



Modélisation unidimensionnelle transitoire des phénomènes couplés de transfert conductif et de fusion d'un MCP semi-infini initialement à l'état de solide sous-refroidi

Larbi MANSOURI¹, Mourad BALISTROU¹, Bernard BAUDOIN²

¹Laboratoire d'Énergétique - Mécanique & Ingénierie, Faculté des Sciences de l'Ingénieur, Université M'Hamed BOUGARA, Bd de l'Indépendance 35000 Boumerdes, Algérie

²Laboratoire du Département Énergétique Industrielle, École Nationale Supérieure des Mines, 941 rue Charles Bourseul CS 10838 59508 Douai Cedex, France

larbimansouri@yahoo.fr, mouradbalistrou@yahoo.fr et baudoin@ensm-douai.fr

Résumé : Le présent travail porte sur le phénomène de fusion d'un matériau à changement de phase MCP confiné dans un milieu semi-infini et préalablement sous-refroidi. Un modèle numérique à deux phases pour le traitement du changement de phase solide-liquide est présenté en se basant sur les équations de conservation de l'énergie. La simulation numérique des phénomènes couplés de fusion et des transferts thermiques purement conductifs dans les deux phases, solide et liquide, est réalisée à l'aide d'un code de calcul utilisant l'approche des volumes de contrôle. La solution numérique est validée avec succès par comparaison avec les estimations analytiques de Neumann.

Mots clés : milieu semi-infini, fusion, matériau à changement de phase, solution analytique, modèle numérique, volumes finis

1. Introduction

L'étude de la cinétique des transferts thermiques lors du changement de phase, et plus particulièrement changement de phase solide-liquide, suscite beaucoup d'intérêt dans divers domaines scientifiques et secteurs technologiques. Parmi les secteurs qui se sont intéressés au problème du changement de phase, on trouve notamment le secteur de la métallurgie, de l'agro-alimentaire, des systèmes électroniques ou encore celui du stockage d'énergie par chaleur latente [1,2]. Les défis posés par ce problème sont nombreux à savoir : non-linéarité intrinsèque, changement brusque des propriétés thermophysiques du matériau de part et d'autre du front de changement de phase, température variable lors du changement de phase d'un matériau impure (mélange, alliage, etc.) où apparaît une zone à deux phases (région pâteuse) entre les zones solide et liquide, frontières mobiles généralement non connues au préalable, et autres. En conséquence, seuls les cas les plus simples (géométrie simple, conditions aux limites constantes, propriétés thermophysiques constantes dans chaque phase, etc.) sont favorables à l'outil analytique tandis que la complexité des problèmes réels exige, le plus souvent, le recours à des méthodes numériques [3,4].

Dans ce travail, on s'est penché sur le problème de fusion dans un milieu semi-infini rempli d'un matériau pur à changement de phase isotherme où la conduction unidimensionnelle 1D en régime transitoire est le seul mode de transfert de chaleur dans les phases solide et liquide.

2. Modélisation

2.1. Configuration géométrique

La configuration adoptée est schématisée sur la figure 1. Il s'agit d'un milieu semi-infini rempli d'un MCP. Ce dernier est complètement à l'état solide aux temps $t \leq 0$ et sa température T_0 est uniforme et constante qui peut être différente de la température de fusion T_{cp} ($T_0 \leq T_{cp}$). À l'instant $t > 0$, le côté gauche $X = 0$ du milieu semi-infini est soudainement soumis et maintenu à une température constante T_w , supérieure à la valeur

seuil T_{cp} . Par conséquent, le MCP reçoit de la chaleur à présent au niveau de la surface d'échange $X = 0$ et le phénomène de fusion du MCP solide se déclenche dès que la température d'équilibre solide-liquide T_{cp} est atteinte. Au fur et à mesure que le temps augmente, la phase liquide se développe et prend la place du solide engendrant ainsi le mouvement de l'interface solide-liquide dans le milieu semi-infini de l'origine $X = 0$ vers l'infini.

