

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE



Université Mohamed KHIDER - Biskra
Faculté des Sciences et de la Technologie
Département de Génie Mécanique

MEMOIRE de MAGISTERE

Spécialité : Génie Mécanique

Option : Eenergétique

Présenté par

Messai Tarek

Thème

Simulation du transfert de chaleur lors du changement de phase Solide-Liquide

Soutenu devant le jury d'examen composé de :

Président : Dr.MOUMMI N.....Université Mohamed Khider-Biskra

Rapporteur : Dr.HCINI M.....Université Mohamed Khider-Biskra

Examineurs :Dr.MOUMMI A.....Université Mohamed Khider-Biskra

Dr.BENCHABANE A.....Université Mohamed Khider-Biskra

Le changement de phase solide-liquide d'un matériau pur est caractérisé par la transformation, à température constante d'une phase liquide en une phase solide ou inversement. Cette réaction réversible s'accompagne d'une consommation (fusion) ou d'une restitution (solidification) d'énergie : l'enthalpie massique de fusion (ou la chaleur latente de fusion).

Le but de ce travail est de faire le point sur les connaissances acquises sur le transfert de chaleur avec changement de phase dans un matériau à une seule phase où les deux phases liquide et solide sont en présence.

Depuis le travail précurseur de Stefan en 1891 sur l'épaisseur de la clotte polaire, les problèmes de transfert de chaleur avec changement de phase solide-liquide portent le nom de ce physicien. Ces problèmes ont une importance considérable dans de nombreuses applications techniques et processus naturels : on peut citer l'évolution des banquises, la congélation des aliments, la bio-cryogénie, le moulage, la coulée continue, la croissance cristalline, la sécurité des réacteurs nucléaires, le contrôle thermique des engins spatiaux, le stockage thermique, etc. cette grande variété de champs d'application explique l'élan des recherches poursuivies dans ce domaine depuis de nombreuses années pour mieux connaître la dynamique de ces processus.

Le problème de Stefan ou '*moving boundary problem*' est fortement non-linéaire. Le déplacement de l'interface solide-liquide dépend du taux de transfert de chaleur au sein des phases solide et liquide. En retour, ce taux est dépendant de la position et du déplacement de l'interface. La solution analytique de ce problème n'existe que dans quelques cas particuliers (Carslaw, 1959). Pour des applications pratiques, on a généralement recours à des méthodes numériques. Les méthodes des différences finies (Lazaride, 1970; Bonacina et Comini et Fasans et Primiceris, 1973) et des éléments finis (Comini et al 1974; Rolph III et Bathe, 1982; Hsiao et Chung, 1984) sont parmi les plus utilisées (Furzeland, 1980;Crank, 1981; Crank, 1984).

Le but de ce travail est de développer une méthode numérique permettant de prédire le problème de changement de phase solide-liquide en 1D et 2D. On tient compte du transfert de chaleur par conduction en résolvant l'équation d'énergie. Les résultats obtenus sont simulés et discutés.

Ce travail vise d'une part à modéliser et simuler le comportement de changement de phase et d'autre part, à approcher les mécanismes d'échange thermique à l'interface. Par ailleurs, cette étude traitera la solidification et la fusion du matériau de changement de phase (MCP).

Deux approches différentes seront utilisées pour modéliser le changement de phase liquide-solide, ces deux phénomènes sont étroitement liés ; en effet, le dégagement de chaleur latente réchauffe la paroi du MCP,

Dans un premier chapitre, nous introduirons les notions de changement de phase solide-liquide, et leurs applications.

Au cours du deuxième chapitre, nous étudierons la caractérisation du problème de changement de phase solide liquide.

Dans une deuxième étape du travail, nous nous intéresserons plus amplement aux changements de phase. Ainsi présenterons-nous, au chapitre 3, nous introduirons la modélisation des changements de phase solide-liquide en présentant la formulation du problème de Stefan et sa solution analytique en 1D seulement avec la condition de Dirichlet.

Au chapitre 4, nous développerons une modélisation numérique de problème de changement de phase en 1D avec la condition de Neumann.

Dans un cinquième chapitre, nous réaliserons une modélisation bidimensionnelle de la fusion, fondée sur la méthode enthalpique. Nous verrons que cette modélisation s'affranchit de plusieurs hypothèses adoptées. Nous pourrions alors obtenir plus d'informations sur la forme de l'interface solide-liquide, et sur la distribution de la température.

Finalement en écrivent une conclusion générale de notre travail.

1.1 Généralités :

Le changement de phase liquide-solide d'un corps pur ou allié donne lieu à l'apparition d'une zone de transition entre les deux phases. Cette zone est à l'échelle microscopique une interface de discontinuité. Mais elle peut atteindre une complexité géométrique telle qu'elle apparaît à l'échelle macroscopique comme une zone de transition diffuse et continue (par exemple la zone pâteuse en solidification).

Soit par exemple deux phases solide P_s et liquide P_l d'un même corps, séparées par frontière Γ (fig. 1.1). A l'échelle microscopique, la frontière Γ correspond à une discontinuité des propriétés physique traduisant une discontinuité des structures moléculaires. Par exemple, la *solidification* (ou *fusion*) correspond au passage d'un état désordonné de molécules en mouvement dans le liquide à un état plus ou moins ordonné d'atomes fixes dans un réseau cristallin (ou réciproquement). Pour approfondir le sujet, le lecteur pourra se référer par exemple aux ouvrages de base de Kurz et Fischer [1] ou de Flemings [2]

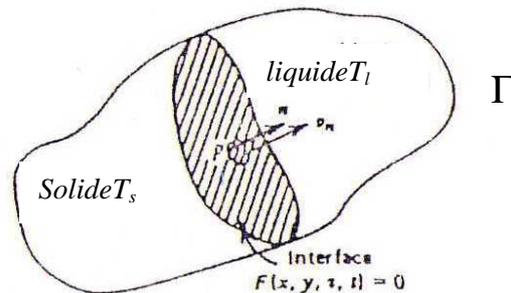


Fig.1.1 Interface de changement de phase.

On appelle *fusion* le passage de l'état solide à l'état liquide et *solidification*, le passage de l'état liquide à l'état solide. Le changement d'état se traduit par deux principales caractéristiques :

- L'interface est à une température déterminée par les relations locales d'équilibre thermodynamique ;
- Le changement d'état donne lieu en solidification à un dégagement de chaleur (une absorption de chaleur en fusion) proportionnel à la vitesse de changement de phase et localisé à l'interface.

Les relations d'équilibre à l'interface sont différentes selon que le matériau est un corps pur ou un alliage. Nous allons considérer les deux cas dans les paragraphes qui suivent.

Selon la composition du matériau et la vitesse de solidification, le phénomène de solidification se présente sous plusieurs formes :

- *Solidification sous la forme d'un front lisse* à une échelle macroscopique; on passe brutalement du liquide au solide lors de la traversée du front de solidification ;
- *Solidification dendritiques ou colonnaire* pour laquelle existe une échelle macroscopique de transition, la zone pâteuse, entre la région complètement liquide et celle complètement solide ; cette zone est caractérisée par la donnée de la fraction solide f_s , fonction du point qui quantifie le pourcentage volumique de solide dans un volume élémentaire représentatif, le V.E.R.
- *Solidification équiaxe* qui traduit par la germination de petits grains solides et leur croissance (les cristallites) au sein de la phase liquide.

Ces divers phénomènes conduisent à une diversité d'approche, nous traiterons le cas de *Solidification sous la forme d'un front lisse*.

1.2 Cas du corps pur :

Dans le cas d'un corps pur, la température T_f de l'interface de changement de phase est une constante physique. Elle peut admettre de faibles variations selon l'importance de la courbure de l'interface et de la tension interfaciale, soit :

$$T_f = T_{f0} - \gamma\kappa \quad (1.1)$$

γ et κ désignant la tension interfaciale et la courbure locale de l'interface.

La correction de température dans (1.1) n'est significative que pour des rayons de courbure de l'ordre du micromètre. La plage de variation de la température T_f représente l'intervalle de solidification. Il est de l'ordre du degré Kelvin au plus.

Néanmoins, l'existence d'un intervalle de solidification est responsable de la formulation de dendrites lorsque la vitesse de solidification est grande. La longueur typique de ces structures dendritique est de l'ordre d'une centaine de micromètres. Dans ce cas, la solidification est dite *colonnaire*. Dans le cas du front lisse, c'est-à-dire non dendritique, la fraction solide varie brutalement de $f_s = 0$ dans la partie liquide à $f_s = 1$ dans la zone solide, ce qu'illustre la figure 2

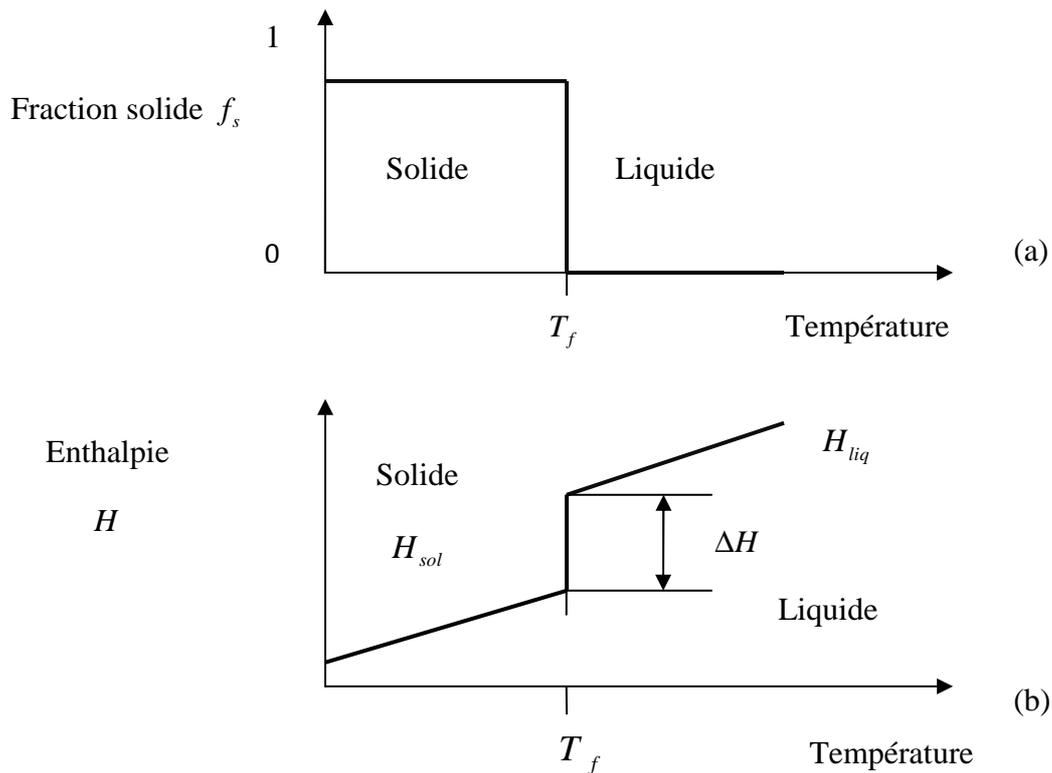


Fig.1.2 Evolutions de la fraction solide f_s (a) et de l'enthalpie H (b) lors de traversée du front de solidification dans le cas où il n'y a pas d'intervalle de solidification.

Pour décrire le phénomène, il est commode d'utiliser l'enthalpie massique du matériau

H (J/kg), qui est une fonction (en général linéaire) de la température T , soit :

- pour le solide : $H_s = c_{ps}T_s + H_{s0}$ (1.2)

- pour le liquide : $H_l = c_{pl}T_l + H_{l0}$ (1.3)

T_s, T_l, c_{ps} et c_{pl} désignant les températures et les chaleurs spécifiques du solide et du liquide respectivement, tandis que H_{s0} et H_{l0} sont des constantes . Le changement de phase se traduit

par une variation brutale de l'enthalpie H pour la température T_f , donnée par la relation :

$$\Delta H(T_f) \equiv H_l(T_f) - H_s(T_f) = (c_{pl} - c_{ps})T_f + (H_{l0} - H_{s0}) \quad (1.4)$$

Il représente la *chaleur latente de changement de phase*. L'évolution de l'enthalpie en fonction de la température est illustrée dans la figure 1.2.

1.3 Cas des alliages :

Si le corps contient des impuretés ou d'autre élément en solution (alliages pour les solides, solutions pour les liquides), la solidification est un changement de phase beaucoup plus complexe. Considérons un mélange binaire constitué par un soluté B , de concentration nominale C_{bain} , dans la matrice A : les équilibres de phase sont représentés par le diagramme de phase de la figure 1.3.

A une température donnée inférieure à la température de solidification de la matrice A , soit T_{bain} , il peut exister toute une gamme d'états d'équilibre tels que la concentration du bain soit comprise entre C_s et C_L , comme le montre la figure 1.3. Réciproquement, si l'on admet que la concentration du matériau reste constante et égale à C_{bain} au cours de la solidification, le changement de phase se produit dans un intervalle de température, $T_L - T_S$ appelé *intervalle de solidification*. Les grandeurs T_L et T_S sont appelées respectivement *températures de liquidus et de solidus*. Géométriquement, il existe une zone de transition, *la zone pâteuse*, dont la température est comprise entre T_L et T_S et qui constituée par une matrice solide poreuse contenant du liquide occupant les interstices comme l'illustre la figure 1.4. La taille des interstices est de l'ordre d'une dizaine de micromètres. Elle correspond à la dimension des branches secondaires des dendrites, qui se développent en avant de la zone pâteuse. Le pourcentage en volume de solide, la fraction solide f_s , croît au cours de la solidification. Le dégagement de chaleur est réparti dans la zone pâteuse. L'intervalle de solidification peut être important selon la concentration de l'espèce en solution.

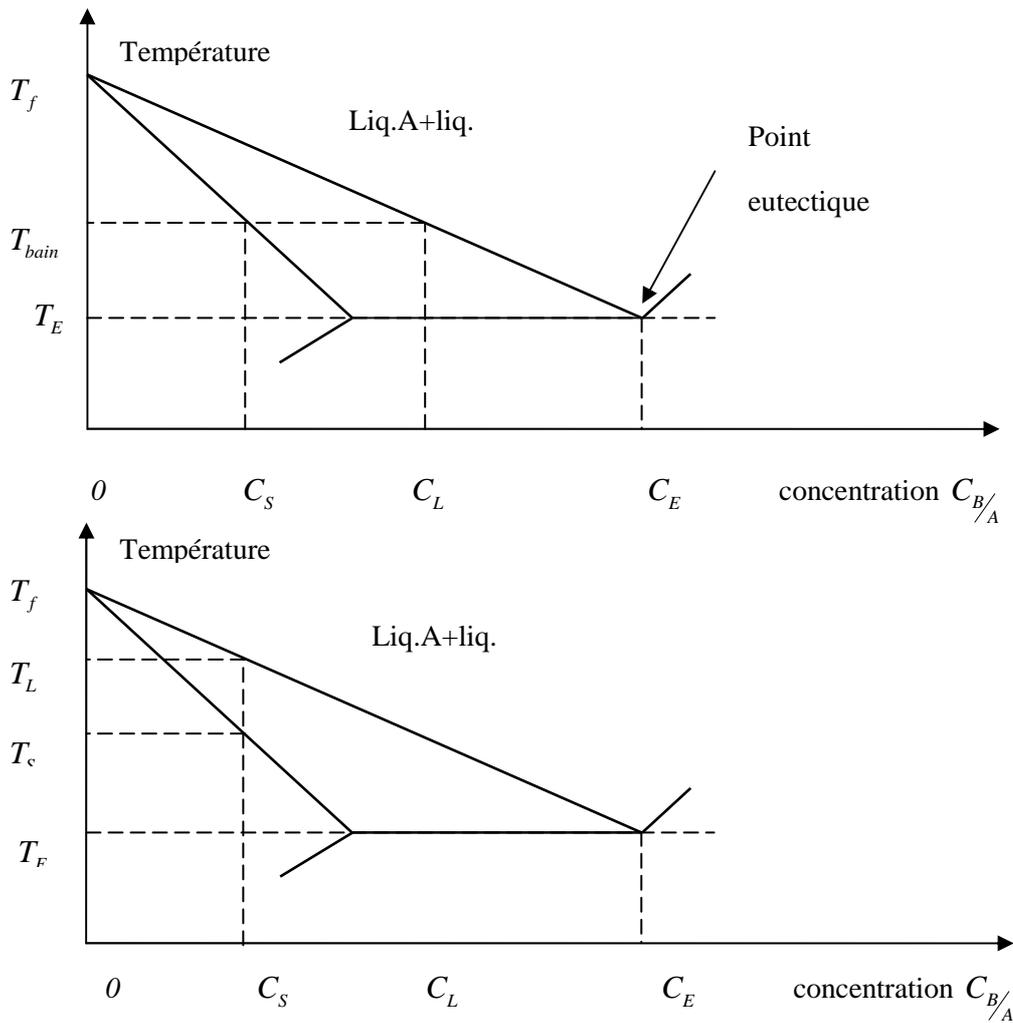


Fig. 1.3 Diagramme de phase d'un mélange binaire hypo-eutectique

D'un point de vue macroscopique, le problème peut être traité grâce à l'utilisation de variables moyenne macroscopiques telles que les fractions liquide ou solide et l'enthalpie du mélange liquide+solide définie comme suit :

$$\bar{\rho}H = \rho_s f_s H_s + \rho_l f_l H_l \quad (1.5)$$

$$\text{Avec } f_s + f_l = 1 \quad (1.6)$$

$$\text{et } \bar{\rho} = \rho_s f_s + \rho_l f_l \quad (1.7)$$

Où $\bar{\rho}$, f_s et f_l désignent respectivement la masse volumique du mélange, les fractions solide et liquide à l'échelle macroscopique. On vérifie que, lorsque $f_s = 1$ (ou bien $f_l = 1$), l'enthalpie H redevient égale à celle du solide (ou bien du liquide) exprimée en (1.4).

