

Modélisation du revêtement de matière liquide par trempage selon une approche thermomécanique

C. Chaudemanche, J. Bikard, J. De Oliveira, T. Budtova et P. Navard

*Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Centre de Mise en Forme des Matériaux, UMR CNRS 7635,
BP 207, 06904 Sophia-Antipolis France*

Résumé: Le procédé de revêtement par trempage à chaud est abordé numériquement sur la base d'un modèle 3D. A une échelle mésoscopique, cette technique est décrite comme la solidification d'un polymère newtonien, initialement chaud, contenu dans un bain, due à l'introduction d'un objet cylindrique mobile froid. La prévision de la position du front de matière solidifiée dans le bain est assurée par l'utilisation d'une fonction caractéristique dont l'évolution peut être corrélée avec la croissance de la couche solidifiée (méthodes V.O.F. ou "level-set"). Une méthode éléments finis, selon une approche multidomaines, couplée à la résolution d'un problème enthalpique, est développée afin de simuler le taux de croissance moyen de la couche solidifiée pendant le processus de revêtement et afin d'étudier l'influence de la vitesse du substrat mobile sur l'épaisseur de la couche extraite.

Mots clés: Trempage, Approche multidomaine, Modélisation 3D, Méthode par éléments finis.

1. Introduction

Depuis de nombreuses années, le processus de revêtement par trempage est utilisé dans des domaines variés, tels que la galvanisation de feuilletts métalliques, la fabrication de gants en latex, l'élaboration de prothèses mammaires, le développement de capsules médicales... Ce procédé consiste à immerger un moule dans un liquide et à "figer" une couche de matière d'une épaisseur contrôlée, afin d'obtenir un produit à formes complexes. Les propriétés du produit final sont contrôlées par deux aspects primordiaux. Le premier est lié aux différents phénomènes physiques se produisant pendant que le liquide "se fige" autour du moule. Ces phénomènes peuvent être des transitions de phase au passage de la transition vitreuse (comme une cristallisation), des changements de propriétés (comme une augmentation brutale de la viscosité) ainsi qu'une évaporation pendant l'extraction du moule. Le second aspect est lié aux échanges thermiques et contraintes mécaniques intrinsèques au processus (flux de chaleur, écoulement liquide autour du moule pendant et après le trempage, tensions interfaciales...). Tous ces phénomènes physiques, thermiques et mécaniques commandent les propriétés du produit final, principalement ses caractéristiques dimensionnelles, sa morphologie et ses nano- et macrostructures.

Les applications modernes exigent une compréhension fondamentale des mécanismes de transfert de chaleur et de masse impliqués dans le dépôt et/ou la solidification sur un substrat introduit, puis extrait, d'un bain aux dimensions finies. En dépit de l'importance de ces applications, plusieurs questions liées au rôle du transfert thermique et de l'écoulement du fluide pendant la croissance de la

couche solidifiée demeurent sans réponse. Dans la littérature, différents auteurs ont étudié la croissance d'une couche solidifiée sur un substrat froid isotherme se déplaçant dans un bain liquide chaud [1]. Mais en raison d'hypothèses simplificatrices, ces problèmes ont des applications limitées. Dans la mesure où aucune solution analytique exacte de tels problèmes n'est disponible, la simulation numérique est nécessaire.

Récemment, des modèles numériques ont été développés pour intégrer une température non uniforme pour le substrat mobile [2, 3], mais peu d'études ont été réalisées en considérant les caractéristiques physico-chimiques du polymère liquide et les aspects de contact avec le substrat. Une manière de tenir compte de la forme complexe du matériau, du transfert thermique, des aspects mécaniques et des propriétés du fluide, est d'utiliser les outils numériques pour étudier et mieux décrire le processus de trempage. La première partie de cet article est consacrée à l'établissement d'un modèle, basé sur des considérations enthalpiques, et la deuxième partie concerne les résultats de la simulation.