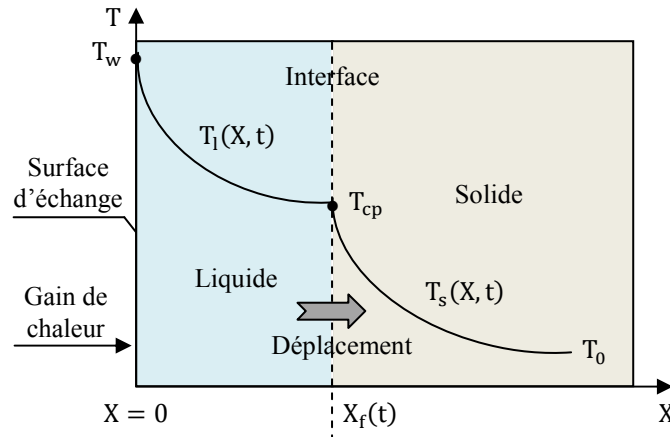


Figure 1 : Fusion d'un matériau pur confiné dans un milieu semi-infini et chauffé à l'origine $X = 0$

2.2. Hypothèses simplificatrices

Le modèle du changement de phase proposé ci-dessus prend en compte les hypothèses simplificatrices suivantes [3,5] :

- 1) Le MCP est parfaitement pur et le changement de phase est isotherme.
- 2) Le MCP est homogène et isotrope.
- 3) L'interface entre les phases solide et liquide du MCP est fine (surfactive).
- 4) Les propriétés thermophysiques du MCP sont constantes au sein des phases solide et liquide, mais elles peuvent être différentes d'une phase à l'autre, excepté les densités des deux phases qui sont prises égales.
- 5) La conduction est le seul mode de transfert de chaleur dans les deux phases solide et liquide.
- 6) La conduction dans le MCP est 1D et transitoire.

2.3. Mise en équations

Le transfert 1D et transitoire de chaleur couplé avec la fusion isotherme d'un matériau pur confiné dans un milieu semi-infini est décrit par une des formulations mathématiques les plus classiques du processus de changement de phase qui est celle appliquée au «problème de Stefan». Les variations de température pour les phases liquide et solide sont gouvernées par les équations de conservation d'énergie suivantes [5,6] :

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\alpha_l \frac{\partial T_l}{\partial X} \right), \quad 0 < X < X_f, \quad t > 0 \quad \text{phase liquide} \quad (1)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\alpha_s \frac{\partial T_s}{\partial X} \right), \quad X > X_f, \quad t > 0 \quad \text{phase solide} \quad (2)$$

où $\alpha = k/(\rho C_p)$ est la diffusivité thermique du MCP. Les indices l et s se réfèrent respectivement aux phases liquide et solide.

À l'interface solide-liquide, on a d'une part la continuité de la température :

$$T_l(X_f, t) = T_s(X_f, t), \quad X = X_f, \quad t > 0 \quad (3)$$

et d'autre part une discontinuité du flux de chaleur à cause du changement de phase. D'une manière globale, on peut dire que la somme algébrique des flux entrant et sortant est égale à l'énergie nécessaire à la fusion qui représente l'énergie instantanée absorbée sous forme d'enthalpie de changement d'état par la progression du front. Ceci se traduit par la condition de Stefan suivante :

$$k_s \frac{\partial T_s(X_f, t)}{\partial X} - k_l \frac{\partial T_l(X_f, t)}{\partial X} = \rho_l L \frac{\partial X_f}{\partial t}, X = X_f(t), t > 0 \quad (4)$$

où k représente la conductivité thermique du MCP, L est la chaleur latente du changement de phase et X_f est la position du front de fusion.

Conditions initiales à $t = 0$:

$$T_s(X, 0) = T_0 \text{ pour } 0 \leq X \leq \infty, X_f(0) = 0 \quad (5)$$

Conditions aux limites à $t > 0$:

$$T_l(X = 0, t) = T_w, T_l(X = X_f, t) = T_s(X = X_f, t) = T_{cp}, T_s(X \rightarrow \infty, t) = T_0 \quad (6)$$

Les propriétés thermophysiques utilisées dans le calcul (pas forcément réalistes) ainsi que les paramètres déterminants pour la fusion du MCP sont récapitulés comme suit [5] : $T_{cp} = 0^\circ\text{C}$, $k_l = k_s = 1 \text{ W/mK}$, $\rho C_{p_l} = \rho C_{p_s} = 10^6 \text{ J/m}^3\text{K}$ et $\rho L = 10^8 \text{ J/m}^3$. Le MCP est initialement ($t \leq 0$) à $T_0 = -10^\circ\text{C}$ alors que, au temps $t > 0$, la température du côté gauche est soudainement élevée et maintenue à $T_w = 10^\circ\text{C}$.

