépend du temps lors des premiers instants du contact.

Le second dispositif est une analyse par calorimétrie. L'étude a consisté à soumettre un échantillon d'indium à un refroidissement à vitesse constante afin d'évaluer sa cinétique de cristallisation. Les résultats sont montrés que l'échantillon exhibe un comportement de surfusion. Dans la gamme de vitesses choisie, les degrés de surfusions ont des valeurs très proches, mais les plateaux de solidification durent plus longtemps quand la vitesse de refroidissement est plus faible. En comparant la cinétique expérimentale à différents modèles, il est apparu que ce type de cinétique avec recalescence est difficile à représenter à cause de la vitesse de croissance des germes. Les modèles font appel à des paramètres dont les valeurs sont très importantes et l'analyse numérique de la cinétique reste difficile à réaliser. En ce sens, les résultats ne sont donc pas à la hauteur de nos attentes et il serait intéressant d'approfondir les études sur la modélisation de ces phénomènes.

Les perspectives de ce travail concernent la mise en place de la simulation en 3D de l'impact de gouttes, bien que cela nécessite un nombre de mailles très important et une taille mémoire conséquente. Cependant, l'analyse 2D des phénomènes a permis de donner un ordre de grandeur des dimensions à respecter ainsi que de localiser les zones où l'on devra porter notre attention, c'est-à-dire à la rencontre de deux gouttes et à l'impact des nouvelles gouttes où les pièges d'air sont susceptibles de se créer. De plus, il serait

intéressant de poursuivre les investigations concernant la surfusion afin de la modéliser correctement et de l'intégrer dans le code de calcul.

Annexe A

Expression analytique du contact brusque de deux milieux semi-infinis en contact imparfait

On considère deux milieux semi infinis en contact imparfait en $x = 0$ avec une résistance thermique de contact constante selon le schéma A.1

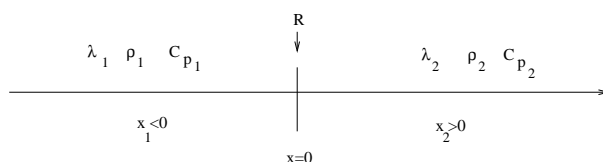


Figure A.1 : *Schéma du contact de deux milieux avec une résistance thermique de contact constante R*

Les milieux 1 et 2 sont respectivement caractérisés par les conductivités thermiques λ_1 et λ_2 , les capacités calorifiques c_{p_1} et c_{p_2} et les masses volumiques ρ_1 et ρ_2 . Leurs domaines sont respectivement $x_1 < 0$ et $x_2 > 0$. Soit R la résistance thermique de contact constante et h défini par:

$$h = \frac{b_1 + b_2}{Rb_1b_2}$$

Les diffusivités a et les effusivités b sont respectivement: $a = \frac{\lambda}{\rho C_p}$ et $b = \sqrt{\lambda \rho C_p}$

Le système d'équations est le suivant:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 c_{p1} \frac{\partial T_1}{\partial t} - \lambda_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial x_1^2} \\ \rho_2 c_{p2} \frac{\partial T_2}{\partial t} - \lambda_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x_2^2} \\ T_1(x_1 \rightarrow -\infty, t) = T_1^0 \\ T_2(x_2 \rightarrow +\infty, t) = T_2^0 \\ -\lambda_1 \left(\frac{\partial T_1}{\partial x_1} \right)_{x_1=0} = -\lambda_2 \left(\frac{\partial T_2}{\partial x_2} \right)_{x_2=0} \\ -\lambda_2 \left(\frac{\partial T_2}{\partial x_2} \right)_{x_2=0} = \frac{T_2(x_2=0, t) - T_1(x_1=0, t)}{R} \\ T_1(x_1, t = 0) = T_1^0 \\ T_2(x_2, t = 0) = T_2^0 \end{array} \right.$$

Soient $\theta_1(x_1, t) = T_1(x_1, t) - T_1^0$ et $\theta_2(x_2, t) = T_2(x_2, t) - T_2^0$ et $\bar{\theta}_1 = \mathcal{L}(\theta_1)$ et $\bar{\theta}_2 = \mathcal{L}(\theta_2)$ les transformées de Laplace correspondantes.