La variation de l'enthalpie en fonction de la température est illustrée sur la figure 1.4. La différence $T_L - T_{\text{bain}}$ est appelée *surfusion*.

Une autre conséquence importante du diagramme de phase est l'existence possible de zones liquides dont la température est inférieure à T_L . Dans ces zones, il peut y avoir formation de grains solides (les cristallites) par germination de sites. Il y a alors phénomène de nucléation. Celui-ci croît exponentiellement avec la surfusion mais dépend aussi des tensions interfaciales liquide-solide. Ces grains en suspension dans le liquide peuvent refondre ou au contraire croître. Dans ce dernier cas, la solidification se traduit par l'apparition et la croissance de grains dans le liquide : c'est la solidification dite *équiaxe* (par opposition à la solidification colonnaire).

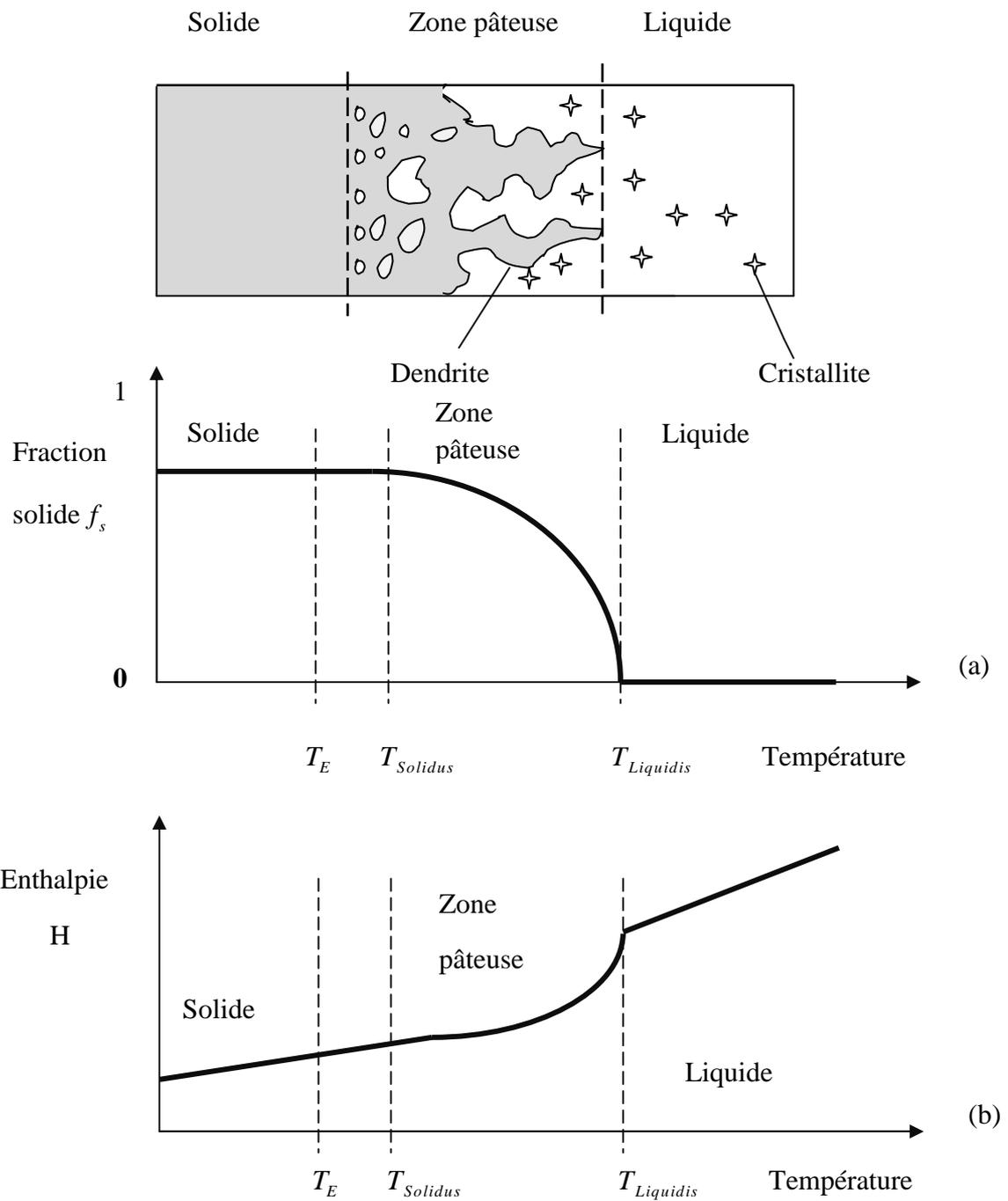


Fig. 1.4. Evolution de la fraction solide f_s (a) et de l'enthalpie H (b) lors de la traversée du front de solidification pour un alliage ; T_E désigne la température eutectique.

1.4 Quelques applications de changement de phase solide-liquide :

1.4.1 Stockage thermique par enthalpie de changement de phase

Le stockage thermique par enthalpie de fusion a suscité de nombreuses études de recherche et développement à la fin des années 1970 à cause de la crise pétrolière et de l'engouement pour l'énergie solaire.

1.4.2 Matériaux d'interface

Ces matériaux sont utilisés en électronique pour réduire la résistance thermique de contact aux interfaces puces/diffuser d'extraction de la chaleur. Constitués par le matériau fusible seul ou couvrant les deux faces d'un film support isolant, les matériaux d'interface à changement de phase se présentent sous la forme de timbres ou de rubans extrêmement fins afin de minimiser leur résistance thermique interne propre. La variation volumique au changement d'état permet l'évacuation de microbulles d'air et un mouillage parfait des surfaces en contact.

1.4.3 Induction directe en creuset froid :

L'intérêt de cette technologie est de traiter de façon propre des produits divers, jusqu'à des températures très élevées, sous une atmosphère contrôlée et sans le problème de corrosion des creusets de fusion. Développée initialement pour le traitement de déchets radioactifs par vitrification, la fusion par induction directe, ce creuset froid, est appliquée à l'élaboration de matériaux (métaux, verre...) par fusion inductive dans une structure métallique refroidie par l'eau avec une capacité de fusion pouvant atteindre 200 kg/h , figure 1.5.

Le matériau conducteur est placé dans un champ électromagnétique alternatif créé par un inducteur, les courants induits générés dissipent de la puissance par effet Joule : dans le cas du verre un préchauffage l'amène à une température où il devient suffisamment conducteur. Après fusion, au contact de la paroi froide, il se forme une mince couche de verre figé d'une épaisseur de 5 à 10 mm qui sépare le verre fondu de la paroi, d'où le terme auto-creuset, cet auto-creuset garantissant l'absence de corrosion d'un creuset classique ou de la pollution du verre.

Le procédé s'applique au traitement des métaux contaminés en vue de leur confinement sous la forme d'un lingot massif. Un laitier est en général ajouté aux déchets lors de la fusion pour

isoler thermiquement et électriquement le creuset du bain fondu, figure 1.6. Dans le domaine non nucléaire, ce procédé s'applique aux traitements de métaux purs ou réactif (titane, zirconium...).

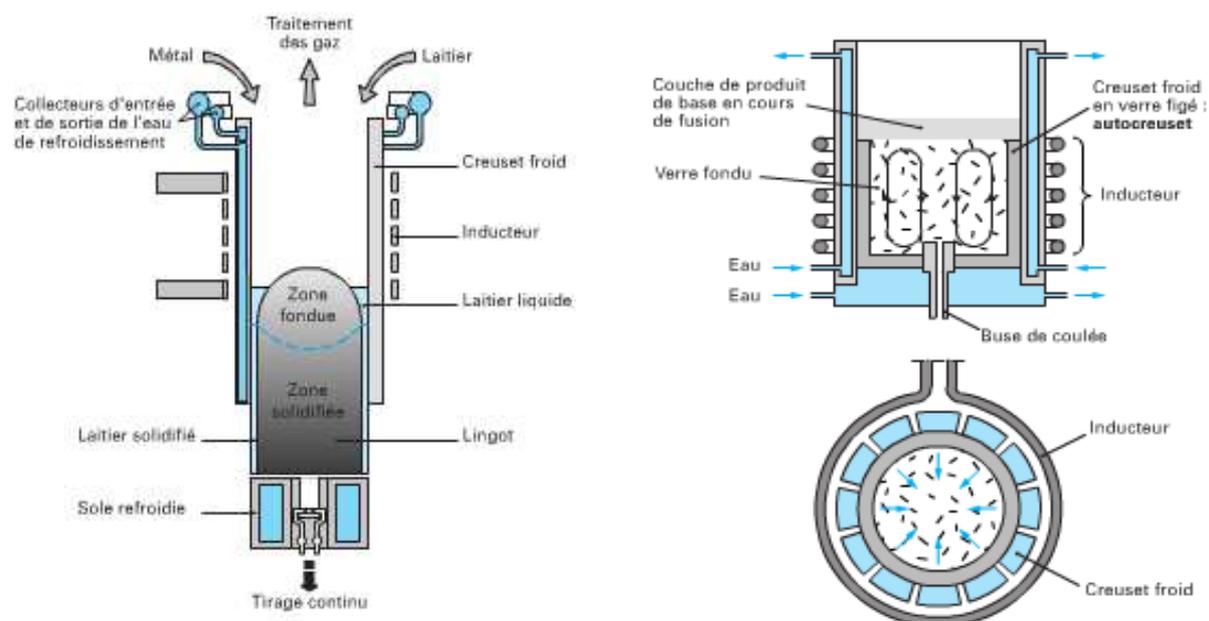


Figure 1.5 fusion en creuset froid avec tirage continu Figure 1.6 principe de la fusion directe en creuset froid [4]

1.4.4 Dépôt métallique :

Le refroidissement de la solidification de particules liquides après impact sur une paroi se retrouvent dans des domaines aussi variés que le givrage, la projection de peinture, les imprimantes à jet d'encre, dans le procédé d'élaboration de revêtement poreux par projection de plasma et, plus récemment, en métallurgie pour l'élaboration de petits objets de grandes précision à partir d'une pulvérisation : la solidification rapide des gouttelettes permettant d'obtenir une structure à grains fins et de réduire le phénomène de ségrégation dans les alliages.

1.4.5 Fusion du cœur d'un réacteur

Dans le scénario catastrophe de la fusion du cœur d'un réacteur nucléaire, le mélange en fusion du combustible et des gaines traverse la cuve et se répand à l'extérieur pour former avec le béton des structures un magma appelé corium. Ce scénario fait l'objet de développement de logiciels de simulation et d'essais de validation dans divers pays. L'objectif

de ces logiciels, qui font intervenir la thermodynamique et la physico-chimie des constituants du corium, est de modéliser l'étalement transitoire d'un corium à une température de l'ordre de 2000 °C pour décrire son écoulement vers des zones où il peut être confiné et maîtrisé en le refroidissant avec de l'eau, et de répondre à diverses questions concernant l'empilement des coulées successives.

1.4.6 Congélation en milieu dispersé :

La congélation dans les milieux dispersés concerne les sols et les roches, la conservation d'aliments à l'état surgelé, la cryochirurgie et la conservation des tissus et des liquides biologiques. Les modèles actuels de congélation des sols permettent de traiter convenablement les cas spécifiques de génie civil (réseau routiers, construction sur les sols gelés, pipelines...).

Dans le cas de la congélation des tissus biologiques, de nombreux mécanismes sont encore mal identifiés, en particulier : le transport de l'eau entre les cellules non gelées et les espaces extracellulaire partiellement solidifiés, et la dégradation des cellules soit par la solidification de l'eau dans la cellule pour les vitesses de refroidissement rapides, soit par déshydratation des cellules aux faibles vitesses de refroidissement. Avec la congélation des aliments, la difficulté provient essentiellement de la méconnaissance ou de l'estimation imprécise des propriétés physiques des aliments.

2.1 Introduction

La classe de problèmes de transfert de chaleur qui sera considérée est celle des problèmes de changement de phase, plus particulièrement les changements de phase liquide-solide (solidification) et solide-liquide (fusion). On ne considérera que les substances pures et on supposera également qu'il n'y a pas de rayonnement thermique, ni de génération d'énergie interne (effet joule), ni de convection.

Lors de la solidification ou la fusion, la substance est présentée dans les phases liquide et solide et son comportement dans chacune des phases est différent. D'une phase à l'autre, il y a un changement brusque des caractéristiques physiques de la substance. De plus, pour des problèmes plus généraux, les modes de transmission de la chaleur sont différents, la chaleur étant transmise non seulement par conduction, mais également, par convection dans la phase liquide. Pour bien étudier la transmission de la chaleur lorsqu'une substance est présente dans les phases liquide et solide, il est essentiel de bien connaître la position de la frontière séparant les deux phases, aussi appelée **interface diphasique**.

Lorsque la substance est pure, la température de fusion T_f est généralement connue et est égale à la température de solidification. Cette condition est exprimée par:

$$T_s(X(x,t)) = T_f = T_l(X(x,t)) \quad (2.1)$$

Où $X(x,t)$ est un paramétrage espace-temps (x, y, z, t) de l'interface diphasique. Les fonctions T_s et T_l désignent la température du solide et du liquide respectivement.

Cependant, pour certaines substances, telles les alliages et les roches, la fusion et la solidification ne surviennent pas à une température donnée mais plutôt sur un intervalle

$[T_1, T_2]$; ces cas ne seront pas étudiés.

Dans un procédé de solidification ou de fusion, la température évolue dans chacune des phases et les interfaces diphasiques se déplacent. On parle ici de plusieurs interfaces diphasiques, car on peut imaginer qu'il y ait plusieurs fronts de solidification et/ou de fusion. Par la suite, *on ne fera référence qu'à la présence d'un seul front, bien que plusieurs fronts puissent être présents*. On ne peut pas suivre le déplacement de l'interface diphasique en ne considérant que l'évolution de la température pour certains points du domaine, la transmission de la chaleur étant dépendante du déplacement de l'interface et inversement.

2.2 Modèle mathématique

L'évolution de la température pour une phase donnée doit satisfaire la loi générale de conservation de l'énergie. En un temps donné, considérons un volume de contrôle matériel arbitraire v de bord ∂v . Dans un repère cartésien, la loi générale de conservation de l'énergie pour une seule phase à l'intérieur de v est exprimée par l'équation (On utilise ici la notation d'Einstein pour la sommation, l'expression $u_i dA_j$ correspond à $\sum u_i dA_j$)

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho \left(e + \frac{u^2}{2} \right) dv = - \int_{\partial v} q_i'' dA_i + \int_{\partial v} u_i \sigma_{ij} dA_j + \int_v q''' dv \quad (2.2)$$

Où :

- $\frac{d}{dt} \int_v \rho e dv$ est la variation d'énergie interne par unité de temps ; e est l'énergie interne par unité de masse et ρ la masse volumique ;
- $\frac{d}{dt} \int_v \frac{\rho u^2}{2} dv$ est la variation d'énergie cinétique par unité de temps ; u est la norme du vecteur vitesse ;
- $-\int_{\partial v} q_i'' dA_i$ est la quantité de chaleur traversant le bord de v par unité de surface, incluant la conduction et le rayonnement ;
- $\int_{\partial v} u_i \sigma_{ij} dA_j$ est le travail fait par l'environnement sur le bord de v ; σ_{ij} est le tenseur cartésien des contraintes ;
- $\int_v q''' dv$ représente la génération d'énergie interne

Il est important de remarquer que la valeur du flux est positive lorsque la chaleur passe de l'intérieur du volume de contrôle à l'extérieur de celui-ci.