2. Formulation du problème

2.1 Mise en équation du problème

Cette partie présente un modèle phénoménologique pour décrire la solidification du polymère par trempage à travers la caractérisation de l'évolution de la couche solidifiée autour d'un moule froid. La méthode utilisée consiste à estimer un champ de phase dans le bain de polymère, ou en d'autres termes, à déterminer pour une position donnée dans le bain, l'état (liquide ou solide) de la matière. Ainsi,

la fonction caractéristique de la phase solidifiée $1_s(x,t)$ est introduite comme un nouveau champ décrivant le bain de polymère :

$$1_s(x,t) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \text{ est dans la couche solidifiée du bain} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (1)$$

De la même façon, la fonction caractéristique de la phase liquide, $1_l(x,t)$ peut aussi être définie comme :

$$1_l = I - 1_s.$$

En supposant que le polymère est un fluide incompressible, les équations mécaniques du problème peuvent s'écrire, en utilisant la fonction caractéristique :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \vec{w} = 0 \\ \operatorname{div} \sigma + \rho \vec{g} = \vec{0} \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{Dans les phases liquides} \\ \text{et solidifiées} \end{array} \quad (2)$$

où \vec{v} est le champ de vitesse dans \mathbb{R}^3 , ρ la densité du polymère, \vec{g} la gravité et σ le tenseur des contraintes de Cauchy dans \mathbb{R}^3 . L'équation de la chaleur peut s'écrire classiquement comme :

$$(3) \quad \rho c \dot{T} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \dot{w} \quad \begin{array}{l} \text{Dans les phases liquides et} \\ \text{solidifiées} \end{array}$$

où c est la chaleur spécifique, k la conductivité et w le terme source (comprenant la dissipation visqueuse et l'évolution de la chaleur lors de la solidification). Afin de tenir compte des discontinuités des paramètres matériaux du polymère à travers l'interface liquide/solide, leurs évolutions sont décrites en employant la fonction caractéristique dans leur définition:

- le comportement du polymère est supposé newtonien, avec une viscosité η qui évolue de η_l (dans la phase liquide) à η_s (dans la phase solide), avec $\eta_s \gg \eta_l$.

$$\begin{cases} \sigma = \sigma_l = 2\eta_l(T)\varepsilon(v) - pI & \text{dans la phase liquide} \\ \sigma = \sigma_s = 2\eta_s(T)\varepsilon(v) - pI & \text{dans la phase solide} \\ + \text{conditions à travers l'interface liquide/solide} \end{cases} \quad (4)$$

où $\varepsilon(v)$ est le tenseur des taux de déformation et p la pression hydrostatique dans le bain ;

- en considérant la viscosité, la chaleur spécifique et la conductivité comme des champs variables dans le bain, évoluant avec la position de l'interface, les équations suivantes peuvent être démontrées :

$$\begin{cases} \rho c(1_l) = \rho_l c_l 1_l + \rho_s c_s (1 - 1_l) \\ k(1_l) = k_l 1_l + k_s (1 - 1_l) \\ \eta^{-1}(T, 1_l) = \eta_l^{-1}(T) 1_l + \eta_s^{-1}(T) (1 - 1_l) \end{cases} \quad (5)$$

où c_l et c_s sont respectivement les chaleurs spécifiques de la phase liquide et de la phase solide, et k_l et k_s les conductivités dans ces deux phases. La viscosité de la phase liquide suit une loi classique d'Arrhenius. Ainsi, la discontinuité des paramètres à l'interface liquide/solide est trivialement satisfaite (les fonctions caractéristiques 1_l et 1_s , sont semblables à la fonction de Heaviside dans \mathbb{R}^3 , dont le saut correspond au passage de l'interface).

2.2 Fonction caractéristique 1_l

Le transport de cette interface peut alors être décrit par l'évolution de la fonction caractéristique 1_l . Cette évolution est amenée par des considérations sur l'enthalpie de fusion du polymère, basées sur un modèle développé par Zhang et Moallemi [2]. L'existence d'une phase intermédiaire entre la phase liquide et solide est supposée, avec une longueur contrôlée par la chaleur latente de fusion du polymère L_f . La définition de la fonction caractéristique comme fonction de Heaviside est alors remplacée par une fonction continue de l'enthalpie :

$$1_l = \begin{cases} 0 & \text{si } h \leq c_s T_f & \text{(phase solide)} \\ (h - c_s T_f) / L_f & \text{si } c_s T_f \leq h \leq c_s T_f + L_f & \text{(liquide/ solide)} \\ 1 & \text{si } h \geq c_s T_f + L_f & \text{(phase liquide)} \end{cases} \quad (6)$$

où $h = 1_l h_l + (I - 1_l) h_s$ est l'enthalpie de mélange du polymère et h_s et h_l sont respectivement les enthalpies des phases solide et liquide, définies comme :

$$\begin{cases} h_s = c_s T \\ h_l = c_l T + T_f (c_s - c_l) + L_f \end{cases} \quad (7)$$