$$\left\{ \begin{array}{l} p\bar{\theta}_1 - a_1 \frac{d^2 \bar{\theta}_1}{dx_1^2} = 0 \\ p\bar{\theta}_2 - a_2 \frac{d^2 \bar{\theta}_2}{dx_2^2} = 0 \\ \bar{\theta}_1(x_1 \rightarrow -\infty) = 0 \\ \bar{\theta}_2(x_2 \rightarrow +\infty) = 0 \\ -\lambda_1 \left(\frac{d\bar{\theta}_1}{dx_1} \right)_{x_1=0} = -\lambda_2 \left(\frac{d\bar{\theta}_2}{dx_2} \right)_{x_2=0} \\ -\lambda_2 \left(\frac{d\bar{\theta}_2}{dx_2} \right)_{x_2=0} = \frac{\bar{\theta}_2(x_2=0) - \bar{\theta}_1(x_1=0)}{R} + \frac{T_2^0 - T_1^0}{pR} \end{array} \right.$$

La résolution de ce système amène aux solutions:

$$\bar{\theta}_1 = A_1 \exp\left(-\sqrt{\frac{p}{a_1}} x_1\right) + B_1 \exp\left(\sqrt{\frac{p}{a_1}} x_1\right) \quad x_1 < 0 \quad (\text{A.1})$$

$$\bar{\theta}_2 = A_2 \exp\left(-\sqrt{\frac{p}{a_2}} x_2\right) + B_2 \exp\left(\sqrt{\frac{p}{a_2}} x_2\right) \quad x_2 > 0 \quad (\text{A.2})$$

Les conditions limites à l'infini donnent:

$$\bar{\theta}_1 = B_1 \exp\left(\sqrt{\frac{p}{a_1}} x_1\right) \quad (\text{A.3})$$

$$\bar{\theta}_2 = A_2 \exp\left(-\sqrt{\frac{p}{a_2}} x_2\right) \quad (\text{A.4})$$

Par conservation des flux à l'interface, on obtient:

$$-b_1 B_1 = b_2 A_2 \quad (\text{A.5})$$

Par définition de la résistance thermique de contact, on a:

$$b_2 A_2 \sqrt{p} = \frac{A_2 - B_1}{R} + \frac{T_2^0 - T_1^0}{pR} \quad (\text{A.6})$$

Par résolution de ces deux équations, les expressions de A_2 et B_1 sont:

$$A_2 = \frac{b_1}{R b_1 b_2 \sqrt{p} - (b_1 + b_2)} \frac{T_2^0 - T_1^0}{p} \quad (\text{A.7})$$

$$B_1 = -\frac{b_2}{R b_1 b_2 \sqrt{p} - (b_1 + b_2)} \frac{T_2^0 - T_1^0}{p} \quad (\text{A.8})$$

Les solutions dans l'espace de Laplace sont donc:

$$\bar{\theta}_1 = -(T_2^0 - T_1^0) \frac{b_2}{b_1 + b_2} \frac{\exp(\sqrt{\frac{p}{a_1}} x_1)}{p \left(\frac{R b_1 b_2}{b_1 + b_2} \sqrt{p} - 1 \right)} \quad (\text{A.9})$$

$$\bar{\theta}_2 = (T_2^0 - T_1^0) \frac{b_1}{b_1 + b_2} \frac{\exp(-\sqrt{\frac{p}{a_2}} x_2)}{p \left(\frac{R b_1 b_2}{b_1 + b_2} \sqrt{p} - 1 \right)} \quad (\text{A.10})$$

En introduisant la variable h :

$$\bar{\theta}_1 = -(T_2^0 - T_1^0) \frac{b_2}{b_1 + b_2} \frac{h}{p(\sqrt{p} - h)} \exp\left(\sqrt{\frac{p}{a_1}} x_1\right) \quad (\text{A.11})$$

$$\bar{\theta}_2 = (T_2^0 - T_1^0) \frac{b_1}{b_1 + b_2} \frac{h}{p(\sqrt{p} - h)} \exp\left(-\sqrt{\frac{p}{a_2}} x_2\right) \quad (\text{A.12})$$

Par transformée inverse de Laplace, les températures T_1 et T_2 s'écrivent finalement:

$$T_1(x_1, t) = T_1^0 + (T_2^0 - T_1^0) \frac{b_2}{b_1 + b_2} \left(-\exp\left(-h \frac{x_1}{\sqrt{a_1}}\right) \cdot \exp(h^2 t) \operatorname{erfc}\left(h\sqrt{t} - \frac{x_1}{2\sqrt{a_1 t}}\right) + \operatorname{erfc}\left(-\frac{x_1}{2\sqrt{a_1 t}}\right) \right) \quad (\text{A.13})$$

$$T_2(x_2, t) = T_2^0 - (T_2^0 - T_1^0) \frac{b_1}{b_1 + b_2} \left(-\exp\left(h \frac{x_2}{\sqrt{a_2}}\right) \cdot \exp(h^2 t) \operatorname{erfc}\left(h\sqrt{t} + \frac{x_2}{2\sqrt{a_2 t}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{x_2}{2\sqrt{a_2 t}}\right) \right) \quad (\text{A.14})$$