Nous émettons ensuite les hypothèses suivantes :

- il n'y a pas de génération d'énergie interne ;
- il n'y a pas de rayonnement thermique ;
- on néglige la convection et les tensions de surface ;
- il n'y a pas de variation d'énergie cinétique ;

- pour des fluides incompressibles, $\rho e = c_p \rho T$ où c_p est la **chaleur massique à pression constante**, T la température ;
- les propriétés c_p et ρ sont constantes ;
- la substance doit être homogène et la conduction isotropique ;
- la conduction thermique suit la loi de Fourier soit $q_i = -k \frac{\partial T}{\partial x_i}$, où k est la

conductivité thermique.

En appliquant le théorème de transport au terme

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho c_p T dv$$

On a:

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho c_p T dv = \int_v \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} dv + \int_{\partial v} \rho c_p T u_i dA_j \quad (u_i = 0)$$

En appliquant ensuite le théorème de divergence au terme

$$\int_{\partial v} -k \frac{\partial T}{\partial x_i} dA_j$$

L'équation (2.2) peut alors être exprimée à l'aide d'une intégrale de volume seulement.

Pour une phase donnée, on obtient l'équation

$$\int_v \left(\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \right) dv = 0 \quad (2.3)$$

Cette équation est valide en tout temps t , l'intégration en temps de celle-ci nous donne l'équation :

$$\int_{t_0}^{t_1} \left\{ \int_v \left(\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \right) dv \right\} dt = 0 \quad (2.4)$$

En notant par V un volume de contrôle espace-temps, on a l'équation

$$\int_V \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) dV = 0 \quad (2.5)$$

Elle représente la conservation d'énergie pour un volume de contrôle matériel arbitraire espace-temps lorsque *le seul mode de transfert de chaleur considéré est la conduction*.

Lorsque l'on voudra préciser la phase, l'indice l (liquide) ou s (solide) sera ajouté.

Pour les problèmes de fusion ou de solidification, on doit considérer la différence **d'énergie (ou chaleur) latente** entre les phases, cette différence étant notée par la lettre L . Dans ce cas, il est préférable d'écrire (2.5) en fonction de l'enthalpie qui sera notée avec la lettre H . La fonction d'enthalpie H est définie par :

$$H(T) = \int_{T_{ref}}^T c_p(T) \rho(T) dT \quad (2.6)$$

Où T_{ref} est une valeur de référence arbitraire. Pour des problèmes de solidification et de fusion, H est définie par :

$$H(T) = \begin{cases} \int_{T_{ref}}^T \rho_s(T) c_{ps}(T) dT & T \leq T_f \\ \int_{T_{ref}}^T \rho_s(T) c_{ps}(T) dT + \rho_l(T) c_{pl}(T) dT + \rho_l L & T \geq T_f \end{cases} \quad (2.7)$$

Les paramètres c_{ps} et c_{pl} représentent la chaleur massique pour les phases liquide et solide, ρ_l et ρ_s désignent la masse volumique pour les phases liquide et solide. Lorsque c_{ps} , c_{pl} , ρ_l et ρ_s sont constants pour une phase donnée et que 0 K est choisi comme température de référence, cette fonction peut être réduite à :

$$H(T) = \begin{cases} \rho_s c_{ps} T & T \leq T_f \\ \rho_l c_{pl} (T - T_f) + \rho_s c_{ps} T_f + \rho_l L & T \geq T_f \end{cases} \quad (2.8)$$

La fonction H peut alors être représentée par une fonction du même type que celle de la figure 2.1.

Lorsque l'on introduit la définition de l'enthalpie dans l'équation (2.5), elle se résume alors à:

$$\int_V \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) dV = 0 \quad (2.9)$$

La conductivité k n'étant pas nécessairement la même pour les deux phases.

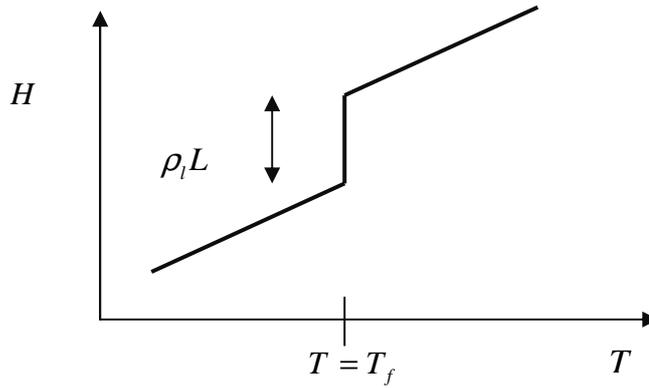


Figure 2.1: Graphique de l'enthalpie en fonction de la température

Il est important de préciser que lorsque la densité n'est pas la même dans les phases liquide et solide, il faut ajouter l'équation de continuité (conservation de la masse) à l'équation (2.9).

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dv = 0 \quad (2.10)$$

Pour tous les problèmes abordés dans ce mémoire, la densité du liquide sera égale à la densité du solide et il ne sera donc pas nécessaire de considérer l'équation de continuité (ce travail porte principalement sur la résolution numérique de l'équation aux dérivées partielles considérée et non pas sur la modélisation physique des problèmes de changement de phase).

Comme le volume matériel espace-temps V est arbitraire, la quantité intégrée dans le membre de gauche de (2.9) doit être zéro, la conservation de l'énergie est alors exprimée par l'équation différentielle

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (2.11)$$

À l'interface cette équation différentielle ne peut être utilisée, car la fonction H est discontinue. Lorsque la densité du liquide égale la densité du solide, l'équation différentielle

$$k_l \frac{\partial T_l(X)}{\partial n} - k_s \frac{\partial T_s(X)}{\partial n} = -\rho L v_n \quad (\rho = \rho_s = \rho_l) \quad (2.12)$$

Établit le bilan énergétique à l'interface. Cette équation est souvent appelée **condition de Stefan**.

Est déclarée comme :

Taux de chaleur enlevé de la phase solide - *Taux de chaleur fourni à l'interface de la phase liquide* = *Taux de chaleur libéré à l'interface pendant la solidification*

La dérivée $\frac{\partial}{\partial n}$ est prise dans la direction normale on à l'interface et v_n la vitesse normale de cette interface en un temps donné au point P .

2.2.1 Méthode enthalpique :

Le principe consiste à utiliser, pour les deux phases une variable unique, l'enthalpie H , comme inconnue dans l'équation de la chaleur selon la formulation (2.11). la température est en suite déduite de l'enthalpie par une relation $T(H)$ du type (2.8).

Cette méthode est pratique car elle évite de déterminer la position du front de solidification, ce qui peut avoir un intérêt dans le cas d'une interface diffuse avec zone pâteuse (solidification d'alliage par exemple) ou lors de la résolution numérique de cas géométriquement complexes.

2.3 Variables adimensionnées

En 3D, dans le système de coordonnées cartésiennes (x, y, z) , les équations (2.11) et (2.12) sont données par

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(-k \frac{\partial T}{\partial z} \right) = 0 \quad (2.13)$$

$$\text{Et } k_l \frac{\partial T_l(X)}{\partial n} - k_s \frac{\partial T_s(X)}{\partial n} = -\rho L v_n \quad (2.14)$$

Effectuons le changement de variable suivant :

$$\theta(\tilde{x}, \tau) = \frac{T(x, t) - T_f}{T_f - T_{ref}}$$

$$\tilde{x} = \frac{x}{b_{ref}}; \tilde{y} = \frac{y}{b_{ref}}; \tilde{z} = \frac{z}{b_{ref}};$$

$$\tilde{X}(\tau) = \frac{1}{b_{ref}} X(t); \quad \tau = \frac{(k_s / \rho_s c_{ps}) t}{b_{ref}^2};$$

$$Ste = \frac{c_{ps}(T_f - T_{ref})}{L};$$

$$\tilde{H} = \frac{(H / \rho_s c_{ps}) - T_f}{T_f - T_{ref}};$$

- La constante b_{ref} est une longueur caractéristique qui est souvent le diamètre du domaine de calcul.
- T_{ref} est une température de référence. Pour un problème de solidification (ou de fusion) sur un demi-espace en 1D, cette température est la même que celle imposée sur la frontière gauche.
- La variable adimensionnée τ est le **nombre de Fourier** (notée également F_o), qui caractérise le rapport entre le taux de transfert de chaleur par conduction et l'emmagasinement d'énergie thermique dans le solide.

Les équations (2.11) et (2.12) s'écrivent alors:

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tau} - \frac{k}{k_s} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tilde{y}^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tilde{z}^2} \right) = 0 \quad (2.15)$$

$$\text{et } \frac{k_l}{k_s} \frac{\partial \theta_l}{\partial n} - \frac{\partial \theta_s}{\partial n} = -\frac{1}{Ste} \tilde{v}_n \quad (2.16)$$

$$\tilde{H} = \begin{cases} \theta & \theta \leq 0 \\ \frac{\rho_l c_{pl}}{\rho_s c_{ps}} \theta + \frac{\rho_l}{\rho_s} \frac{1}{Ste} & \theta \geq 0 \end{cases} \quad (2.17)$$

$\frac{\partial}{\partial n}$ et \tilde{v}_n sont respectivement la dérivée à l'interface le long du vecteur normal \mathbf{n} et la vitesse de l'interface dans la direction de \mathbf{n} .

Le nombre sans dimension Ste introduit ici est appelé **nombre de Stefan**. Il est associé au processus du changement de phase et qui est défini comme le rapport des enthalpies sensible et de changement de phase mises en jeu. Le tableau 2.1 donne quelques valeurs usuelles du nombre de Stefan pour des matériaux courant :

Matériaux	Température de Fusion (°C)	Nombre de Stefan
Glace.....	0	= 0.0125ΔT
n-Octadécane.....	28	≈ 0.0091ΔT
Etain.....	232	= 0.0038ΔT
Aluminium.....	660	≈ 0.0027ΔT
Chlorure de sodium...	801	= 0.0023ΔT

Tableau 2.1 Quelques valeurs de nombre de Stefan [3]

Pour les problèmes de solidification, il représente l'importance de la **chaleur sensible** ($c_{ps}(T_f - T_{ref})$) du solide comparativement à la chaleur latente (L). Pour des procédés de solidification impliquant des métaux, tels l'aluminium ou le cuivre, le nombre de Stefan est de l'ordre de l'unité et varie entre 1 et 3. Pour un problème de solidification, les propriétés ρ , c_p et k ont été exprimées en fonction des propriétés physiques du solide. Pour un problème de

fusion, on exprime généralement ces propriétés en fonction de celles caractérisant le liquide.

Le nombre de Fourier est alors donné par $\tau = \frac{(k_l / \rho_l c_{pl})t}{b_{ref}^2}$ et le nombre de Stefan par

$$Ste = \frac{c_{pl}(T_{ref} - T_f)}{L}.$$

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, on discute des principaux schémas numériques qui sont utilisés pour la résolution de problèmes de changement de phase. De plus, on présente la solution analytique pour le problème en 1D.

3.2 Méthodes numériques

Comme il n'existe des solutions analytiques à l'équation (2.9) que pour quelques cas en 1D, divers schémas numériques ont été utilisés pour résoudre cette équation. On peut regrouper ces schémas numériques en deux catégories principales [4, 5, 6] :

- les schémas numériques avec maillage fixe ;
- les schémas numériques avec maillage mobile ("front tracking methods").

En ce qui concerne les schémas avec maillage fixe, la position de l'interface ne correspond pas nécessairement à un nœud en 1D ou à un ensemble d'arêtes en 2D. Dans ces schémas, on tient compte de la chaleur latente

- En définissant une variable d'enthalpie totale H (enthalpie volumique [$J.m^{-3}$]) ou une variable d'enthalpie h (enthalpie massique) [$J.kg^{-1}$] pour ensuite déterminer la température à partir de celle-ci,
- ou bien en remplaçant le coefficient de chaleur massique constant par un coefficient de chaleur massique qui est en fonction de la température (méthode de capacité thermique) et qui prend une valeur très élevée à la frontière liquide/solide,
- ou bien en introduisant un terme source.

Une description exhaustive de ces schémas numériques est faite par Voller [7]. Le désavantage majeur de ces schémas est la limitation de la précision lorsque l'interface est présente sous la forme d'une discontinuité [8,9] Ces schémas numériques peuvent cependant être facilement utilisés lorsque le changement de phase se produit sur un intervalle de température (**région pâteuse**) plutôt qu'à une température donnée. Les schémas avec maillage fixe ont été utilisés efficacement pour des problèmes 1D, 2D et 3D incluant la convection, la gestion de régions pâteuses et l'évolution de micro-structures.

Dans les schémas avec maillage mobile, la position de l'interface doit toujours correspondre à un nœud ou à des arêtes du maillage. Pour obtenir ce résultat, on utilise :

1. des coordonnées curvilignes,
2. l'adaptation du maillage (le remaillage à chacun des pas de temps),
3. ou le déplacement automatique du maillage.

Lacroix et Garon [10] ont utilisé un changement de coordonnées qui immobilise la position de l'interface dans l'espace des nouvelles variables. Ils ont pu ainsi résoudre des problèmes de changement de phase où la convection est le mode dominant de transfert de chaleur.

Pour des problèmes de solidification, Ghosh et Moorthy [11] ont utilisé un maillage fixe dans le liquide et un maillage se déplaçant dans une direction imposée dans le solide. Afin d'éviter de remailler lors de l'introduction de nouveaux nœuds dans le domaine du solide, ils ont utilisé un pseudo-domaine comme banque de nœuds. Ces nœuds pénètrent au besoin dans le domaine du solide sans avoir à changer la connectivité.

Les auteurs se sont limités à des problèmes où la température initiale du liquide est la température de solidification (**problèmes à une phase**). Ils n'ont donc pas eu à discrétiser la phase liquide.

Yoo et Rubinsky [12] ont utilisé une méthode de remaillage automatique à la fin de chacun des pas de temps. Pour chacun des pas de temps, la position de tous les nœuds est fixe. Lorsque le champ de température est connu sur tout le domaine, la position des nœuds de l'interface est calculée pour satisfaire la **condition de Stefan** (équation (2.12)). Tout le domaine est ensuite remaillé en fonction du déplacement de l'interface.

Lynch, O'Neill et Albert [13,14] ont beaucoup contribué à l'analyse par éléments finis déformables des problèmes de frontière libre. Dans l'article de Lynch et O'Neill [15], qui traite de problèmes de changement de phase en 1D, les auteurs ont introduit un maillage pouvant se déformer au cours d'un pas de temps en fonction du déplacement de l'interface. Le déplacement de celle-ci est traité comme une variable inconnue. Dans deux articles portant sur des problèmes 2D, Albert et O'Neill [13] ont utilisé une technique de génération de coordonnées curvilignes appelée "transfinite mapping". Cette technique permet de modifier le maillage en fonction des frontières des sous-domaines discrétisés, un sous-domaine par phase.

Le problème de changement de phase est alors traité comme un problème de frontière libre délimitant les sous-domaines solide et liquide. En ce qui concerne le déplacement des nœuds formant l'interface, la variable qui détermine ce déplacement est la vitesse des nœuds dans des directions imposées.

Bonnerot et Jamet [4] ont probablement été les premiers à utiliser une méthode d'éléments finis permettant le déplacement des nœuds d'un maillage espace-temps (2D en espace). Ils considèrent l'interface comme une ligne polygonale dont les segments correspondent aux arêtes de leur maillage. À chacun des pas de temps, les nœuds se déplacent en fonction d'une vitesse locale et dans des directions imposées. Leur formulation espace-temps permet le déplacement de tous les nœuds du maillage à chacun des pas de temps. En ce qui concerne les problèmes résolus dans cet article, les seuls nœuds mobiles sont ceux de l'interface. Les autres nœuds peuvent être déplacés après la résolution du système d'équations en fonction du déplacement de l'interface, ou bien on peut effectuer un remaillage complet périodique à l'extérieur de l'interface. Ils ont abordé des problèmes à une phase et n'ont pas résolu des problèmes où la température est inconnue dans les phases liquide et solide (**problèmes à deux phases**).

Les schémas numériques avec maillage mobile jusqu'à maintenant développés sont habituellement plus complexes à mettre-en-œuvre que ceux avec maillage fixe.

De plus, ils sont mal adaptés aux problèmes où plus d'un front de solidification ou de fusion, ils sont présentée et à ceux où le changement de phase se produit sur un intervalle de température.

Les avantages et les désavantages des schémas numériques qui utilisent une approche avec maillage fixe ou maillage mobile sont discutés dans l'article de Ghosh et Moorthy [11]. Une description de plusieurs de ces schémas numériques est effectuée par Crank [16].

Il paraît essentiel de développer un schéma numérique qui permet d'obtenir la précision des schémas avec maillage fixe.

3.3 Solutions analytiques en 1D, condition de type de Dirichlet

L'existence de solutions analytiques se limite à quelques problèmes simples. Les solutions analytiques pour des problèmes de fusion et de solidification sur un demi-espace de longueur infinie sont ici présentées.