3. Solution analytique de Neumann

Ce problème de fusion admet sous cette forme une solution de similarité, dite de Neumann, une des solutions disponibles du problème de Stefan. En introduisant la variable de similarité $\eta = X/(2\sqrt{\alpha_l t})$ et en cherchant une solution sous la forme $T(X, t) = F(\eta)$, on trouve la solution analytique finale de Neumann qui peut être écrite comme suit [6,7] :

$$\frac{T_l(X, t) - T_w}{T_{cp} - T_w} = \frac{\text{erf}\left(\frac{X}{2\sqrt{\alpha_l t}}\right)}{\text{erf}(\xi)}, 0 < X < X_f, t > 0 \text{ phase liquide} \quad (7)$$

$$\frac{T_s(X, t) - T_0}{T_{cp} - T_0} = \frac{\text{erfc}\left(\frac{X}{2\sqrt{\alpha_s t}}\right)}{\text{erfc}(v\xi)}, X > X_f, t > 0 \text{ phase solide} \quad (8)$$

L'évolution temporelle de la position du front de fusion dans le milieu semi-infini est donnée par :

$$X_f(t) = 2\xi\sqrt{\alpha_l t} \quad (9)$$

Le paramètre ξ apparaissant dans les trois dernières équations est une constante donnée implicitement par l'équation transcendante :

$$\frac{St_l}{e^{\xi^2} \text{erf}(\xi)} - \frac{St_s}{vev^2\xi^2 \text{erfc}(v\xi)} = \xi\sqrt{\pi} \quad (10)$$

où erf et erfc sont respectivement les bien-connues fonction d'erreur et fonction d'erreur complémentaire et $v = \sqrt{\alpha_l/\alpha_s}$. $St_l = \rho C_{p_l}(T_w - T_{cp})/\rho L$ et $St_s = \rho C_{p_s}(T_{cp} - T_0)/\rho L$ sont les nombres adimensionnels de Stefan pour les deux phases liquide et solide respectivement.

Afin de pouvoir représenter graphiquement cette solution exacte de Neumann, une interpolation par collocation polynomiale de la fonction d'erreur et de la fonction d'erreur complémentaire est faite en ajustant au mieux la courbe polynomiale représentative sur les valeurs tabulées qui sont disponibles dans la littérature [8]. Le polynôme résultant est d'ordre 5 et s'écrit alors sous la forme :

$$\text{erf}(X) = a_0 + a_1X + a_2X^2 + a_3X^3 + a_4X^4 + a_5X^5 \quad (11)$$

où les coefficients a_i sont les suivants : $a_0 = -0,00401$, $a_1 = 1,18669$, $a_2 = -0,14559$, $a_3 = -0,33443$, $a_4 = 0,16069$ et $a_5 = -0,02155$. Le même polynôme a été utilisé pour la fonction d'erreur complémentaire

erfc(X) mais cette fois-ci les coefficients a_i prennent les valeurs : $a_0 = 1,00401$, $a_1 = -1,18669$, $a_2 = 0,14559$, $a_3 = 0,33445$, $a_4 = -0,1607$ et $a_5 = 0,02155$. La relation $\text{erfc}(X) = 1 - \text{erf}(X)$ est ainsi vérifiée.

Aussi, la racine ξ de l'équation non linéaire (10) est, tout d'abord, localisée dans l'intervalle $[A \sim B] = [0,01 \sim 3,0]$ puis obtenue à l'aide de l'algorithme itératif de dichotomie (bissection). Malgré sa vitesse de convergence relativement faible, cet algorithme a tout de même l'avantage d'être convergent. En adoptant, pour ce problème de fusion, les différents paramètres énumérés à la fin du paragraphe précédent (§2.3), le processus itératif de calcul de la solution ξ converge vers la valeur $\xi = 0,1879537$ une fois la longueur de l'intervalle de départ $[0,01 \sim 3,0]$ est réduit à une précision de $B - A \leq 10^{-7}$.