Ainsi les températures d'interface sont:

$$T_{1,int}(t) = T_1^0 + (T_2^0 - T_1^0) \frac{b_2}{b_1 + b_2} \left(-\exp(h^2 t) \operatorname{erfc}(h\sqrt{t}) + 1 \right) \quad (\text{A.15})$$

$$T_{2,int}(t) = T_2^0 - (T_2^0 - T_1^0) \frac{b_1}{b_1 + b_2} \left(-\exp(h^2 t) \operatorname{erfc}(h\sqrt{t}) + 1 \right) \quad (\text{A.16})$$

Annexe B

Algorithme de surfusion selon le modèle micro-macroscopique

Un échantillon de métal (indium) initialement liquide est soumis à un refroidissement à vitesse constante. On suppose connue la température initiale T^0 . Le milieu étant initialement liquide, la fraction solide f_s ainsi que le nombre de germes N et le rayon de ces germes R sont nuls à l'instant $t = 0$. L'algorithme décrivant le modèle micro-macroscopique est le suivant:

Initialisation:

$$T^0 = T^{init} ; f_s^0 = 10^{-15} ; N^0 = 10^{-12} ; R^0 = 10^{-12}$$

Boucle en temps:

$$t = t + \Delta t ; k=k+1$$

Réactualisation des variables:

$$N^k = N^{k-1} ; R^k = R^{k-1}$$

Définition de $\frac{dN^k}{dt}$ en fonction de l'évolution des températures:

Si ($T^k > T_f$ ou $f_s = 1$) alors

$$\frac{dN^k}{dt} = 0$$

Si ($T^k < T^{k-1}$ et $f_s < 1$) alors

$$\begin{aligned} \frac{dT^k}{dt} &= \frac{T^k - T^{k-1}}{\Delta t} \text{ et } \Delta T^k = (T_f - T^k) \\ \frac{dN^k}{dt} &= -\frac{N_{max}}{\sqrt{2}\Delta T_\sigma} \exp\left[-\frac{(\Delta T^k - \Delta T_0)^2}{2\Delta T_\sigma}\right] \frac{dT^k}{dt} \end{aligned}$$

Si ($T^k > T^{k-1}$) alors

$$\frac{dN^k}{dt} = 0$$

Calcul de N^k et R^k (valable si $T^k < T_f$):

$$N^k = \sum_{i=0}^k \frac{dN^i}{dt} \Delta t$$

$$\frac{dR^k}{dt} = \mu(T_f - T^k)^2$$

$$R^k = \sum_{i=0}^k \frac{dR^i}{dt} \Delta t$$

Calcul de la correction Φ :

Si ($T^k < T^{k-1}$ et $f_s^{k-1} < 0,8$) alors

$$\Phi = 1$$

Sinon

$$\Phi = -10,32 * Ln(f_s^{k-1})$$

Calcul du terme source S_c^k :

$$S_c^k = -\rho L_f \Phi 4\pi (R^k)^2 N^k \frac{dR^k}{dt}$$

Résolution du système matriciel T^{k+1}

Réactualisation de la fraction solide f_s^{k+1} :

$$f_s^{k+1} = f_s^k - \frac{S_c}{\rho L_f \Delta t}$$

Passage au pas de temps suivant:

Si $t < t_{max}$ alors itération au pas de temps suivant

Sinon fin de l'algorithme

Bibliographie

- [Allen 88] R.F. ALLEN. *The mechanics of splashing*. Journal of colloid and interface science, vol. 124 (1), p. 309–316, 1988.
- [Arquis 84] E. ARQUIS & J.P. CALTAGIRONE. *Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide-poreux: application à la convection naturelle*. Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Série II, n° 1, p. 1–4, 1984.
- [Astarita 87] G. ASTARITA & J.M. KENNY. *The Stefan and Deborah numbers in polymer crystallisation*. Chem. Engng. Commun, vol. 53, p. 69–84, 1987.
- [Avrami 39] M. AVRAMI. *Kinetics of phase change I*. J. Chem. Phys., vol. 7, p. 1103–1112, 1939.
- [Avrami 40] M. AVRAMI. *Kinetics of phase change II*. J. Chem. Phys., vol. 8, p. 212–224, 1940.
- [Avrami 41] M. AVRAMI. *Kinetics of phase change III*. J. Chem. Phys., vol. 9, p. 177–184, 1941.
- [Aziz 00] S.D. AZIZ & S. CHANDRA. *Impact, recoil and splashing of molten metal droplets*. Int. J. Heat Mass Trans., vol. 43, p. 2841–2857, 2000.
- [Baïlon 00] J.P. BAÏLON & J.M. DORLOT. Des matériaux. Presse internationale de Polytechnique, 2000.
- [Beck 85] J.V. BECK, B. BLACWELL & C.R. ST CLAIR. Inverse heat conduction: ill posed problem. Willey Intersc., New York (USA), 1985.