Le terme source dans l'équation de la chaleur est également défini avec la fonction caractéristique 1_l comme la somme de deux termes dissipatifs. Le premier correspond à la dissipation visqueuse, due au cisaillement dans le bain, et le second correspond à la puissance calorifique perdue dans le bain pendant la transition liquide/solide :

$$\begin{cases} \dot{w} = \sigma' : \varepsilon(v) - \rho L_f \frac{d1_l}{dT} \dot{T} \\ \sigma' = 2\eta(T, 1_l) \varepsilon(v) \end{cases} \quad (8)$$

où “:” dénote le produit scalaire de deux tenseurs et σ' correspond à la partie déviatorique du tenseur des contraintes. Avec cette formulation, la pression p correspond à la partie sphérique du tenseur des contraintes.

3. Résolution numérique

Les équations locales d'équilibre dans le bain peuvent être écrites dans un volume de contrôle,

selon une formulation variationnelle, et discrétisées par une méthode éléments finis. Une description lagrangienne du bain est choisie, avec une approximation mixte classique P1+/P1 en vitesse/pression. L'adaptation du maillage et le remaillage sont employés pour assurer la description correcte de l'écoulement dans le bain. De la même manière, le champ de température est discrétisé en employant une approximation de type P1. Un transfert de chaleur par convection est supposé sur la surface libre pour calculer le flux de chaleur : $\phi = -k\nabla T \cdot n = h(T - T_{bain})$. La vitesse, la pression et la température sont résolues en employant un schéma de Newton-Raphson. Une intégration explicite en temps basée sur un schéma d'Euler amène à l'algorithme suivant : au temps t , la fonction caractéristique $I_i(x,t)$ est calculée et les paramètres estimés, la vitesse et la pression (v,p) sont déterminées, ainsi que la température, via l'enthalpie, et le flux de chaleur. Le maillage est alors mis à jour selon le champ de vitesse et la procédure est répétée. Au besoin, des étapes de remaillage ont lieu.

4. Résultats et discussion

4.1 Description numérique du trempage

Afin de valider le modèle numérique de suivi de l'interface liquide/solide par la méthode de la fonction caractéristique, ce dernier a été implémenté dans le logiciel commercial Forge3[®] développé par le CEMEF. Le système est illustré sur la Figure 1. Il est constitué par un support métallique modélisant le fond du bain, par le bain lui-même (le polymère newtonien) sur les frontières duquel des conditions périodiques sont appliquées, et par le poinçon ou substrat mobile. Les paramètres matériaux considérés dans cet exemple ont été trouvés dans la littérature pour des polymères classiques et sont donnés dans le tableau 2. La longueur de l'échantillon est de 50mm.

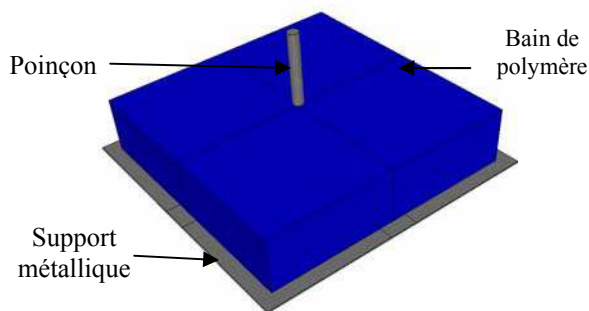


Fig. 1. Modélisation du système utilisé dans les simulations.

Le substrat constitue le poinçon mobile qui sera enduit durant le processus. La température du bain

T_{bain} est thermo-régulée à 55°C et la température de la tige T_p est égale à 20°C. La vitesse de la tige V_p est choisie égale à +/- 20 mm.s⁻¹. Le mouvement se compose alors en deux étapes : la descente ($V_p = -20$ mm.s⁻¹) et la remontée ($V_p = 20$ mm.s⁻¹). Le contact entre le poinçon et le bain est supposé parfaitement collant. Son rayon (dont l'extrémité est modélisée par une sphère) est égal à 0,38 mm. La profondeur maximum de trempage dans le bain est de 20 mm. La face supérieure du bain est en contact avec l'air à $T_{air} = 25^\circ\text{C}$, mais le coefficient d'échange thermique est faible (Tableau 2).