3.3.1. Problème à une seule phase

Considérons un demi-espace de longueur infinie. La température initiale T_f sur tout le demi-espace est constante.

La substance est présente sous forme solide. La température à la frontière gauche (à $x = 0$) est soudainement élevée à une température $T_0 > T_f$.

Le solide commence par conséquent à la fusion. Dans ce cas la température dans le reste de solide est constante $T_s = T_f$, ainsi la distribution de la température doit être calculée seulement dans la phase liquide. On le suppose que le liquide a formé en fusion reste immobiles.

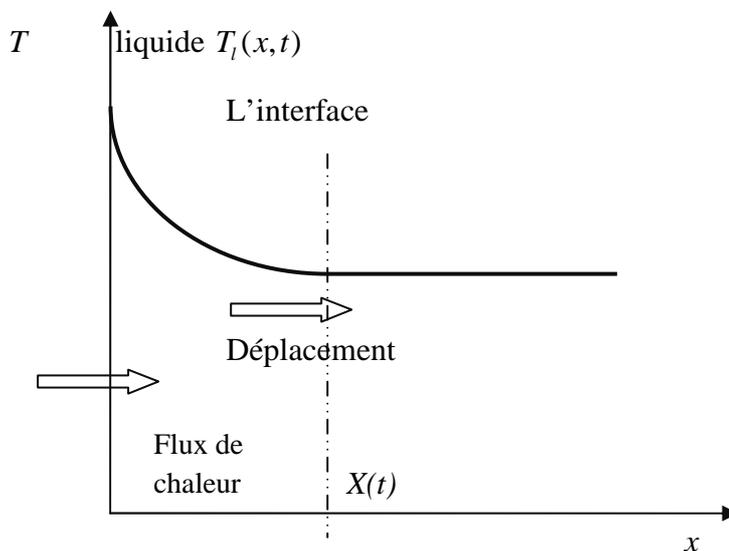


Figure 3.1 : Fusion du solide semi-infini avec la conduction dans la phase liquide seulement

La formulation mathématique pour un problème de fusion est la suivante :

Dans la région liquide :

$$\frac{\partial T_\ell}{\partial t} = \alpha_\ell \frac{\partial^2 T_\ell}{\partial x^2} \quad 0 < x < X(t); \quad (3.1)$$

Condition initial :

$$T_\ell(x,0) = T_f \quad x \geq 0, t = 0; \quad (3.2)$$

Condition au limite :

$$T_0(0,t) = T_0 \quad x = 0, t > 0; \quad (3.3)$$

Conditions à l'interface :

$$T_\ell(X(t),t) = T_f \quad x = X(t), t > 0 \quad (3.4)$$

$$-k_\ell \left(\frac{\partial T_\ell}{\partial x} \right)_{[x(t)]} = \rho L \frac{dX(t)}{dt} \quad x = X(t), t > 0 \quad (3.5)$$

Où $\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$ est la diffusivité thermique.

La solution sous la forme $T_\ell(x,t) = T_0 + A \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \right)$

A l'interface :

$$x = X(t) \quad T_\ell(X(t),t) = T_f \Rightarrow T_f = T_0 + A \operatorname{erfc} \left(\frac{X(t)}{2\sqrt{\alpha t}} \right)$$

On pose $\lambda' = \frac{X(t)}{2\sqrt{\alpha t}}$

Alors $T_f = T_0 + A \operatorname{erfc}(\lambda')$ donc $\lambda' = Cst \Rightarrow A = \frac{T_f - T_0}{\operatorname{erf}(\lambda')}$.

Finalement le profil de température est donné par :

$$T_\ell(x,t) = T_0 - (T_0 - T_f) \frac{\operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \right)}{\operatorname{erf}(\lambda')} \quad (3.6)$$

3.3.1.1 Détermination de λ'

Le bilan sur l'interface : $-k_\ell \left(\frac{\partial T_\ell}{\partial x} \right)_{[x(t)]} = \rho L \frac{dX(t)}{dt}$ et on a déjà

$$T_\ell(x,t) = T_0 - (T_0 - T_f) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_\ell t}}\right)}{\operatorname{erfc}(\lambda')}$$

on dérive et remplace :

$$\lambda' e^{\lambda'^2} \operatorname{erf}(\lambda') = \frac{Ste_\ell}{\sqrt{\pi}} \quad (3.7)$$

λ' en fonction de Ste_ℓ , pour $0 \leq Ste_\ell \leq 5$, est donné sur la figure 3.2

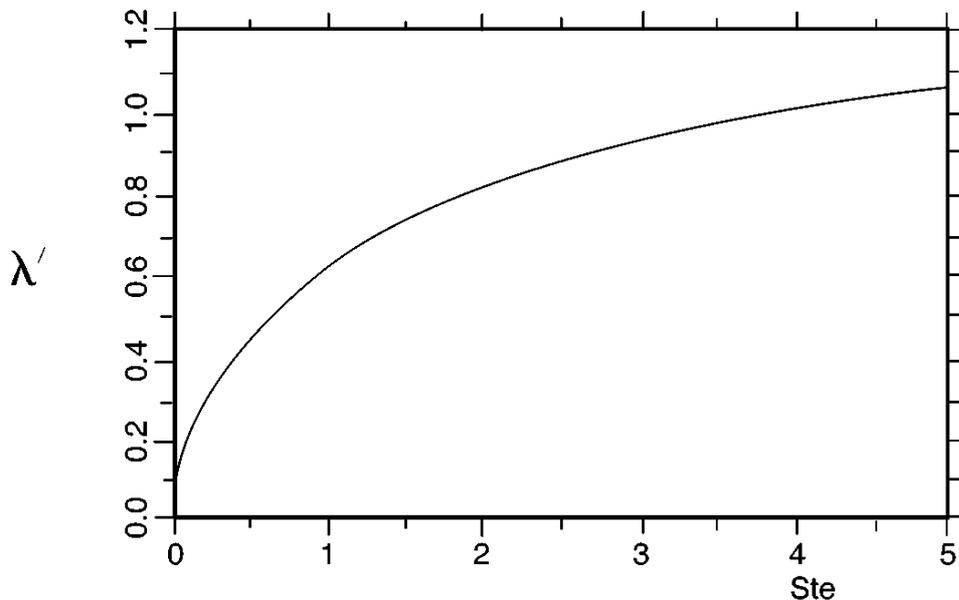


Figure 3.2 La racine λ' de l'équation 3.7

Alors :

- Position de l'interface : $X(t) = 2\lambda' \sqrt{\alpha_\ell t}$ (3.8)

- Temps d'arrivée au point p : $\tau(p) = \frac{p^2}{4\alpha_\ell \lambda'^2}$ (3.9)

- Vitesse de l'interface : $v(t) = \frac{dX(t)}{dt} = \frac{\alpha_\ell \lambda'}{\sqrt{\alpha_\ell t}}$ (3.10)

- Flux de chaleur (W/m^2) au point x , au temps t obtenu à partir de Fourier ($x < S(t)$) :

$$\phi(x,t) = \frac{k_l (T_0 - T_f) e^{-\frac{x^2}{4\alpha_l t}}}{\text{erf}(\lambda') \sqrt{\pi \alpha_l t}} \quad (3.11)$$

- Quantité de chaleur (J/m^3) arrivée point p , entre 0 et le temps τ par intégration :

$$Q(p,t) = \frac{k_l (T_0 - T_m) \left(-\frac{e^{-\lambda'^2} p \sqrt{\lambda'^2}}{\lambda'^2} + 2e^{\frac{-p^2}{4\alpha_l \tau}} \sqrt{\alpha_l \tau} + p \sqrt{\pi} \left(\text{erf}(\lambda') - \text{erf}\left(\frac{p}{2\sqrt{\alpha_l \tau}}\right) \right) \right)}{\text{erf}(\lambda') \alpha_l \sqrt{\pi}} \quad (3.12)$$

3.3.2. Problème à deux phases :

Considérons un demi-espace de longueur infinie. La température initiale T_i sur tout le demi-espace est constant et est différente ou égale de la température de fusion T_f . La substance est présente sous forme liquide (ou solide). La température à la frontière gauche est soudainement abaissée (élevée) à une température $T_0 < T_f$ ($T_0 > T_f$) et il y a solidification (fusion) à partir de la position $x = 0$.

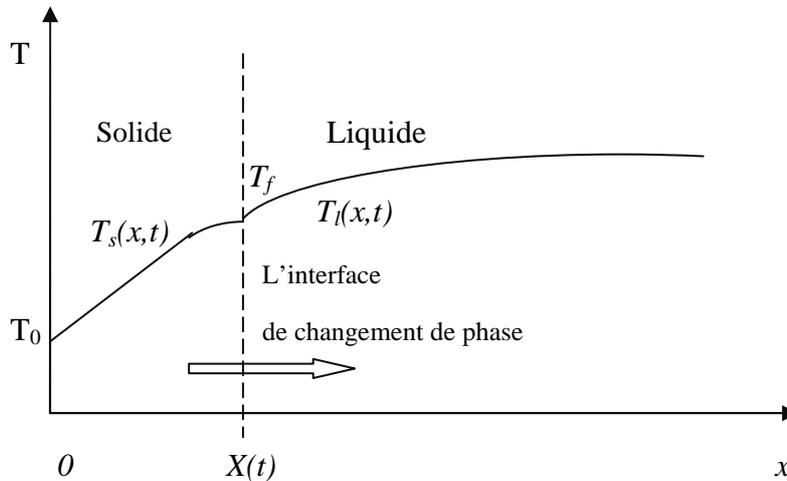


Figure 3.3 Solidifications du demi-espace liquide avec conduction dans les deux phases

La formulation mathématique pour un problème de solidification est la suivante :

Région solide :

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2}, \quad 0 < x < X(t), t > 0 \quad (3.13)$$

Région liquide :

$$\frac{\partial T_\ell}{\partial t} = \alpha_\ell \frac{\partial^2 T_\ell}{\partial x^2}, \quad x > X(t), t > 0 \quad (3.14)$$

Condition initiale :

$$T_\ell(x, 0) = T_i, \quad x \geq 0, t = 0 \quad (3.15)$$

Condition au limite :

$$T_s(0, t) = T_0, \quad x = 0, t > 0 \quad (3.16)$$

Conditions à l'interface :

$$T_\ell[X(t)] = T_s[X(t)] = T_f, \quad x = X(t), t > 0 \quad (3.17)$$

$$k_s \left(\frac{\partial T_s}{\partial x} \right)_{[X(t)]} - k_\ell \left(\frac{\partial T_\ell}{\partial x} \right)_{[X(t)]} = \rho L \frac{dX(t)}{dt}, \quad x = X(t), t > 0 \quad (3.18)$$

Où $\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$ est la **diffusivité thermique**. Le développement de la solution de ce problème est

détaillé dans [17]. Les profils de température sont donnés par :

$$T_s(x, t) = T_0 + A \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}} \right)$$

Qui donne la température du solide et

$$T_\ell(x, t) = T_i + B \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_\ell t}} \right)$$

Qui donne la température du liquide.

La condition (3.17) conduit alors à :

$$T_0 + A \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}} \right) = T_i + B \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_\ell t}} \right) = T_f$$

Cette relation doit être vérifiée pour tout les valeurs de t , on déduit que : $X(t) = \lambda' \sqrt{\alpha_\ell t}$

Où λ' est constante. En tenant compte de cette forme de $X(t)$, l'équation (3.18) permet d'écrire :

$$\frac{k_s A e^{\frac{-\lambda'^2}{4\alpha_s}}}{\sqrt{\pi\alpha_s}} - \frac{k_\ell B e^{\frac{-\lambda'^2}{4\alpha_\ell}}}{\sqrt{\pi\alpha_\ell}} = L \frac{\rho\lambda'}{2} \quad (3.19)$$

Les constantes A et B sont déterminées par les équations

$$A = \frac{T_f - T_0}{\operatorname{erf}\left(\frac{\lambda'}{2\alpha_s}\right)} \quad \text{et} \quad B = \frac{T_f - T_i}{\operatorname{erfc}\left(\frac{\lambda'}{2\alpha_\ell}\right)}$$

Alors les profils de température sont donnés par :

$$T_s(x, t) = T_0 + A \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}}\right) \quad (3.20)$$

Qui donne la température du solide et

$$T_\ell(x, t) = T_i + B \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_\ell t}}\right) \quad (3.21)$$

La position $X(t)$ du front de changement de phase se calcule finalement par :

$$X(t) = \lambda' \sqrt{\alpha_\ell t} \quad (3.22)$$

Pour un problème de solidification, le paramètre λ' est une racine de l'équation :

$$\frac{(T_0 - T_f) k_s e^{\frac{\lambda'^2}{4\alpha_s}}}{(\alpha_s)^{\frac{1}{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{\lambda'}{2\alpha_s^{\frac{1}{2}}}\right)} + \frac{(T_i - T_f) k_\ell e^{\frac{\lambda'^2}{4\alpha_\ell}}}{(\alpha_\ell)^{\frac{1}{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{\lambda'}{2\alpha_\ell^{\frac{1}{2}}}\right)} + \frac{\rho L \sqrt{\pi}}{2} = 0 \quad (3.23)$$

et pour un problème de fusion :

$$\frac{(T_0 - T_f)k_\ell e^{\frac{\lambda'^2}{4\alpha_\ell}}}{(\alpha_\ell)^{\frac{1}{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{\lambda'}{2\alpha_\ell^{\frac{1}{2}}}\right)} + \frac{(T_i - T_f)k_s e^{\frac{\lambda'^2}{4\alpha_s}}}{(\alpha_s)^{\frac{1}{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{\lambda'}{2\alpha_s^{\frac{1}{2}}}\right)} - \frac{\rho L \lambda' \sqrt{\pi}}{2} = 0 \quad (3.24)$$

Ces deux dernières équations peuvent être résolues numériquement avec une méthode de Newton.

3.4 Solution approximative en 1D, condition de Neumann

Considérons un demi-espace de longueur infinie. Initialement la température sur tout le demi-espace est constante et est égale à T_f . Il s'agit d'un problème à une phase et la température du liquide (solide) reste égale à la température de fusion. On impose alors une condition de flux sur la frontière gauche du domaine et il y a solidification (ou fusion) à partir de la position $x = 0$. La formulation mathématique pour un problème de solidification ou de fusion est la suivante :

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} \quad 0 < x < X(t), t > 0 \quad (3.25)$$

$$T(x, 0) = T_f \quad 0 < x < X(t), t > 0 \quad (3.26)$$

$$-k_\ell \left(\frac{\partial T_\ell(0, t)}{\partial x} \right)_{[X(t)]} = q_w'' \quad (q_w'' \text{ est une constante}) \quad (3.27)$$

$$T_\ell(x, t) = T_f \quad x > X(t), t > 0 \quad (3.28)$$

$$T_\ell(X(t), t) = T_f \quad x = X(t), t > 0 \quad (3.29)$$

$$k_\ell \left(\frac{\partial T_\ell}{\partial x} \right)_{[X(t)]} = \rho L \frac{dX(t)}{dt} \quad x = X(t), t > 0 \quad (3.30)$$

Pour ce problème, le profil de température du solide (liquide) est donné par

$$T_s(x, t) \approx T_f + \frac{-q_w'' x}{k_s} - \frac{(q_w'')^2 (x^2 + 2\alpha_s t)}{2k_s \alpha_s L \rho_\ell} + \frac{(q_w'')^4 (x^4 + 12\alpha_s^2 t + 12\alpha_s^2 t^2)}{12k_s \alpha_s^3 L^3 \rho_\ell^3} + \dots \quad (3.31)$$

et la position de l'interface est donnée par

$$X(t) \approx \frac{|q_w| t}{L\rho} - \frac{|q_w|^3 t^2}{2\alpha_s L^3 \rho^3} + \frac{5|q_w|^5 t^3}{6\alpha_s^2 L^5 \rho^5} - \frac{51|q_w|^7 t^4}{24\alpha_s^3 L^7 \rho^7} + \frac{827|q_w|^9 t^5}{120\alpha_s^4 L^9 \rho^9} + \dots \quad (3.32)$$

3.5 Exemple de fusion d'un glaçon

Pour établir les résultats analytiques nous choisissons la fusion de la glace à une seule phase à partir d'un état isotherme ($T = 0^\circ\text{C}$).

Les valeurs numériques des constantes utilisées pour ce cas sont les suivantes :

$$k = 0.6 \text{ W/mK}, \rho = 1000 \text{ kg/m}^3, c_p = 4180 \text{ J/kg}, T_f = 0^\circ\text{C}, T_0 = -30^\circ\text{C}, Ste = 0.375 [17]$$

La constante λ' vaudra donc 0.369871.