- [Bertrand 99] O. BERTRAND. *Phénomènes de ségrégation et contraintes thermomécaniques associés au processus de changement de phase liquide-solide*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1999.
- [Bianchi 95] L. BIANCHI, A. GRIMAUD, F. BLEIN, P. LUCCHÈSE & P. FAUCHAIS. *Comparison of plasma-sprayed alumina coatings by RF and DC plasma spraying*. Journal of thermal spray technology, vol. 4 (1), p. 59–66, 1995.
- [Bénard 95] A. BÉNARD & S. G. ADVANI. *Energy equation and the crystallization kinetics of semi-crystalline polymers: regimes of coupling*. Int. J. Heat Mass Trans., vol. 38 (5), p. 819–832, 1995.
- [Bonn 02] D. BONN, V. BERGERON & L. VOVELLE. *Quand les gouttes ne rebondissent plus*. La Recherche, vol. 351, p. 40–43, 2002.
- [Brackbill 92] J.U. BRACKBILL, D.B. KOTHE & ZEMACH C. *A continuum method for modeling surface tension*. J. Comp. Phys., vol. 100, p. 335–354, 1992.
- [Brutin 03] D. BRUTIN. *Drop impingement on a deep liquid surface: study of a crater's sinking dynamics*. C. R. Mécanique, vol. 331, p. 61–67, 2003.
- [Caldwell 00] J. CALDWELL & C-C. CHAN. *Spherical solidification by the enthalpy method and the heat balance integral method*. Applied Mathematical Modelling, vol. 24, p. 45–53, 2000.
- [Chandra 91] S. CHANDRA & C.T. AVEDISIAN. *On the collision of a droplet with a solid surface*. Proc. R. Soc. London, vol. A 432, n° 13, p. 2771–2789, 1991.
- [Chao 99] L.S. CHAO & W.C. DU. *Macro-micro modeling of solidification*. Proc. Natl. Sci. Counc. ROC(A), vol. 23, n° 5, p. 622–629, 1999.
- [Chorin 68] A.J. CHORIN. *Numerical solution of the Navier-stokes equations*. Math. Comput., vol. 22, p. 745–762, 1968.

- [Delaunay 85] D. DELAUNAY. *Etude du couplage convection naturelle – conduction avec changement de phase. Application au stockage périodique de l'énergie*. Thèse de doctorat, Université de Nantes, 1985.
- [Delaunay 90] D. DELAUNAY. *transferts de chaleur par conduction associés à un changement de phase*. Ecole d'été G.U.T: Transfert de chaleur et de matière avec changement de phase, p. 327–372, 1990.
- [Dong 96] M. DONG, J. WANQI, L. SHAN & X. WEI. *Solute redistribution and growth velocity response in directional solidification process*. *J. Crystal Growth* 169, vol. 169, p. 170–174, 1996.
- [Dussan 91] E. B. DUSSAN, V. E. RAMÉ & S. GAROFF. *On identifying the appropriate boundary conditions at a moving contact line: an experimental investigation*. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 230, p. 97–116, 1991.
- [Escure 00] C. ESCURE, M. VARDELLE, P. FAUCHAIS & A. GRIMAUD. *Visualisation of particle impact in thermal spray*. Montréal, p. 743–752, 2000.
- [Fauchais 96] P. FAUCHAIS, M. VARDELLE, A. VARDELLE & L. BIANCHI. *Plasma spray: study of the coating generation*. *Ceramics International*, vol. 22, p. 295–303, 1996.
- [Feng 98] Z.G. FENG, G. MONTAVON, Z.Q. FENG, C. CODDET & M. DOMASZWESKI. *On the flattening behavior of fully molten particles impacting onto solid substrates under thermal spray conditions*. Journée SFT/GUT “Phénomènes de transport à l'impact de gouttelettes sur un substrat”, p. 1–12, 1998.
- [Fortin 82] M. FORTIN & R. GLOWINSKI. *Méthodes de Lagrangien Augmenté; Application à la résolution numérique de problèmes aux limites*. *Méthodes Mathématiques de l'Informatique*, Dunod, 1982.
- [Fukai 93] J. FUKAI, Z. ZHAO, D. POULIKAKOS & C.M. MEGARIDIS. *Modeling of the deformation of a liquid droplet impinging upon a flat surface*. *Phys. Fluids*, vol. 5, n° 11, p. 2588–2599, 1993.