Le bain est maillé avec des éléments tétraédriques à quatre nœuds. Seule la surface externe inférieure du substrat est maillée, afin de tenir compte du contact collant et des échanges thermiques. Cependant, aucun calcul n'est effectué à l'intérieur. Le maillage dans le bain est hétérogène : grossier loin de la tige et raffiné à proximité (Fig. 2 (a-e)).

Paramètre	Nom	Valeur
Viscosité de la phase liquide	η_l (Pa.s)	1.10^{-1}
Viscosité de la phase solide	η_s (Pa.s)	10^6
Capacité thermique de la phase liquide	c_l (J.K ⁻¹ .kg ⁻¹)	1550
Capacité thermique de la phase solide	c_s (J.K ⁻¹ .kg ⁻¹)	1150
Conductivité thermique de la phase liquide	k_l (W.K ⁻¹ .m ⁻¹)	0,3
Conductivité thermique de la phase solide	k_s (W.K ⁻¹ .m ⁻¹)	4
Densité du polymère (supposée constante)	$\rho = \rho_l = \rho_s$ (kg.m ⁻³)	1300
Température fusion	T_f (°C)	30
Chaleur latente de fusion	L_f (J.kg ⁻¹)	77.10^3
Coefficient d'échange substrat/bain	h_{finger} (W.m ⁻² .K ⁻¹)	10^4
Coefficient d'échange air/bain	h_{air} (W.m ⁻² .K ⁻¹)	10

Tableau 2. Valeurs des paramètres matériaux et des coefficients d'échanges thermiques.

4.2 Simulation directe 3D du processus de revêtement par trempage

Les Figures 2(a) à 2(e) présentent les iso-couleurs de la fonction caractéristique, selon une coupe transversale. Les Figures 2(a,b) montrent les profils de la fonction caractéristique dans le bain, pendant la descente du poinçon. La température du bain, initialement égale à 55°C, diminue localement autour de ce dernier, jusqu'à 20°C. Quand la température du bain devient inférieure à la température de fusion $T_f = 30^\circ\text{C}$ (on considère que les températures de fusion et de solidification sont identiques), la solidification du polymère a lieu et la fonction caractéristique (initialement homogène et égale à 1 dans le bain) tend vers 0. Cette transition est clairement identifiée sur la Figure 2(c). La couche solidifiée autour du poinçon continue sa croissance pendant la phase de remontée. Une couche solidifiée est finalement extraite du bain (Figs.2(d,e)).

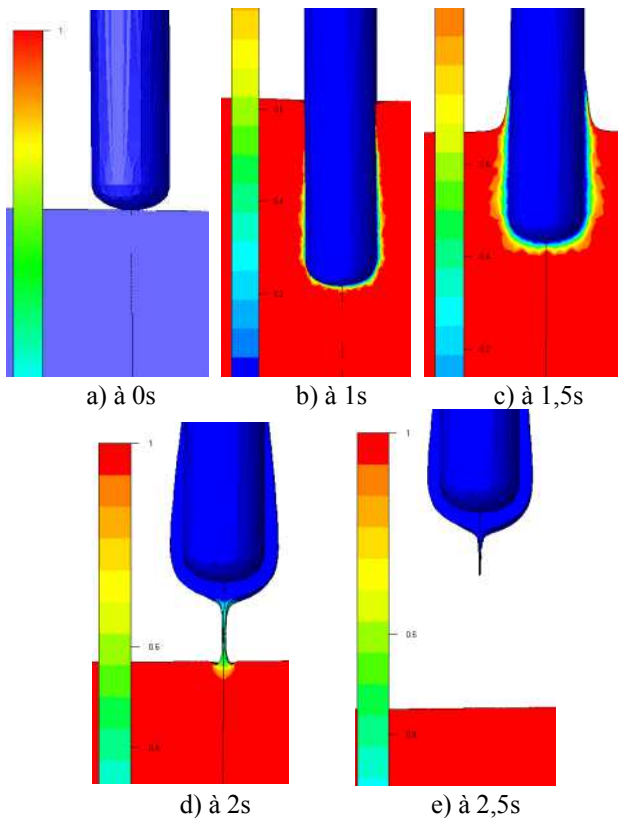


Fig. 2. Iso-couleurs de la fonction caractéristique I_1 dans le bain, pendant le trempage et l'extraction.