- La distribution de la température :

A partir de l'éq. (3.6) on a:
$$T(x,t) = T_0 - (T_0 - T_f) \frac{\text{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}}\right)}{\text{erf}(\lambda')}$$

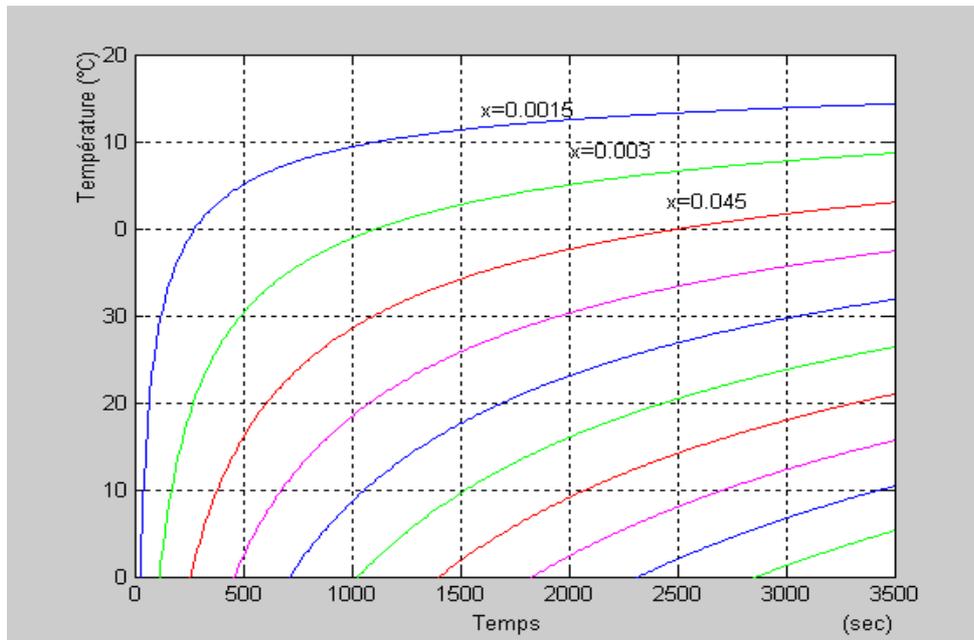


Fig.3.4 L'évolution de la température au cours de temps

- Position de l'interface :

L'éq. (3.8) donne $X(t) = 2\lambda' \sqrt{\alpha t}$

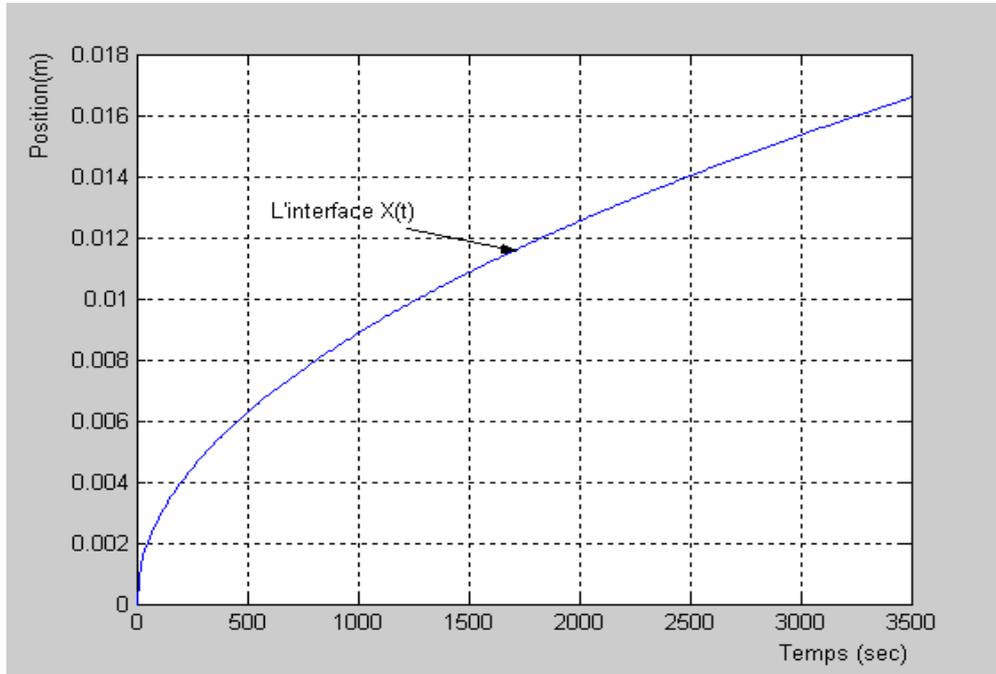


Fig.3.5 la position de l'interface

- Vitesse de l'interface : A partir de l'éq. (3.10) on a : $v(t) = \frac{dX(t)}{dt} = \frac{\alpha\lambda'}{\sqrt{\alpha t}} = \frac{\lambda'\sqrt{\alpha}}{\sqrt{t}}$

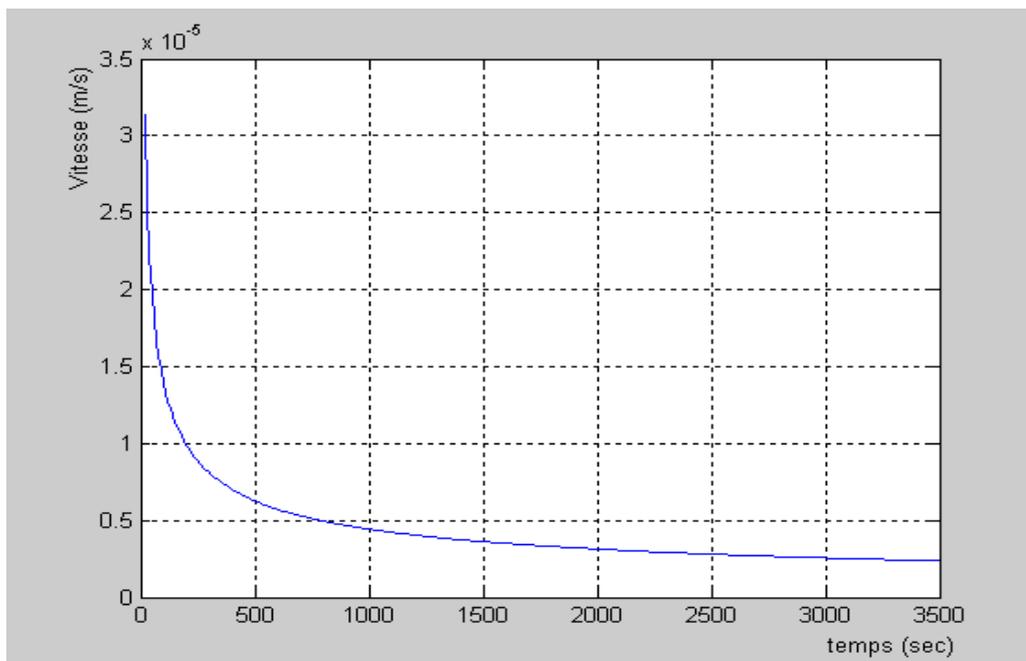


Fig.3.6 la vitesse de l'interface solide-liquide

- Flux de chaleur (W/m^2): L'éq. (3.11) donne
$$\phi(x,t) = \frac{k_l (T_0 - T_f) e^{-\frac{x^2}{4\alpha t}}}{\text{erf}(\lambda) \sqrt{\pi \sqrt{\alpha t}}}$$

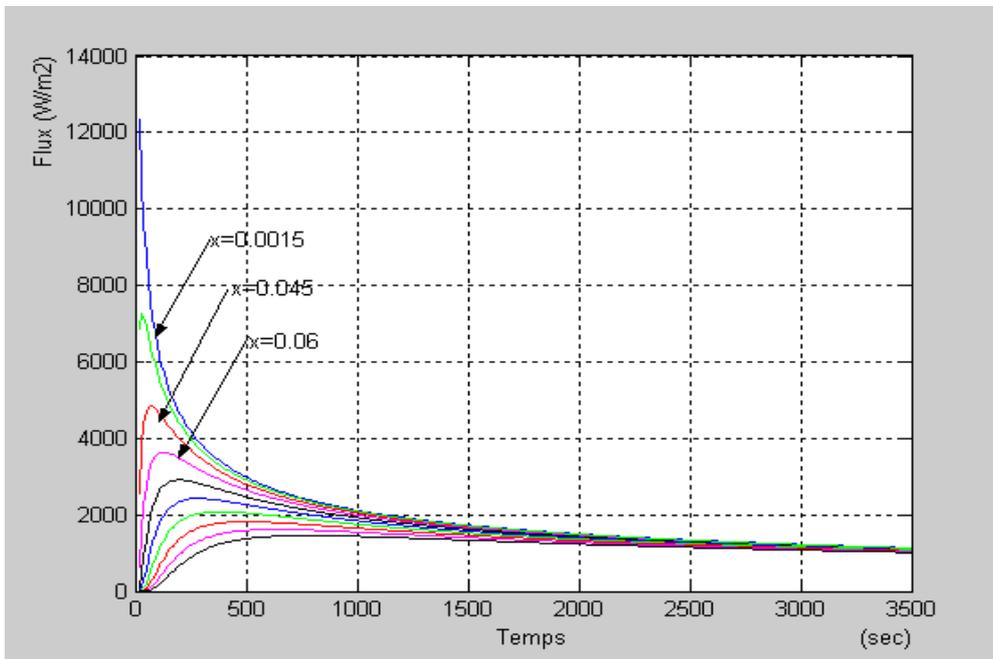


Fig.3.7 Le flux de chaleur

4.1 Introduction

Ce chapitre porte sur la description en 1D d'un nouveau schéma numérique de résolution des équations aux dérivées partielles, *la méthode de pas de temps variable*. Cette description est grandement inspirée du mémoire de maîtrise d'Ozisk [18] où le schéma numérique est présenté en détail pour le traitement de discontinuités en 1D. La méthode est ici présentée pour le problème particulier de la résolution de l'équation de la chaleur pour des problèmes de changement de phase de condition de type de Neumann.

4.2 Cadre générale :

Considérons la figure 2.3 ; pour un problème de solidification à *une seule phase*.

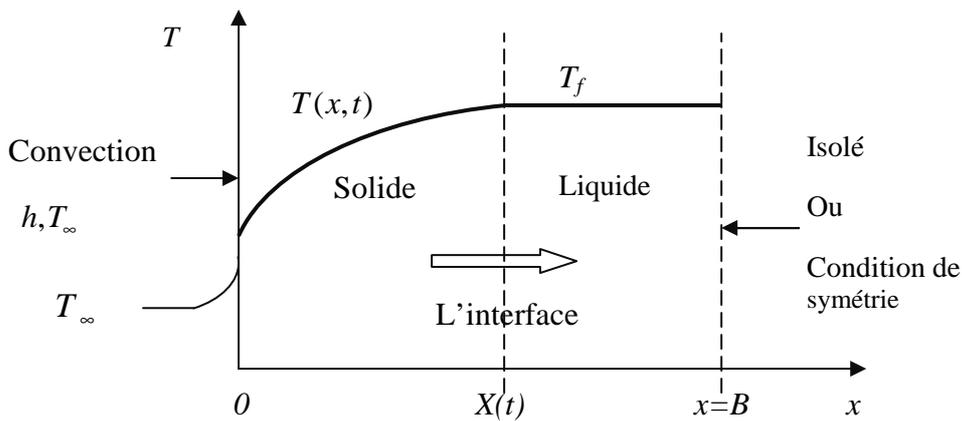


Fig. 2.3 : La géométrie pour un problème de la solidification de seule phase

La formulation mathématique pour ce problème est :

Région solide :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad 0 \leq x \leq X(t), t > 0 \quad (4.1)$$

Condition à la limite :

$$-k \frac{\partial T}{\partial x} = h(T_\infty - T) \quad x = 0, t > 0 \quad (4.2)$$

A l'interface :

$$T(x, t) = T_f \quad x = X(t), t > 0 \quad (4.3)$$

$$k \frac{\partial T}{\partial x} = \rho L \frac{dX(t)}{dt} \quad x = X(t), t > 0 \quad (4.4)$$

4.3 Approximation de différences finies

L'approximation de différences finies de l'équation (4.1) à (4.4) est décrite ci-dessous.

4.3.1 Équation de chaleur (4.1): cette équation approchée avec les différences finies, nous préférons la méthode implicite et en écrive l'éq. (4.1) sous la forme :

$$\frac{T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t_n} \quad (4.5)$$

Nous sommes adoptées la notation suivante

$$T(x, t_n) = T(i\Delta x, t_n) \equiv T_i^n$$

L'équation (4.5) est réarrangée comme

$$\left[-r_n T_{i-1}^{n+1} + (1 + 2r_n) T_i^{n+1} - r_n T_{i+1}^{n+1} \right]^{(p)} = T_i^n \quad (4.6)$$

Avec l'exposant p au-dessus de la parenthèse se rapporte de p -ème itération, et le paramètre

$$r_n \text{ est définie comme } r_n = \frac{\alpha \Delta t_n}{(\Delta x)^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \text{ et } \Delta t_n = t_{n+1} - t_n$$

4.3.2 Condition à la limite à $x = 0$: condition de limite de convection l'éq. (4.2) est réarrangé

$$\frac{\partial T}{\partial x} = HT - HT_\infty \quad \text{avec } H = h/k$$

Et alors discrétisé comme: $\frac{T_1^{n+1} - T_0^{n+1}}{\Delta x} = HT_0^{n+1} - HT_\infty$

Ce résultat est réarrangé sous la forme

$$\left[T_1^{n+1} - (1 + H \Delta x T_0^{n+1}) \right]^{(p)} = -H \Delta x T_\infty \quad (4.7)$$

L'équation de différences finies (4.7) est de premier ordre de précision. Une expression d'ordre deuxième développée ou bien en utilisant un concept des nœuds fictive ou bien appliquant l'approche de volume de contrôle pour inclure la capacité de chaleur de volume de contrôle.

4.3.3 Condition de l'interface : la condition de continuité de température à l'interface, l'éq. (4.3) est écrit comme

$$T_{n+1}^{n+1} = T_f^* = \text{Température de fusion}$$

Qui est toujours valable. L'équation d'équilibre d'énergie de l'interface (4.4) est discrétisée comme :

$$\frac{T_{n+1}^{n+1} - T_n^{n+1}}{\Delta x} = \frac{\rho L}{k} \frac{\Delta x}{\Delta t_n} \quad (4.8)$$

Qui est réarrangé dans la forme :

$$\left[\Delta t_n \right]^{(p+1)} = \frac{\rho L}{k} \left[\frac{(\Delta x)^2}{T_f^* - T_n^{n+1}} \right]^{(p)} \quad (4.9)$$

Depuis $T_{n+1}^{n+1} = T_f^* =$ La température de fusion

4.3.4 L'algorithme de détermination le Pas de Temps

Nous décrivons maintenant l'algorithme pour la détermination du pas de temps Δt_n , l'interface déplace exactement une distance Δx .

4.3.5 Le pas de temps du départ Δt_0 : Une expression explicite développée pour de calcul de premier pas de temps Δt_0 comme suit :

Donne $n = 0$ dans l'éq. (4.7) et (4.9) et éliminez T_0^1 et noter que $T_1^1 = T_f^*$.

$$\Delta t_0 = \frac{\rho L \Delta x (1 + H \Delta x)}{k H (T_f^* - T_\infty)} \quad (4.10)$$

Avec $\Delta t_0 \equiv t_1 - t_0$.

4.3.6 Pas de temps Δt_1 : nous ajoutons $i=1, n=1$ dans l'éq. (4.6) et note que $T_1^1 = T_2^2 = T_f^*$ alors l'éq. (4.6) devient

$$\left[-r_1 T_0^2 + (1 + 2r_1) T_1^2 \right]^{(p)} = (1 + r_1^{(p)}) T_f^* \quad (4.12)$$

Et la condition de limite est l'éq. (4.7) pour $n=1$ nous obtenons

$$\left[-(1 + H \Delta x) T_0^2 + T_1^2 \right]^{(p)} = -H \Delta x T_\infty \quad (4.13)$$

Pour résoudre l'équation (4.12) et (4.13) pour T_0^1 et T_1^2 , La valeur de $r_1^{(p)}$ est nécessaire, mais $r_1^{(p)}$ défini par l'éq. (4.6) dépend de $\Delta t_1^{(p)}$. Donc, la solution a besoin des itérations. Pour commencer les itérations, nous avons placé

$$\Delta t_1^{(0)} = \Delta t_0$$

Alors $r_1^{(0)}$ est déterminé à partir de l'éq. (4.6), l'éq. (4.13) est résolu pour T_0^1 et T_1^2 pour connaître T_1^2 , $\Delta t_1^{(1)}$ est calculé de l'éq. (4.9). Les itérations sont continuées jusqu'à ce que la différence entre les deux étapes consécutives de temps $|\Delta t_1^{p+1} - \Delta t_1^p|$ satisfasse de critère indiquée d'une convergence.