- [Fukai 95] J. FUKAI, Y. SHIIBA, T. YAMAMOTO, O. MIYATAKE, D. POULIKAKOS, C.M. MEGARIDIS & Z. ZHAO. *Wetting effects on the spreading of a liquid droplet colliding with a flat surface: Experiment and modeling*. Phys. Fluids, vol. 7, n° 2, p. 236–247, 1995.
- [Fukumoto 99] M. FUKUMOTO, E. NISHIOKA & T. MATSUBARA. *Flattening and solidification behavior of a metal droplet on a flat substrate surface held at various temperatures*. Surface and Coatings Technology, vol. 120-121, p. 131–137, 1999.
- [Ghafouri-Azar 02] .R. GHAFOURI-AZAR, J. MOSTAGHIMI & S. CHANDRA. *A three dimensional numerical study of tin droplets landing sequentially on a solid surface*. Proceedings of ASME FEDSM'02, 2002 ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, Montreal, Quebec, Canada, July 14-18, FEDSM2002-31234, p. 1–8, 2002.
- [Gibout 99] S. GIBOUT, M. STRUB & J.P. DUMAS. *Identification par une méthode inverse de la vitesse de nucléation de liquides surfondus dispersés*. Société Française de Thermique, p. 39–44, 17-19 mai 1999.
- [Glockner 00] S. GLOCKNER. *Contribution à la modélisation de la pollution atmosphérique dans les villes*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 2000.
- [Goodfellow] GOODFELLOW. . Site Inernet: www.goodfellow.com, .
- [Gueyffier 98a] D. GUEYFFIER & S. ZALESKI. *Formation de digitations lors de l'impact d'une goutte sur un film liquide*. C. R. Acad. Sci. Série II b, vol. 326, p. 839–844, 1998.
- [Gueyffier 98b] D. GUEYFFIER & S. ZALESKI. *Full Navier-Sokes simulation of droplet impact on thin liquid films de digitations lors de l'impact d'une goutte sur un film liquide*. Third international conference on Multiphase Flow, Lyon, France, p. 1–7, 1998.
- [Haley 91] P. HALEY & M. MIKISIS. *The effect of contact line on droplet spreading*. Journal of Fluid Mechanics, vol. 223, p. 57–81, 1991.

- [Harfel 03] S. HARFEL & D. POULIKAKOS. *Experimental investigation of the transient impact fluid dynamics and solidification of a molten microdroplet pile-up*. Int. J. Heat Mass Trans., vol. 46, p. 535–550, 2003.
- [Harlow 67] F.H. HARLOW & J.P. SHANNON. *The splash of a liquid drop*. J. Appl. Phys., vol. 38, n° 10, p. 3855–3866, 1967.
- [Healy 01] W.M. HEALY, J.G. HARTLEY & S.I. ABDEL-KHALIK. *Surface wetting effects on the spreading of liquid droplets impacting a solid surface at low Weber numbers*. Int. J. Heat Mass Trans., vol. 44, p. 235–240, 2001.
- [Hirsh 90] C. HIRSH. Numerical computation of internal and external flows. John Wiley and sons, 1990.
- [Jiang 99] X.Y. JIANG, J. MATEJICEK & SAMPATH. *Substrate temperature effects on splat formation, microstructure development and properties of plasma sprayed coatings Part II: Case study for molybdenum*. Materials Science and Engineering, vol. A272, p. 189–198, 1999.
- [Josserand 01] C. JOSSERAND & S. ZALESKI. *Impact de gouttes sur un film liquide mince*. Congrès Français de Mécanique, p. 1–6, 2001.
- [Khadra 94] K. KHADRA. *Méthodes adaptatives de raffinement local multigrille, applications aux équations de Navier–Stokes et de l’énergie*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1994.
- [Le Bot 98] P. LE BOT. *Comportement thermiques des semi cristallins injectés. Application à la prédiction des retraits*. Thèse de doctorat, Université de Nantes, 1998.
- [Le Bot 02] C. LE BOT & E. ARQUIS. *Direct numerical simulation of the manufacturing of a coating on a substrate by projection*. Proceedings of ASME FEDSM’02, ASME 2002 Fluids Engineering Division Summer Meeting, p. CD–Rom: FEDSM2002 – 31453 – S329, Montréal, Quebec, Canada, Juillet 2002.