4. Méthode de résolution numérique

Le problème de fusion est régi par l'équation de conduction de Fourier dans chaque phase du MCP (équations 1 et 2) couplée, d'un côté, à la condition de Stefan à l'interface de changement de phase (équation 4) et, d'un autre côté, aux conditions initiales (5) et aux limites (6). Sa modélisation numérique fait appel à la méthode des volumes finis. La résolution numérique de ce problème 1D et transitoire est assurée par un code de simulation traitant des cas 2D où le schéma d'approximation de la "loi de puissance" est considéré, tout en fixant une longueur infiniment petite dans la 2^{ème} direction. La linéarisation des équations différentielles aux dérivées partielles gouvernantes (1) et (2) donne le système d'équations algébriques suivant pour la variable T au nœud P : $a_P T_P = \sum a_{nb} T_{nb} + b$. L'ensemble de ces équations algébriques est résolu itérativement par la méthode ligne par ligne à laquelle est associé l'algorithme TDMA. Un maillage fixe et uniforme de 300 nœuds dans la direction axiale est utilisé sur une longueur finie de $XL = 30\text{cm}$ du domaine de calcul avec un pas constant de $\Delta X = 0,30 / (300 - 2) = 1,01\text{mm}$. Le pas du temps employé est fixé à $\Delta t = 0,34\text{s}$. À noter que ces pas spatial et temporel ainsi que les nombres de nœuds et d'itérations sont choisis minutieusement de sorte que le modèle numérique proposé puisse fournir une solution aussi précise que possible au problème de fusion. Quant à l'équation (4) du bilan thermique à l'interface solide-liquide, elle s'écrit après discrétisation :

$$X_f^1 = X_f^0 + \frac{\Delta t}{2\Delta X} \cdot \left[\frac{k_s}{\rho_l L} \cdot (-T_{I+2}^1 + 4T_{I+1}^1 - 3T_I^1) - \frac{k_l}{\rho_l L} \cdot (3T_I^1 - 4T_{I-1}^1 + T_{I-2}^1) \right] \quad (12)$$

Dans cette dernière équation linéaire, on a utilisé un schéma totalement implicite pour la discrétisation temporelle et une combinaison des différences finies progressives (à droite) et régressives (à gauche) avec une précision d'ordre deux au nœud I changeant de phase pour la discrétisation spatiale. Pour rappel, les exposants ⁽¹⁾ et ⁽⁰⁾ s'associent respectivement aux itérations actuelle et précédente pour un pas du temps donné.

5. Résultats et discussion

Le travail numérique a été mis en œuvre pour simuler les transferts de chaleur couplés avec le changement d'état dans le cas d'un milieu semi-infini rempli d'un matériau pur à changement de phase (point du changement de phase : $T_{cp} = 0^\circ\text{C}$) préalablement à l'état solide. À l'instant $t \leq 0$, une température constante $T_0 \leq T_{cp}$ est imposée au MCP tandis qu'en $t > 0$, le côté gauche $X = 0$ du milieu semi-infini est soudainement chauffé et maintenu à une température constante aussi T_w supérieure à la température de fusion du MCP choisi. Ce dernier subit ainsi une fusion isotherme. En simulant ce phénomène de fusion, on cherche, en fait, une solution qui consiste à déterminer, au cours du temps, le champ de température dans les phases solide et liquide, ainsi que la position du front de fusion par rapport à la surface d'échange.

Ce problème simple de changement de phase a été résolu par volumes finis. Lors de la simulation numérique du modèle présenté, la précision obtenue a été vérifiée en comparant les résultats numériques avec la solution analytique exacte de Neumann comme le montrent les figures 2, 3, 4 et 5. Il apparaît que des pas spatial et temporel constants de $\Delta X = 1,01\text{mm}$ et $\Delta t = 0,34\text{s}$, respectivement, donnent une précision satisfaisante. En effet, compte tenu des erreurs commises sur les calculs de la position du front de fusion ainsi que de la température qui sont constatées sur ces figures, on peut conclure que la concordance est même très bonne.