Deux remarques peuvent être faites au sujet de la couche extraite. Premièrement, son épaisseur est hétérogène. Deux raisons peuvent expliquer ce fait :

- la pesanteur peut amener du fluage sur la couche de polymère extraite, juste avant sa solidification,

- la température du poinçon a été constamment supposée égale à 20°C , ce qui favorise la croissance de la couche solidifiée.

Deuxièmement, le bas de la couche extraite présente un fil de polymère étiré et solidifié hors du bain (Fig. 2(e)), qui n'est pas observé expérimentalement pour des fluides newtoniens dans les mêmes conditions de vitesse et de température. La forme du fil calculée est liée au fait que la tension interfaciale a été négligée dans cette première simulation. La prise en compte de ce paramètre est nécessaire pour une prédiction correcte de la forme du fil.

4.3 Analyse de la pénétration de chaleur et de l'évolution de l'interface liquide/solide

Les évolutions de la couche solidifiée autour de la tige ont été obtenues quantitativement pour plusieurs tailles de maille, et comparées aux prévisions théoriques. Les résultats présentent une bonne corrélation avec la théorie, si la taille de maille est proche de $0,2\text{ mm}$. Mais, en raison d'une limitation en mémoire d'ordinateur, un maillage plus fin n'a pu être testé. En supposant qu'une telle taille de maille

est suffisante pour décrire correctement l'évolution de la couche solidifiée, les résultats donnés en Figure 3 montrent l'évolution de son épaisseur pour différentes vitesses de trempage du poinçon, en fonction du temps adimensionné (t^* est la durée du trempage du poinçon dans le bain). Les principaux résultats sont :

- un retard au début de la solidification, correspondant au temps où la température du polymère est plus grande que T_f ,

- l'évolution de l'épaisseur de la couche solidifiée, qui dépend fortement de la vitesse du poinçon. Physiquement, plus la vitesse est grande (plus court est le temps de trempage), et moins il y a d'échange de chaleur entre le poinçon froid, le bain et la couche solidifiée. Mais une limitation de ces résultats concerne la température du poinçon, qui reste constante pendant le trempage: le flux de chaleur par conduction est donc constant, ce qui a pour conséquence que la couche calculée est surestimée.

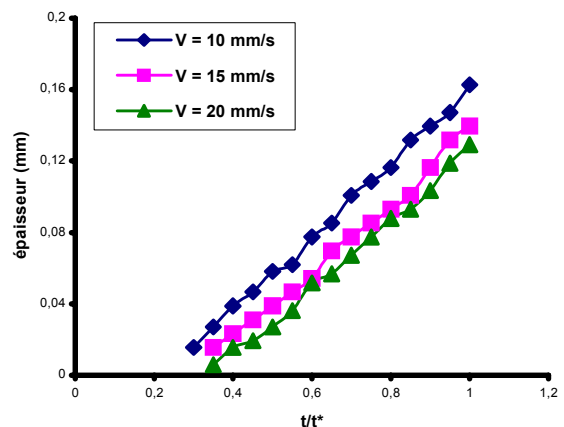


Fig. 3. Epaisseur de la couche solidifiée autour du poinçon en fonction du temps pour différentes vitesses de trempage.

5. Conclusion

Une modélisation 3D du processus de revêtement par trempage à chaud a été étudiée dans cet article, basée sur des considérations thermodynamiques. Une couche extraite est obtenue par deux mécanismes concomitants : le contact collant et le refroidissement du polymère, menant à sa solidification, qui est suivie par l'intermédiaire d'une fonction caractéristique. Par cette technique, l'interface liquide/solide est localisée. En raison d'hypothèses fortes (tension de surface et convection négligée, température de poinçon constante, contact collant), des résultats non physiques sont obtenus (épaisseur quasi-linéaire du polymère enduit, formation d'un fil au cours de l'extraction). Ainsi, le développement du modèle exige de mieux tenir

compte des propriétés physiques du processus de revêtement par trempage.

6. Références

- [1] Mahmoud K.G. Numerical analysis of freeze coating on a two-dimensional moving plate. *Numer. Heat Transfert*, A 25, 279-293 (1994).
- [2] Zhang H., Moallemi M.K. Numerical simulation of hot-dip metallic coating process. *Int. J. Heat Transfer*, 38, 241-257 (1995).
- [3] Tangthieng C., Cheung F.B. Thermosolutal transport and macrosegregation during freeze coating of a binary substance on a continuous moving object. *Int. J. Heat Mass Transfert*, 46, 2313-2327 (2002).