- [Le Bot 03] C. LE BOT, S. VINCENT & E. ARQUIS. *Impact and solidification of indium droplets on a dry substrate*. Soumis à Int. J. Thermal Sci., 2003.
- [Lebaigue 99] O. LEBAIGUE, D. JAMET & B. MATHIEU. *Méthode du second gradient pour les interfaces liquide-vapeur*. Cours de l'école CEA-EDF-INRIA sur les problèmes de suivis d'interfaces, 1999.
- [Leger 96] A.C. LEGER, M. VARDELLE, A. VARDELLE, P. FAUCHAIS, S. SAMPATH, C.C. BERNDT & H. HERMAN. *Plasma sprayed zirconia: relationship between particle parameters, splat formation and deposit generation. Part I: impact and solidification*. Journal of Thermal Spray: Practical solutions for engineering problems, p. 623–626, 1996.
- [LeVeque 90] R.J. LEVEQUE. Numerical methods for conservation laws. Lecture in Mathematics. ETH Zurich, Birkhauser, 1990.
- [Lide 02] DAVID R LIDE. Handbook of Chemistry and Physics. 82e ed., 2001-2002.
- [Liu 95] W. LIU, G.X. WANG & E.F. MATTHYS. *Thermal analysis and measurements for a molten drop impacting on a substrate: cooling, solidification and heat transfer coefficient*. Int. J. Heat Mass Trans., vol. 38, p. 1387–1395, 1995.
- [Loulou 95] T. LOULOU. *Etude expérimentale de l'évolution des conditions thermiques de contact lors de la solidification d'une goutte tombant sur une paroi métallique refroidie*. Thèse de doctorat, Université de Nantes, 1995.
- [Loulou 97] T. LOULOU & D. DELAUNAY. *On the interface temperature of two suddenly contacting bodies, one of them undergoing phase change*. Int. J. Heat Mass Trans., vol. 40, n° 7, p. 1713–1716, 1997.
- [Loulou 99] T. LOULOU, E.A. ARTYUKHIN & J.P. BARDON. *Estimation of thermal contact resistance during the first stages of metal solidi-*

- fication process: II - experimental setup and results.* Int. J. Heat Mass Trans., vol. 42, p. 2129–2142, 1999.
- [Madejski 76] J. MADEJSKI. *Solidification of droplets on a cold surface.* Int. J. Heat Mass Trans., vol. 19, p. 1009–1013, 1976.
- [Massé 00] H. MASSÉ, E. ARQUIS, D. DELAUNAY, S. QUILLIET & P. LE BOT. *Heat transfer with mechanically driven thermal contact resistance at the polymer-mold interface in injection molding of polymers.* soumis à Int. J. Heat Mass Trans., 2000.
- [Mundo 95] C. MUNDO, M. SOMMERFELD & C. TROPEA. *Droplet-wall collisions: experimental studies of the deformation and breakup process.* Int. J. Multiphase Flow, vol. 21, n° 2, p. 151–173, 1995.
- [Nakamura 72] K. NAKAMURA, T. WATANABE & K. KATAYAMA. *Some aspects of non isothermal crystallization of polymers I. Relationship between crystallization temperature, crystallinity and cooling conditions.* Journal of Applied Polymer Science, vol. 16, p. 1077–1091, 1972.
- [Nicolas 97] X. NICOLAS, P. TRAORE, A. MOJTABI & J. P. CALTAGIRONE. *Augmented Lagrangian method and open boundary conditions in 2D simulation of Poiseuille-Bénard channel flow.* Int. J. Numer. Methods Fluids, vol. 25, n° 2, p. 265–283, 1997.
- [Ozawa 71] T. OZAWA. *Kinetics of non-isothermal crystallization.* Polymer, vol. 12, p. 150–158, 1971.
- [Papon 99] P. PAPON, J. LEBLOND & P.H.E. MEIJER. *Physique des transitions de phases, concepts et applications.* Dunod, 1999.
- [Parneix 95] S. PARNEIX. *Simulation des écoulements turbulents et des transferts thermiques en vue de l'optimisation du refroidissement des pales de turbine.* Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1995.
- [Pasandideh-Fard 96] M. PASANDIDEH-FARD, Y.M. QIAO, S. CHANDRA & M. MOSTAGHIMI. *Capillary effects during droplet impact on a solid surface.* Phys. Fluids, vol. 8 (3), p. 650–659, 1996.