4.3.7 Pas de temps Δt_n : les résultats ci-dessus sont maintenant utilisés dans l'algorithme suivant pour calculer le pas de temps Δt_n chaque niveau de temps $t_n, n = 2, 3, \dots$

a) Le pas de temps Δt_n au niveau de temps $t_n, n = 2, 3, \dots$ sont calculés par itération. Une valeur de conjecture $\Delta t_n^{(0)}$ est choisie comme

$$\Delta t_n^{(0)} = \Delta t_{n-1}, n = 2, 3, \dots \quad (4.14)$$

Le système des équations de différences finis (4.5), (4.7), ainsi que la condition (4.8) sont résolus pour $i = 2, 3, \dots, n$ en mettant $p = 0$ et une première évaluation est obtenue pour les températures nodales $[T_i^{n+1}]^{(0)}$ pour $i = 1, 2, \dots, n$ (4.15)

Nous notons que le système des équations est tri-diagonal, par conséquent aisément résolu.

- b) Les valeurs de $[T_i^{n+1}]^{(0)}$ obtenu à partir de l'éq. (4.15) sont introduits dans l'éq. (4.9) pour $p = 0$ et une première évaluation pour le pas de temps $\Delta t_n^{(1)}$ est déterminée.
- c) $\Delta t_n^{(1)}$ est utilisé comme valeur de conjecture et l'étape (a), (b) sont répétées pour calculer une deuxième évaluation pour l'étape de temps $\Delta t_n^{(2)}$.
- d) Les étapes (a), (b) et (c) sont répétées jusqu'à ce que la différence entre deux pas de temps consécutives $|\Delta t_n^{(p+1)} - \Delta t_n^{(p)}|$ satisfasse le critère indiqué d'une convergence.

4.3.8 Exemple de résolution :

Considérons un problème de solidification d'une seule phase pour un liquide initialement à la température de fusion T_f^* , confiné à la région $0 \leq x \leq 1$. La solidification a lieu en raison du refroidissement convectif sur la surface de frontière $x = 0$. Tandis que la surface de frontière à $x = 1$ est isolée.

On donne la formulation mathématique de ce problème sous la forme adimensionnels comme :

Région solide :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad \text{dans } 0 < x < S(t) \quad t > 0,$$

Conditions aux limites :

$$-\frac{\partial T}{\partial x} + 10T = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad x = 1, t > 0$$

Condition de l'Interface:

$$T(x,t) = 1 \text{ à } x = S(t), t > 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{dS(t)}{dt} \text{ à } x = S(t), t > 0$$

Ce problème a été résolu par Gupta et Kumar (1981) en utilisant l'approche de variable de pas de temps. Les valeurs numériques de divers paramètres apparaissant dans cette équation sont déterminées en comparant la formulation mathématique de cet exemple à cela indiquée par éqts. (4.1) à (4.4), nous trouvons :

$$T_f^* = 1, H = 10, T_\infty = 0, \alpha = 1, \frac{\rho L}{k} = 1. \text{ Et le pas d'espace est choisi comme } \Delta x = 0.1$$

4.3.9 Résultats :

Nous écrivons un programme de Matlab de notre algorithme de ce problème qui donne les résultats suivants :

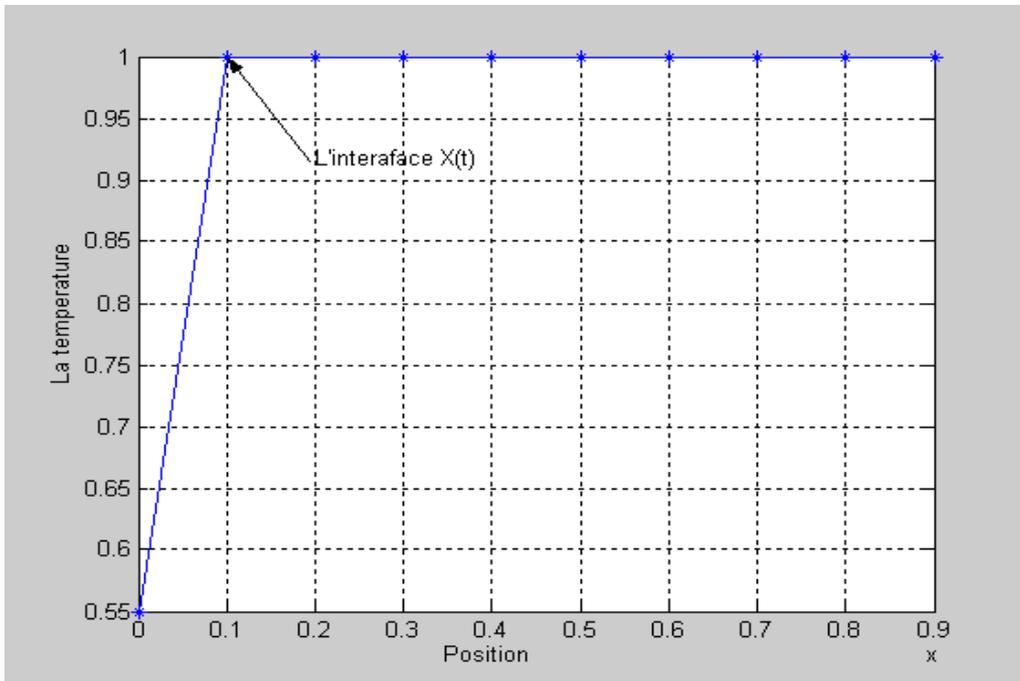


Figure 3.3 L'évolution de la température pour $X(t) = 0.1$

Par exemple, le premier pas de temps Δt_0 , l'interface mouvant de $X(t)=0$ au $X(t)=0.1$, est déterminée par l'éq. (4.10).

La solidification commence à la surface de frontière $x=0$ à cause de la convection et les mouvements de l'interface solide-liquide de $x=0$ au $x=0.5$ dans un intervalle de temps Δt_5 alors cette partie est solidifiée et l'autre partie entre $x=0.5$ et $x=1$ est liquide comme illustré dans la figure. Alors en montre dans ce simple exemple que l'interface solide-liquide et en mouvement

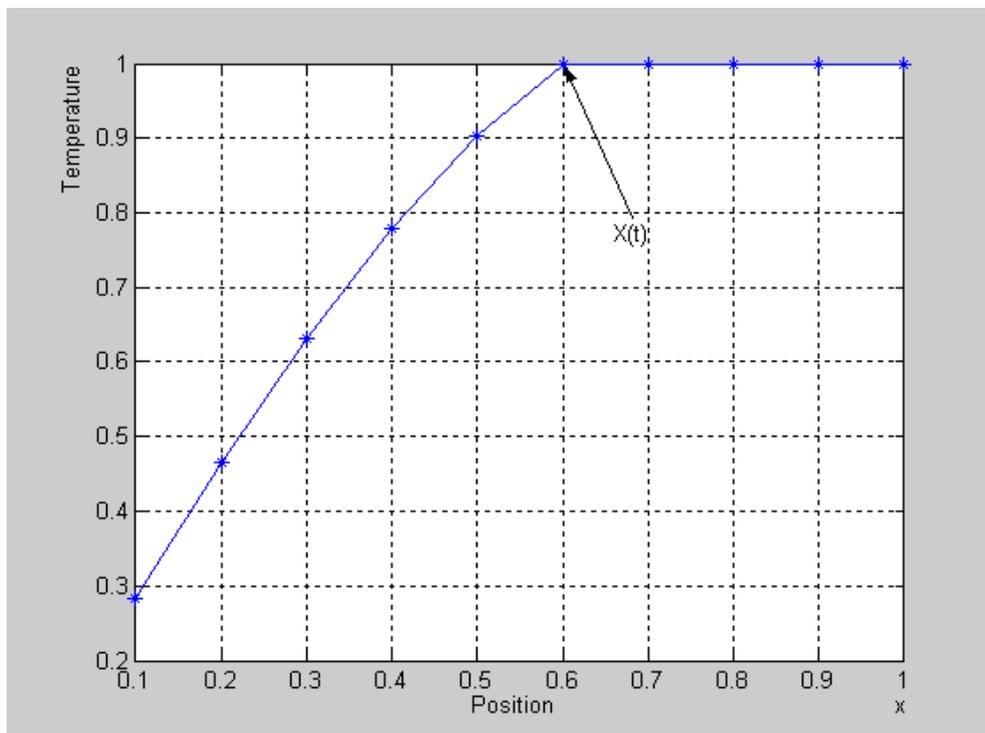


Figure 3.4 L'évolution de la température pour $X(t) = 0.5$

Et pour les autres positions d'interface $X(t)$ en introduire les résultats sur la figure suivante :

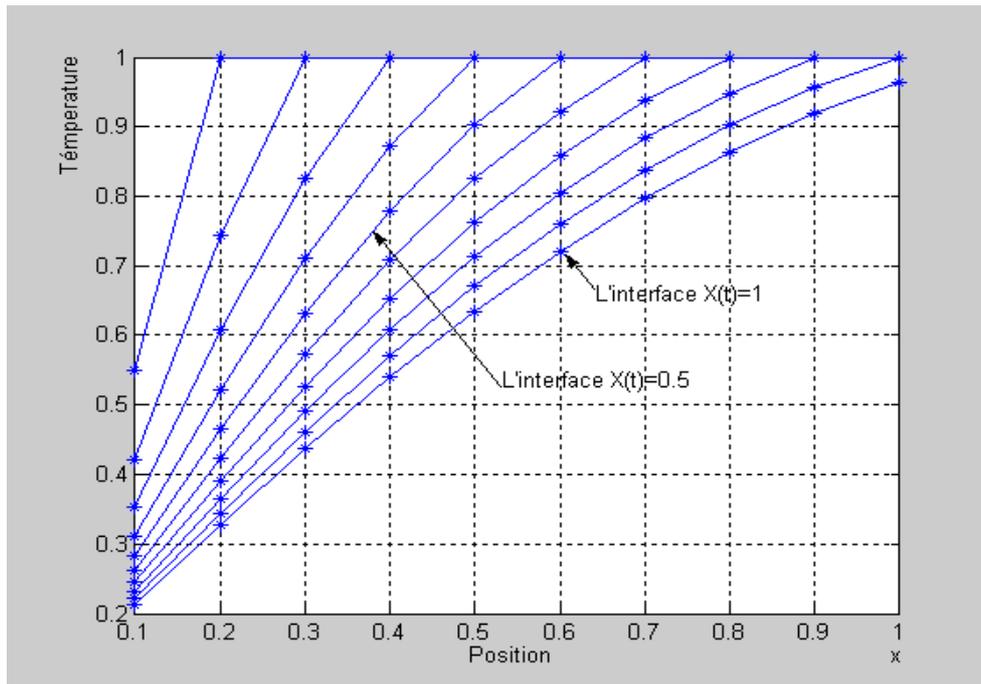


Figure 3.5 L'évolution de la température pour $X(t)$

La figure 3.6 présente l'évolution de la température au cours de temps

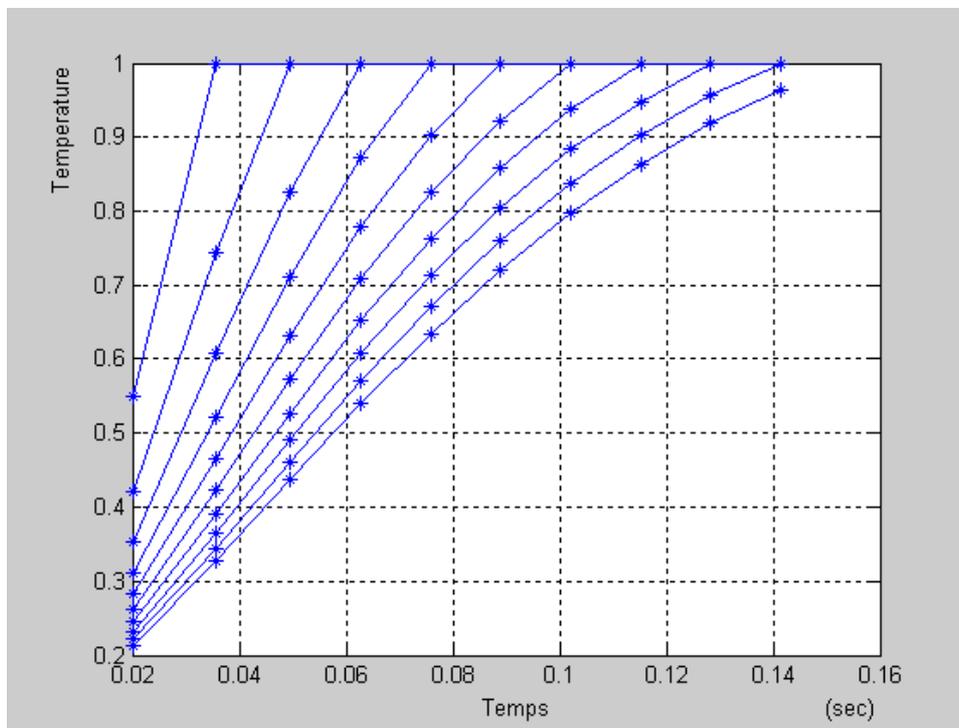


Figure 3.6 l'évolution de la température Δt_i

Pour illustré les résultats des températures en fonction de t et x en même plan

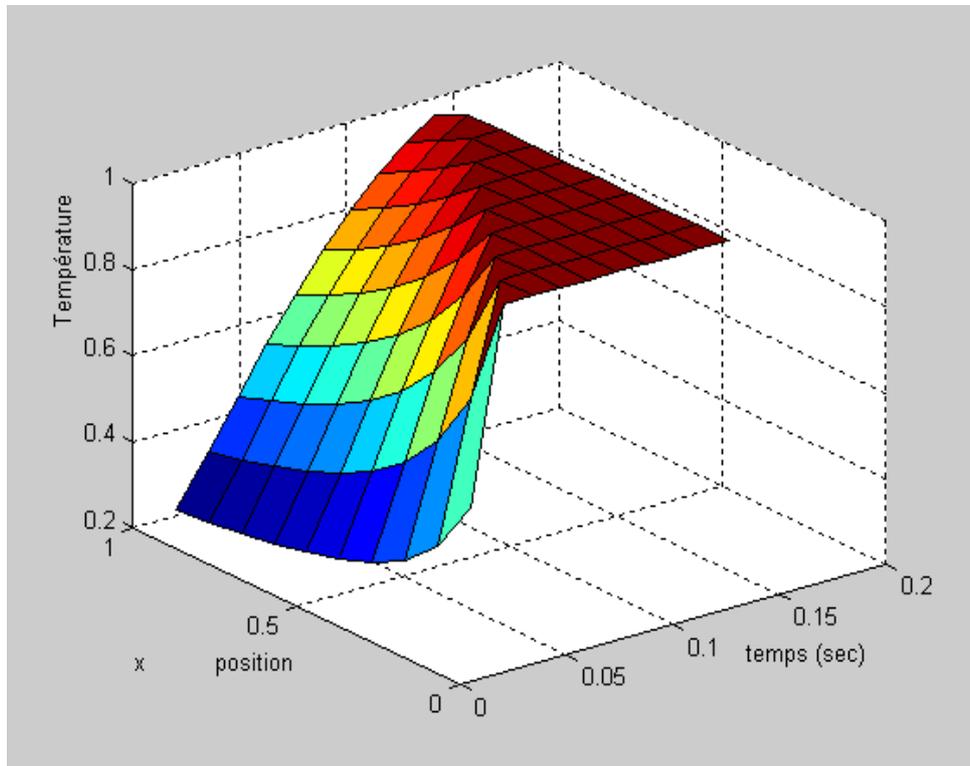


Figure 3.7 l'évolution de $T(x,t)$

5.1 Introduction

La complexité du problème de changement de phase visé par cette étude nécessite donc l'emploi d'une méthode enthalpique. Il faut toutefois noter que les méthodes enthalpiques n'ont pas toutes acquis le même niveau de perfectionnement et de robustesse. La méthode développée par Voller et ses collaborateurs [7] a donc été choisie. Cette technique utilise un terme source approprié dans l'équation d'énergie afin de refléter l'évolution du changement de phase. Plusieurs auteurs l'ont confrontée avec succès [19,20] à des résultats expérimentaux sur le changement de phase en présence de convection naturelle et pour divers MCP (acide caprillique, cyclohexane, étain, gallium et octadécane).

5.2 Objectifs

Les objectifs visés peuvent se résumer à:

- 1) Approfondir les connaissances actuelles du phénomène de changement de phase.
- 2) Modéliser, simuler et analyser le phénomène de changement de phase.