- [Pasandideh-Fard 98] M. PASANDIDEH-FARD, R. BHOLA, S. CHANDRA & J.D. MOSTAGHIMI. *Deposition of tin droplets on a steel plate: simulation and experiments*. Int. J. Heat Mass Trans., vol. 41, p. 2929–2945, 1998.
- [Pascal 61] P. PASCAL. Nouveau traité de chimie minérale, tomeVI. ed. Masson, 1961.
- [Patankar 80] S.V. PATANKAR. Numerical heat transfer and fluid flow. Hemisphere Publishing Corporation, New York (USA), 1980.
- [Peressini 00] G. PERESSINI. *Schemi compatti ai volumi finiti in termofluidodinamica computazionale*. Thèse de doctorat, Università degli studi di trieste, 2000.
- [Poutot 01] G. POUTOT, P. LE BOT, D. DELAUNAY & Y. JARNY. *Analyse des phénomènes thermiques lors de la cristallisation d'un thermoplastique*. Société Française de Thermique, p. 615–620, 29-31 mai 2001.
- [Poutot 02] G. POUTOT. *Etude des transferts thermiques lors de la cristallisation d'un polymère semi-cristallin*. Thèse de doctorat, Université de Nantes, 2002.
- [Quilliet 98] S. QUILLIET. *Transferts thermiques à l'interface polymère-métal dans le procédé d'injection des thermoplastiques*. Thèse de doctorat, Université de Nantes, 1998.
- [Robert 98] C. ROBERT, A. VARDELLE, D. GOBIN & P. FAUCHAIS. *Modeling of rapid solidification in plasma spray deposition*. High Temp. Material Processes 2, p. 225–244, 1998.
- [Sampath 99] S. SAMPATH, X.Y. JIANG, J. MATEJICEK, A.C. LEGER & A. VARDELLE. *Substrate temperature effects on splat formation, microstructure development and properties of plasma sprayed coatings Part I: Case study for partially stabilized zirconia*. Materials Science and Engineering, vol. A272, p. 181–188, 1999.
- [Samsonov 68] SAMSONOV. Handbook of the physicochemical properties of the elements. , 1968.

- [Schiaffino 97a] S. SCHIAFFINO & A.A. SONIN. *Molten droplet deposition and solidification at low Weber numbers*. Phys. Fluids, vol. 9 (11), p. 3172–3187, 1997.
- [Schiaffino 97b] S. SCHIAFFINO & A.A. SONIN. *Motion and arrest of a molten contact line on a cold surface: an experiment study*. Phys. Fluids, vol. 9 (8), p. 2217–2226, 1997.
- [Sobolev 98] V.V. SOBOLEV. *Formation of splat morphology during thermal spraying*. Materials Letters, vol. 36, p. 123–127, 1998.
- [Taek-Soo 01] K. TAEK-SOO, L. BYONG-TAEK, L. CHUL RO & C. BYONG-SUN. *Microstructure of rapidly solidified Al-20Si allowed powders*. Material Science and Engineering, vol. A304-306, p. 617–620, 2001.
- [Thoroddsen 98] S.T. THORODDSEN & J. SAKAKIBARA. *Evolution of the fingering pattern of an impacting drop*. Phys. Fluids, vol. 10, n° 6, p. 1359–1374, 1998.
- [Triggvason 99] G. TRIGGVASON. *Computations of multiphase flow by a finite difference / front tracking method - Applications*. Cours de l'école CEA-EDF-INRIA sur les problèmes de suivis d'interfaces, 1999.
- [Van der Vorst 92] H.A. VAN DER VORST. *A fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems*. SIAM J. Sci. Stat. Comput., vol. 13, n° 2, p. 631–644, 1992.
- [Vardelle 94] M. VARDELLE, A. VARDELLE, A.C. LEGER, P. FAUCHAIS & D. GOBIN. *Influence of particle parameters at impact on splat formation and solidification in plasma spraying processes*. Journal of Thermal spray technology, vol. 4 (1), p. 50–58, 1994.
- [Vincent 99a] S. VINCENT. *Modélisation d'écoulements incompressibles de fluides non-miscibles*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1999.
- [Vincent 99b] S. VINCENT & J.P. CALTAGIRONE. *Efficient solving method for unsteady incompressible interfacial flow problems*. Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol. 30, p. 795–811, 1999.

- [Vincent 00] S. VINCENT, E. ARQUIS & J.P. CALTAGIRONE. *Simulation numérique du refroidissement et de la solidification de gouttes lors de l'impact sur un substrat solide*. Société Française de Thermique, vol. 8, p. 371–375, 2000.
- [Voller 90] V.R. VOLLER. *Fast implicit finite-difference method for the analysis of phase change problems*. Numerical Heat Transfer, vol. 17, Part B, p. 155–169, 1990.
- [Waldvogel 96] J.M. WALDVOGEL, D. POULIKAKOS, D.B. WALLACE & R. MARUSAK. *Transport phenomena in picoliter size solder droplet dispersion*. Transaction of the ASME Journal of heat transfer, vol. 118, p. 148–156, 1996.
- [Wei 98] H. WEI & DY.S. CHEN. *The gas-liquid interface tracking using level set approach for die casting application*. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VIII, San Diego, California, p. 133–140, 1998.
- [Worthington 76] A.M. WORTHINGTON. *On the forms assumed by drops of liquids falling vertically on a horizontal plate*. Proc. R. Soc. London A, vol. 25, p. 261–280, 1876.
- [Worthington 77] A.M. WORTHINGTON. *A second paper on the forms assumed by drops of liquids falling vertically on a horizontal plate*. Proc. R. Soc. London A, p. 498–503, 1877.
- [Yarin 95] A. L. YARIN & D.A. WEISS. *Impact of drops on solid surfaces: self-similar capillary waves, and splashing as a new type of kinematic discontinuity*. Journal of Fluid Mechanics, vol. 283, p. 141–173, 1995.
- [Zhao 96a] Z. ZHAO, D. POULIKAKOS & J. FUKAI. *Heat transfer and fluid dynamics during collision of a liquid droplet on a substrate - II. Experiments*. Int. J. Heat Mass Trans., vol. 39 (13), p. 2791–2802, 1996.

- [Zhao 96b] Z. ZHAO, D. POULIKAKOS & J. FUKAI. *Heat transfer and fluid dynamics during collision of a liquid droplet on a substrate - I. Modeling.* Int. J. Heat Mass Trans., vol. 39 (13), p. 2771–2789, 1996.

Impact et solidification de gouttes métalliques sur un substrat solide

Résumé :

Ce travail a pour objet l'étude des phénomènes mécaniques et thermiques lors de l'impact de gouttes de métal chaudes sur un substrat solide sec froid par simulation numérique et par analyse expérimentale. Cette étude vise à mieux comprendre la formation de revêtements fins sur une surface par pulvérisation de gouttelettes et à caractériser les paramètres qui influencent la porosité du film fin et sa topologie de surface. Les simulations numériques sont basées sur un modèle à un fluide où le domaine contient à la fois l'air, les gouttes et le substrat. Ce modèle consiste à coupler les équations de Navier-Stokes, de transport de l'interface et de l'énergie avec prise en compte de la solidification. Les phénomènes dynamiques et thermiques sont validés indépendamment à partir de cas simples. Puis l'impact de plusieurs gouttes est analysé dans deux configurations, c'est-à-dire lors de l'impact simultané de particules fluides identiques, puis lors de l'impact successif de ces mêmes gouttes. Les résultats sont exprimés sous forme de hauteur du jet de rencontre de deux gouttes voisines en fonction de la contribution des énergies cinétique et de surface, du travail des forces visqueuses et du travail nécessaire à la solidification, au travers des nombres de Reynolds, de Weber et de Stefan. En parallèle, l'analyse expérimentale des phénomènes thermiques est réalisée afin de déterminer d'une part l'évolution de la résistance thermique de contact entre le métal et le substrat à l'aide d'une presse permettant le contact brusque de deux milieux l'un changeant de phase et d'autre part la cinétique de cristallisation du métal soumis à un refroidissement important à l'aide d'un calorimètre différentiel à balayage.

Mots-clés : Impact de gouttes, écoulement diphasique, tension superficielle, contact brusque, résistances thermiques de contact, méthodes inverses, solidification, surfusion.

Impact and solidification of metal droplets onto a solid substrate

Abstract:

This work aims at the study of mechanics and thermal phenomena during the impact of hot metal droplets onto a cold dry solid substrate by numerical simulation and experimental analysis. This study aims to understand the manufacturing of thin coatings on a surface by projection of droplets and to characterize the parameters which influence the porosity of the thin film and its surface topology. The numerical simulations are based on a One-Fluid model where the domain contains air, the droplets and the substrate. This modelling consists in coupling Navier-Stokes, advection and energy equations, taking into account the solidification. Dynamics and thermal phenomena are validated with simple cases. Then, the impact of several droplets is analysed for two configurations: the simultaneous impact of several identical fluid particles and the successive impact of these droplets. Results are expressed as height of two droplets meeting each other against the contribution of kinetic and surface energies and viscous forces and solidification works by the mean of Reynolds, Weber and Stefan numbers. In the same time, the analysis of thermal phenomena is carried out to determine on one hand the evolution of the thermal contact resistance between the metal and the substrate thanks to a press allowing the sudden contact between two media one undergoing phase change, and on the other hand, the crystallisation kinetics of the metal submitted to a high cooling with a differential scanning calorimeter.

Key words: Droplet impact, two phase flow, surface tension, sudden contact, thermal contact resistances, inverse methods, solidification, overmelting.