5.3 Problématique :

Soit un métal pur (Gallium) contenue dans une enceinte rectangulaire de hauteur a et de largeur b (Fig. 5.1). Les parois verticales de l'enceinte sont maintenues à une température uniforme alors que les parois horizontales sont considérées comme étant adiabatiques. Initialement, le métal solide et les parois verticales sont à une température uniforme T_D

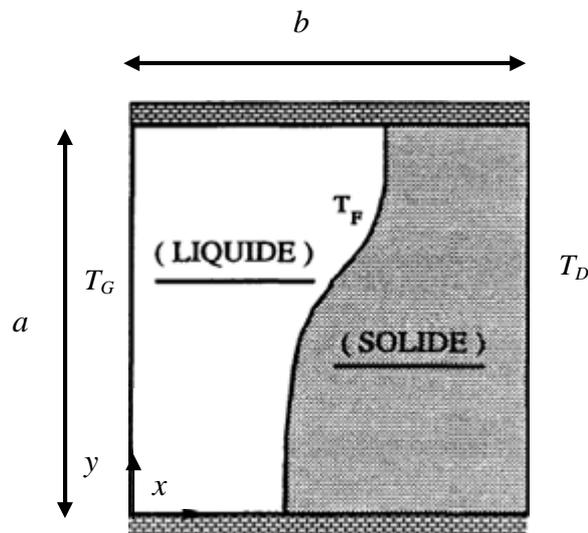


Figure 5.1 Représentation du système physique

Tel que $T_D < T_f$, T_f étant la température de fusion. Au temps $t = 0$, Le processus de fusion est initié en imposant soudainement à la paroi verticale de gauche une température T_G , où

$$T_G > T_f.$$

5.4 Hypothèses générales

Dans le présent modèle, les hypothèses suivantes sont posées:

1. Le problème est bidimensionnel et transitoire.
2. L'enceinte est parfaitement isolée.
3. La conduction dans les phases solide et liquide du MCP et dans les parois (lorsqu'elles sont présentes) est prise en compte.
4. Tout autre phénomène de transfert de chaleur (comme le rayonnement) est négligé.
5. La loi de Fourier est retenue pour décrire la conduction microscopique.
6. La dissipation visqueuse est négligée.
7. Les propriétés physiques du MCP et des parois sont constantes mais peuvent être différentes d'une phase à l'autre pour le MCP (conductivité et chaleur spécifique).

5.5 Hypothèses reliées au changement de phase

8. Une méthode enthalpique est retenue.
9. Le MCP est parfaitement pur. Il n'y a pas de bulles d'air emprisonnées dans le MCP et le changement de phase est isotherme.
10. Le MCP est homogène et isotrope.
11. Aucune parcelle de MCP solide ne se détache pour aller dans l'écoulement tant qu'elle n'est pas entièrement fondue (pas de particule en suspension).
12. Le MCP solide ne tombe jamais (immobilisé) même s'il est complètement entouré de liquide.
13. L'expansion (ou la contraction) du MCP occasionnée par sa fusion est négligée

5.6 Notes sur l'hypothèse de la constance des propriétés physiques

Il est justifié d'utiliser des propriétés constantes dans la mesure où la plage de température est relativement faible. Or, les excès de température ne sont justement pas intéressants pour les applications de dissipation de chaleur comme pour les dispositifs de stockage. Cependant, les propriétés varient parfois de façon considérable d'une phase à l'autre. C'est pourquoi le modèle permet l'usage de propriétés différentes pour chaque phase.

5.7 Notes sur l'hypothèse de l'immobilité de la phase solide

Il est clair ici que les prédictions du modèle seront erronées si cette condition n'est pas vérifiée. Il est raisonnable de supposer que le MCP solide adhère aux parois même si la partie inférieure de l'enceinte est complètement fondue. Cependant, lorsque la cavité est chauffée des deux côtés (symétrie), il est possible de retrouver des régions solides entre les sources de chaleur complètement entourées de liquide. Il demeure au moins possible de constater qu'une configuration donnée mène à ce genre de situation, bien que le modèle soit alors inapte à poursuivre le calcul correctement. Dans l'étude paramétrique, ces cas devront être traités spécialement s'ils sont intéressants eu égard aux objectifs fixés.

5.8 Formulation les équations :

Respectant les hypothèses présentées ci-dessus, exprimant l'équation de l'énergie se présentent sous forme enthalpique (*démonstration en Annexe A2*), dans un repère cartésien, comme suit:

$$\frac{1}{\alpha} \left(\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \Delta H \right) = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \quad (5.1)$$

Condition initiale :

$$h(x, y, 0) = h_i \quad x \geq 0, y \geq 0 \quad t = 0 \quad (5.2)$$

Conditions aux limites:

$$h(0, y, t) = h_G \quad x = 0, y \geq 0 \quad t > 0 \quad (5.3)$$

$$h(x, 0, t) = h_D \quad x \geq 0, y = 0 \quad t > 0 \quad (5.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} h(x, 0, t) = 0 \quad x \geq 0, y = 0 \quad t > 0 \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} h(x, H, t) = 0 \quad x \geq 0, y = a \quad t > 0 \quad (5.6)$$

5.8.1 Variables adimensionnées :

La transformation des variables dépendantes et indépendantes des équations de conservation et de leurs conditions frontières en variables sans dimensions, c'est-à-dire en variables normalisées par rapport à certaines valeurs caractéristiques, permet de spécifier les conditions du problème à l'aide d'un nombre restreint de paramètres et facilite grandement la validation des résultats. Les variables sont adimensionnées de la façon suivante:

$$\xi = \frac{x}{a}, x = a.\xi$$

$$\eta = \frac{y}{b}, y = b.\eta$$

$$F_0 = \frac{\alpha t}{b^2}, t = \frac{b^2 F_0}{\alpha}$$

$$h^* = \frac{h}{H_f}, h = H_f . h^*$$

$$\Delta H^* = \frac{\Delta H}{H_f}, \Delta H = H_f . \Delta H^*$$

En substituant ces expressions dans l'équation d'énergie et leurs conditions initial et limites, on obtient alors :

$$\frac{\partial}{\partial F_0} h^* + \frac{\partial}{\partial F_0} \Delta H^* = d^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} h^* + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} h^* \quad (5.7)$$

Avec $d = \frac{a}{b}$

Conditions initial et aux limites :

$$h^*(\xi, \eta, 0) = h_i^* \quad \xi \geq 0, \eta \geq 0 \quad F_0 = 0$$

$$h^*(0, \eta, F_0) = h_G^* \quad \xi = 0, \eta \geq 0 \quad F_0 > 0 \quad (5.8)$$

$$h^*(\xi, 0, F_0) = h_D^* \quad \xi \geq 0, \eta = 0 \quad F_0 > 0 \quad (5.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial \eta} h^*(\xi, 0, F_0) = 0 \quad \xi \geq 0, \eta = 0 \quad F_0 > 0 \quad (5.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial \eta} h^*(\xi, 1, F_0) = 0 \quad \xi \geq 0, \eta = 1 \quad F_0 > 0 \quad (5.11)$$

5.8.2 Discrétisation :

En discrétiser notre problème de différence finis. L'approximation de différence centrée aux dérivées spatiales, et des approximations de différence en aval aux dérivées de temps sont habituées discrétise à l'équation (5.7).

Les approximations de dérivées partielles sont :

$$\frac{\partial}{\partial F_0} h^* = \frac{h_{i,j}^{*n+1} - h_{i,j}^{*n}}{\Delta F_0} \quad (5.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial F_0} \Delta H^* = \frac{\Delta H_{i,j}^{*n+1} - \Delta H_{i,j}^{*n}}{\Delta F_0} \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} h^* = \frac{h_{i+1,j}^{*n+1} + h_{i-1,j}^{*n+1} - 2h_{i,j}^{*n+1}}{(\Delta \xi)^2} \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} h^* = \frac{h_{i,j+1}^{*n+1} + h_{i,j-1}^{*n+1} - 2h_{i,j}^{*n+1}}{(\Delta \eta)^2} \quad (5.15)$$

Substitution les équations (5.12), (5.13), (5.14) et (5.15) dans l'éq. (5.7) précédents:

$$\left(\frac{h_{i,j}^{*n+1} - h_{i,j}^{*n}}{\Delta F_0} + \frac{\Delta H_{i,j}^{*n+1} - \Delta H_{i,j}^{*n}}{\Delta F_0} \right) = (d)^2 \left(\frac{h_{i+1,j}^{*n+1} + h_{i-1,j}^{*n+1} - 2h_{i,j}^{*n+1}}{(\Delta \xi)^2} \right) + \left(\frac{h_{i,j+1}^{*n+1} + h_{i,j-1}^{*n+1} - 2h_{i,j}^{*n+1}}{(\Delta \eta)^2} \right) \quad (5.16)$$

Donc, la forme implicite de l'équation de différence finis pour un nœud intérieur i, j est :

$$h_{i,j}^n = \Delta H_{i,j}^{n+1} - \Delta H_{i,j}^n + \left(1 + \frac{2(d)^2 \Delta F_0}{(\Delta \xi)^2} + \frac{2\Delta F_0}{(\Delta \eta)^2} \right) h_{i,j}^{n+1} - \frac{2(d)^2 \Delta F_0}{(\Delta \xi)^2} (h_{i,j}^{n+1} - h_{i-1,j}^{n+1}) - \frac{\Delta F_0}{(\Delta \eta)^2} (h_{i,j+1}^{n+1} - h_{i,j-1}^{n+1}) \quad (5.17)$$

Les équations de différence finis pour les nœuds de frontière sont tirées d'une façon semblable.

- Nœuds de frontière à $x=0$ avec condition à limite de la première espèce (Température imposé):

$$h_{i,j}^n = h_G \quad (5.18)$$

- Nœuds de frontière à $x=b$ avec condition à limite de la première espèce (Température imposé):

$$h_{i,j}^n = h_D \quad (5.19)$$

- Nœuds de frontière à $y=0$ avec condition de limite de la deuxième espèce (isolée) :

$$h_{i,1}^n = \Delta H_{i,1}^{n+1} - \Delta H_{i,1}^n + \left(1 + \frac{2(d)^2 \Delta F_0}{(\Delta \xi)^2} + \frac{2\Delta F_0}{(\Delta \eta)^2} \right) h_{i,1}^{n+1} - \frac{2(d)^2 \Delta F_0}{(\Delta \xi)^2} (h_{i-1,2}^{n+1}) - \frac{\Delta F_0}{(\Delta \eta)^2} (h_{i+1,1}^{n+1} - h_{i-1,2}^{n+1}) \quad (5.20)$$

- Nœuds de frontière à $y=H$ avec condition de limite de la deuxième espèce (isolée) :

$$h_{i,N}^n = \Delta H_{i,N}^{n+1} - \Delta H_{i,N}^n + \left(1 + \frac{2(d)^2 \Delta F_0}{(\Delta \xi)^2} + \frac{2\Delta F_0}{(\Delta \eta)^2} \right) h_{i,N}^{n+1} - \frac{2(d)^2 \Delta F_0}{(\Delta \xi)^2} (h_{i,N-1}^{n+1}) - \frac{\Delta F_0}{(\Delta \eta)^2} (h_{i+1,N}^{n+1} - h_{i-1,N}^{n+1}) \quad (5.21)$$

Les équations de différence finis précédentes sont exprimées dans une forme commode, cependant avant le codage, ils ont été réarrangés pour résoudre de $h_{i,j}^{n+1}$.

Toutes les équations précédentes doivent être satisfaites.

Cependant, on a empiriquement montré qu'un certain temps doit s'écouler avant que les courants de convection ne soient établis pour dominer le transfert de chaleur par conduction. Bénard, Gobin et Martinez [21] déterminer par expériences que le temps de transition , t_0 , Pour le régime de la couche limite pour établir dans la région liquide pour le début de convection donner:

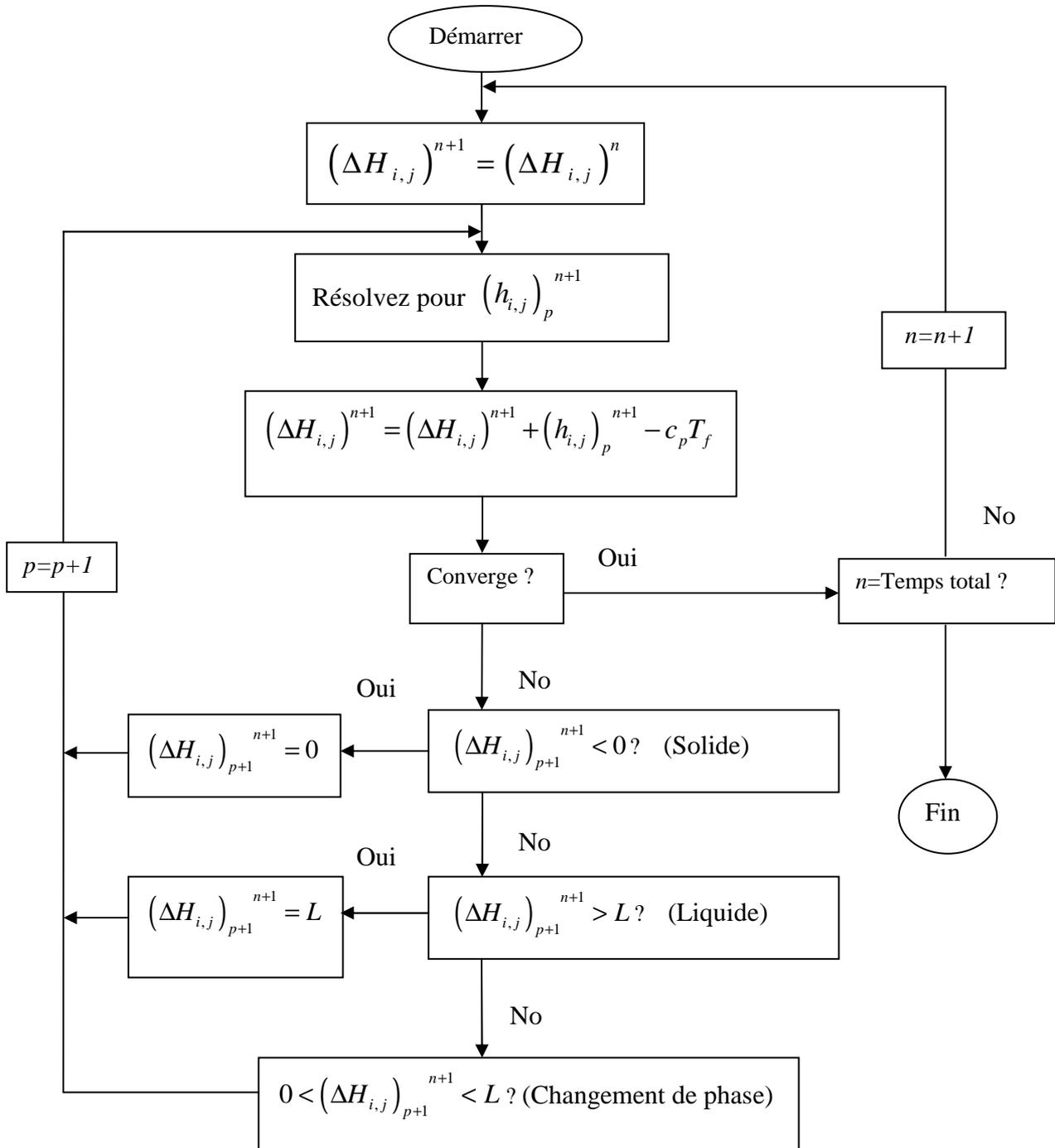
$$t_0 = 4.59 \left(\frac{\text{Pr}}{\text{Ste}} \cdot \frac{\rho_s}{\rho_L} \cdot \text{Ra}^{-\frac{1}{2}} \right)$$

5.8.3 L'Algorithme :

Pour programmer cette discrétisation alors nous écrivons l'algorithme, au début de l'algorithme, *Sur un pas de temps*, La position des chaleurs latentes prend la valeur de pas le temps précédent. Pour chaque itération de *Gauss-Seidel*, les équations de position pour la chaleur sensible sont résolues. Après résolution, l'enthalpie sensible de chaque position est ajoutée à la chaleur latente de cette position tandis que l'enthalpie sensible pour amorcer la fusion, $c_p T_f$ est soustraite $\Delta H_{i+1,j} = \Delta H_{i,j} + h_{i,j} - c_p T_f$.

Un volume de contrôle est dans la phase solide, si $h_{i,j} < c_p T_f$ et $\Delta H_{i,j} = 0$, et est dans la phase liquide si $h_{i,j} > c_p T_f$. Et $\Delta H_{i,j} = L$, alors les corrections suivantes sont faites avant l'itération suivante. Si $\Delta H_{i,j} < 0$, donner $\Delta H_{i,j} = 0$, et si $\Delta H_{i,j} > L$, donner $\Delta H_{i,j} = L$. Si le volume de contrôle est changé la phase, ΔL pour ce nœud reste comme déterminé par l'équation ci-dessus, c'est continué jusqu'à la convergence, la convergence est réalisée quand $h_{i+1,j}^{n+1} - h_{i,j}^{n+1}$ est moins d'un numéro indiqué. Sur les processus itératifs de la convergence de Gauss-Seidel, *Sur un pas de temps*, Les nodales des enthalpies sensibles pour ces volumes de contrôle subissant un changement de phase seront égales à $c_p T_f$ avec la chaleur latente dans la gamme $0 < \Delta H < L$.

5.8.4 L'organigramme :



5.8.5 Simulation du modèle:

Le modèle que nous venons de présenter est utilisé pour simuler la fusion du gallium. Ce métal pur a été choisi parce que des expériences de fusion en laboratoire ont déjà été faites et sont présentées par Beckermann et Viskanta [22]. Cette expérience a été réalisée pour une cellule rectangulaire d'une hauteur b et d'une largeur a de 10 cm , Les parois nord et sud sont parfaitement isolées, la température de la paroi ouest est de 31° et une température initiale $T_0 = 27.8^\circ\text{C}$. Les propriétés physiques de gallium sont présentées dans le tableau 5.1.

Propriétés	Solide	Liquide
$k\text{ (W/m.K)}$	41.0	25.5
$c_p\text{ (J/kg.K)}$	377	398
$\rho\text{ (kg/m}^3\text{)}$	5910	6090
$L\text{ (J/kg)}$	559400	
$T_f\text{ (}^\circ\text{C)}$	29.7646	29.7646

Tableau 5.1: Propriétés physiques de Gallium [23]

Nous écrivons un programme sous *Matlab* de ce problème, En utilisant un pas de temps $\Delta t = 1\text{ sec}$. Le temps total simulé est de 500 secs . Maillage de nœuds 21×21 .

5.8.6 Résultats et discussions

Les figures (5.2-3-4) représentent le déplacement de l'interface solide-liquide en fonction du temps, l'interface solide-liquide étant une ligne isotherme,

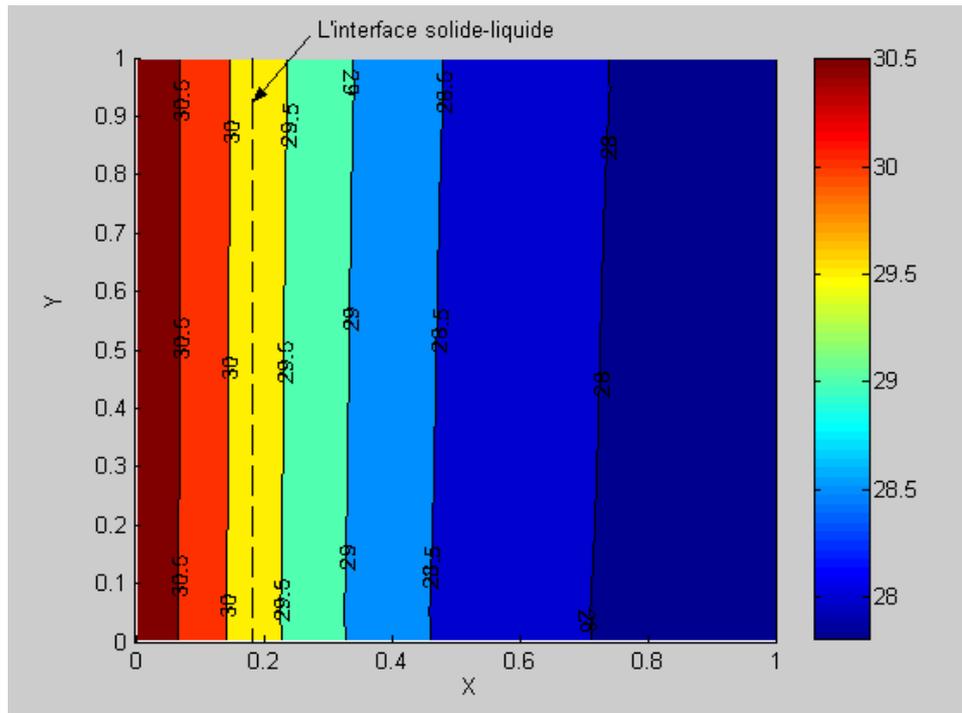


Fig.5.2 L'évolution de la température à $t=50$ sec

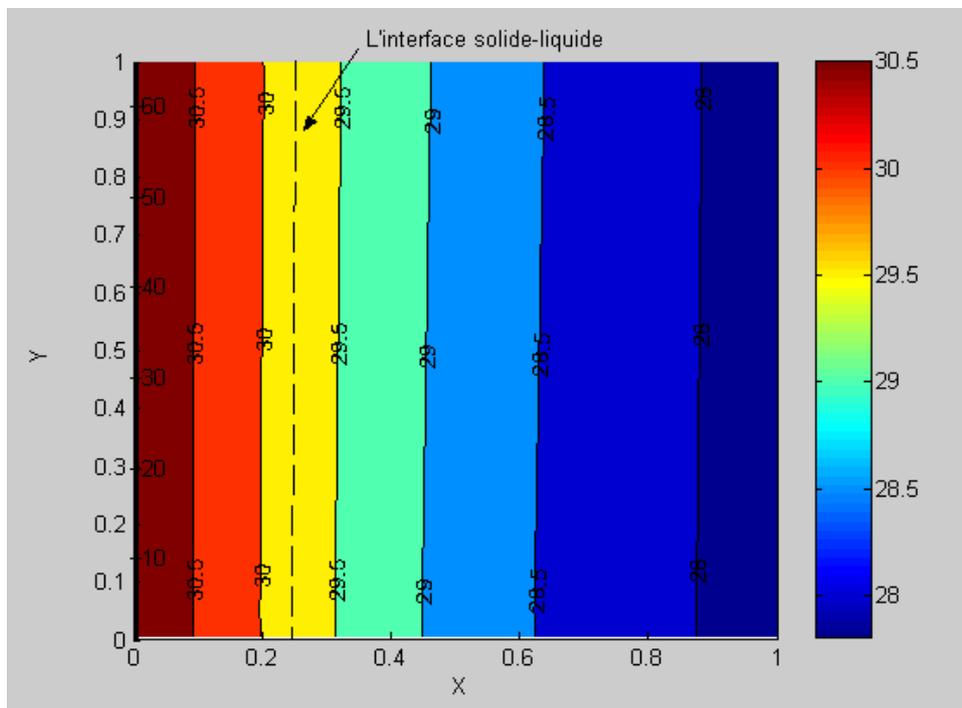


Fig.5.3 L'évolution de la température à $t=100$ sec

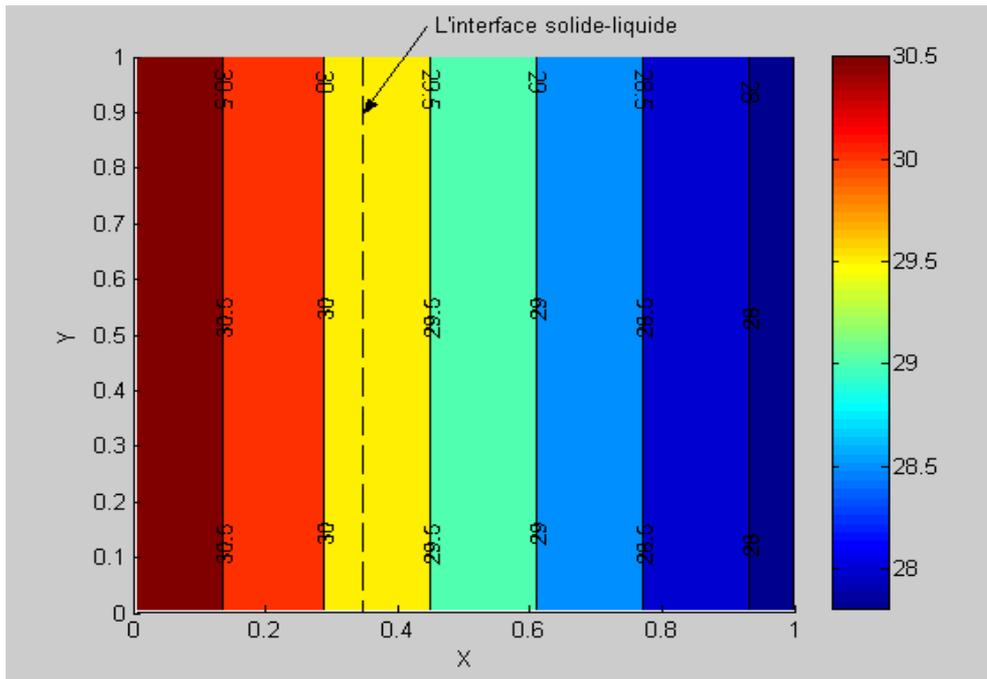


Fig.5.4 L'évolution de la température à $t=300\text{ sec}$

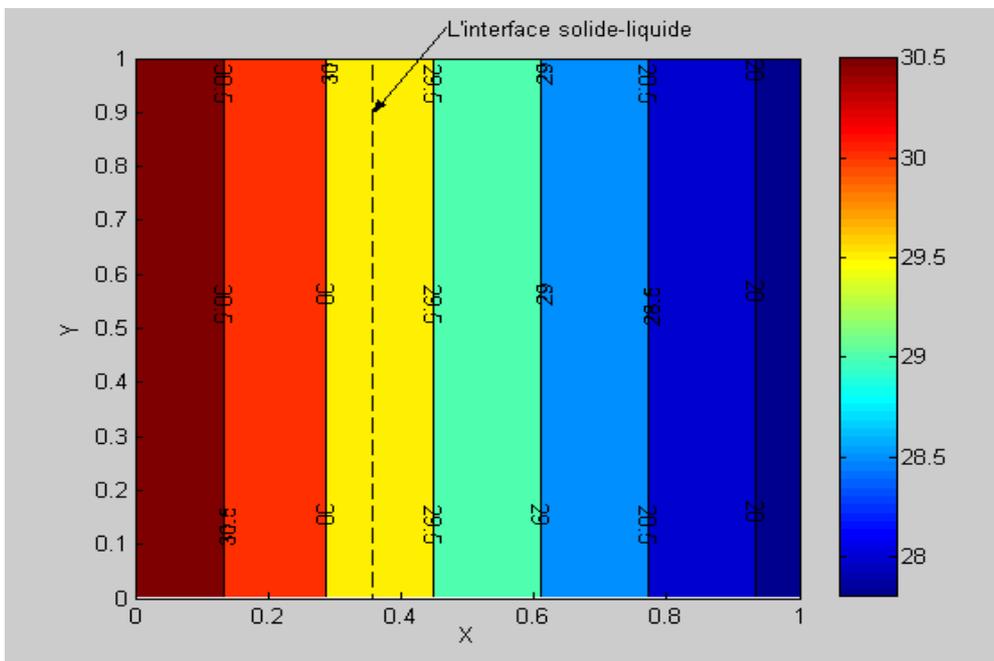


Fig.5.4 L'évolution de la température à $t=500\text{ sec}$

La figure 5.5 illustré la vitesse de l'interface solide-liquide au cours de temps, la vitesse commence par une valeur de 3.5 mm/sec et diminué au cours le temps jusqu'à 0.05 mm/sec à un temps finale 500 sec .

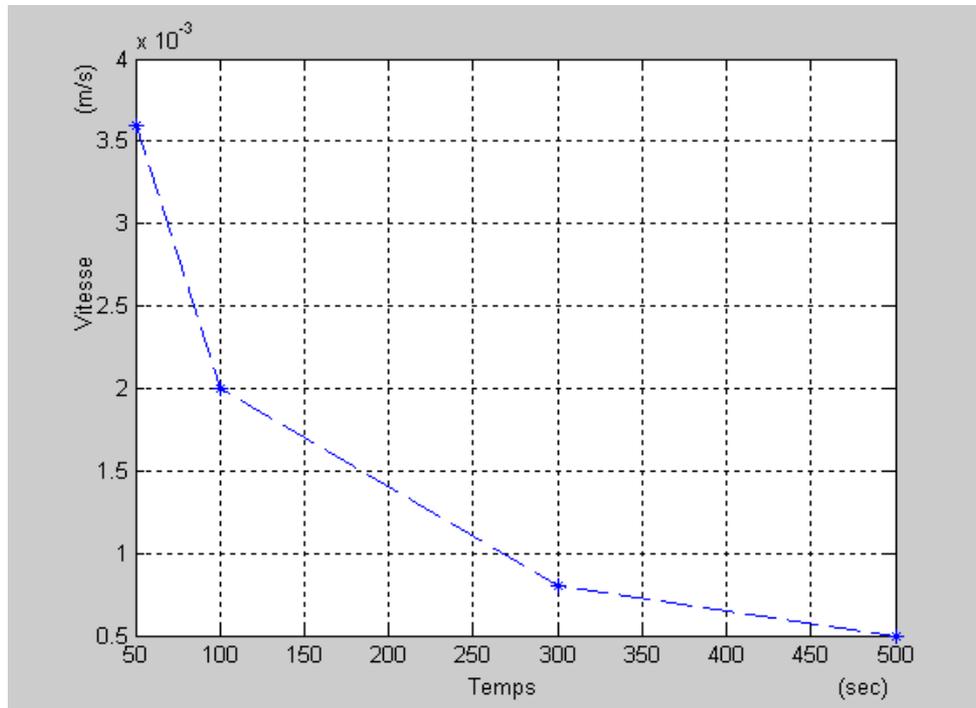


Fig.5.5 La vitesse de l'interface solide-liquide

D'un point de vue transfert de chaleur, la dynamique de transfert est régie par les phénomènes de conduction dans la phase liquide et solide. Les phénomènes de transfert étant surtout orientés de gauche à droite (dimension horizontale), ils se caractériseront principalement par rapport aux dimensions physiques prises dans cette direction. Dans les premiers instants du processus de fusion, le système dans la phase liquide est caractérisé par une petite dimension horizontale de longueur qui crée de forts gradients de températures.

Par conséquent ces gradients de températures favorisent la dominance du transfert de chaleur par conduction. Les isothermes demeurent verticales et parallèles.

Le problème de changement de phase ou '*moving boundary*' est très important sujet pour traiter, puisque l'existence de solution analytique pour quelques cas spécifiques (1D avec condition de type de Dirichlet) ; ce pour cela en résolu ce problème numériquement.

Deux méthodes numériques ont été mises au point pour simuler le problème de changement de phase solide-liquide à 1D et 2D. La méthode enthalpique permet de traiter le transfert de chaleur par conduction dans les deux phases solide et liquide. En tout temps, on peut prédire:
L'évolution de la température;

Les positions exactes de l'interface solide-liquide;

Cette méthode offre plusieurs avantages dont :

la plus grande facilité de trouver exactement la position de l'interface solide-liquide fonction du temps et de déterminer la vitesse de déplacement de l'interface sans avoir besoin d'utiliser l'expression de la condition à l'interface solide-liquide (2.12), c'est-à-dire :

$$k_l \frac{\partial T_l(X)}{\partial n} - k_s \frac{\partial T_s(X)}{\partial n} = -\rho L v_n$$

Pour compléter ce travail il faut aller vers un jeu en plus difficulté en traitant la convection naturelle dans la phase liquide en tenant compte les régimes d'écoulement.

RESUMER

Une méthodologie numérique pour analyser le transfert de chaleur par conduction lors de changement de phase solide-liquide d'une substance pure est présentée. L'équation d'énergie est formulée en 1D par la méthode de pas de temps variable et en 2D par la méthode enthalpique. Les équations sont discrétisées dans un maillage fixe. Les résultats numériques sont présentés, analysés et discutés.

Mots – clés : Changement de phase solide-liquide, Problème de Stefan, Frontière mobile, Méthode enthalpique, Équilibre liquide-liquide.

ABSTRACT

A numeric methodology to analyze the heat transfer by conduction during the phase change solid - liquid of a pure substance is presented. The equation of energy is formulated in 1D by the method of variable of time step and in 2D by the enthalpy method. Numeric results are presented, Analyzed and discussed.

Keywords: Phase change solid-liquid, Stefan problem, Moving boundary, Enthalpy method, Liquid-liquid equilibrium

ملخص

طريقة عددية مقدمة لتحليل انتقال الحرارة بالتوصيل خلال تحول الحالة من الصلبة إلى السائلة لمادة خالصة، نقوم بكتابة معادلة الطاقة أحادية البعد و حلها بطريقة متغير خطوات الزمن و كذلك بالنسبة لمعادلة الطاقة ثنائية البعد و حلها بطريقة الأنتالبي. نتحصل على نتائج نحللها و نعلق عليها.

كلمات مفتاح: تغير الحالة صلب-سائل، مشكلة ستيفان، الحدود المتحركة، طريقة الانتالبي، التوازن سائل-سائل.