Sur les figures 2 et 3, on a représenté l'évolution de la position du front de fusion en fonction du temps pour deux valeurs différentes de la température initiale du MCP considéré à savoir $T_0 = 0^\circ\text{C} = T_{cp}$ (modèle à une phase) et $T_0 = -10^\circ\text{C} < T_{cp}$ (modèle à deux phases) [7] et deux valeurs différentes de la conductivité thermique du même MCP dans le cas où $k_1 = k_s = k$ à savoir $k = 1\text{ W/mK}$ et $k = 2\text{ W/mK}$. La position de l'interface solide-liquide dans le milieu semi-infini est déterminée en exprimant en cette interface que le flux de

chaleur cédée par le matériau liquide moins le flux de chaleur transmis par conduction dans le matériau solide est égal au flux de chaleur latent de fusion mis en jeu pour le changement de phase. À cause du flux thermique reçu à la surface d'échange, on constate près de celle-ci dès les dix premières minutes, l'apparition d'un front de fusion dans le milieu semi-infini qui progresse en son sein de $X = 0$ vers l'infini. Il est clair que la vitesse de propagation du front de fusion dans le MCP est plus importante pour $T_0 = T_{cp}$ que dans le cas $T_0 = -10^\circ\text{C} < T_{cp}$ (figure 2). La même tendance est constatée sur la figure 3 en faisant varier la conductivité thermique. En effet, l'augmentation de cette dernière grandeur entraîne une augmentation de la vitesse de déplacement de l'interface solide-liquide au sein du MCP. Néanmoins ces deux figures permettent de constater que la vitesse de déplacement du front de fusion ainsi que le taux de production du liquide sont plutôt très sensibles à la conductivité thermique k mais un peu moins sensibles à la température initiale T_0 .

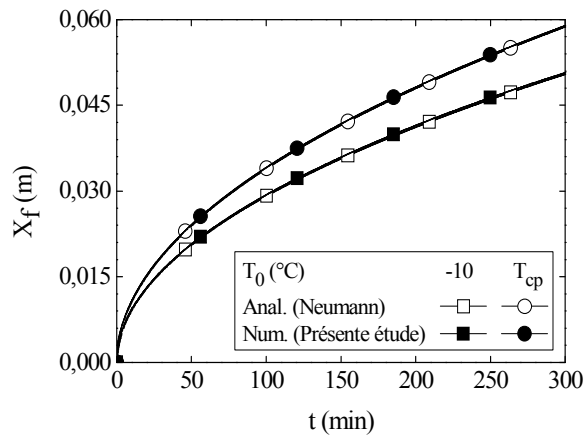


Figure 2 : Effet de la température initiale du MCP sur l'avancement du front de fusion dans le milieu semi-infini pour $k = 1 \text{ W/mK}$

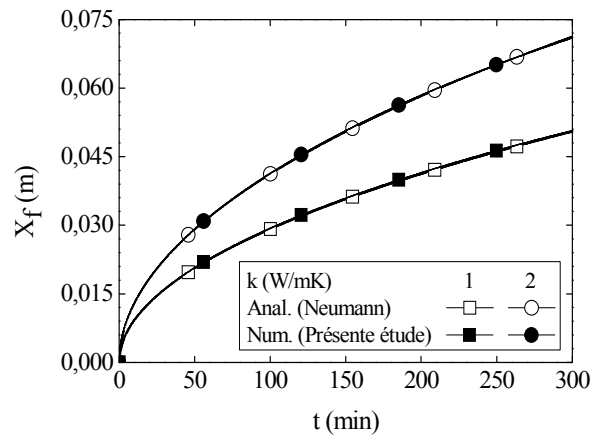


Figure 3 : Effet de la conductivité thermique du MCP sur l'avancement du front de fusion dans le milieu semi-infini pour $T_0 = -10^\circ\text{C}$

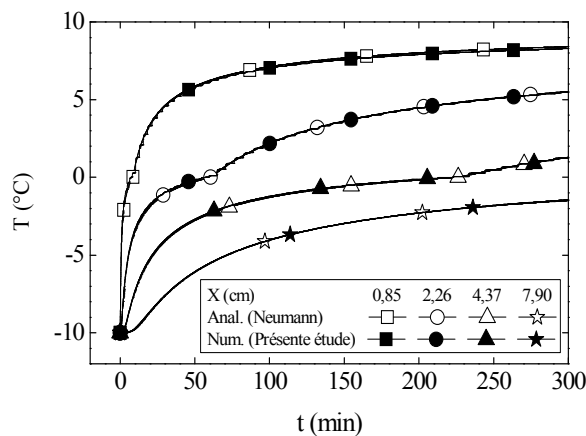


Figure 4 : Évolution de la température du MCP au cours du temps pour différentes positions axiales avec $k = 1 \text{ W/mK}$ et $T_0 = -10^\circ\text{C}$

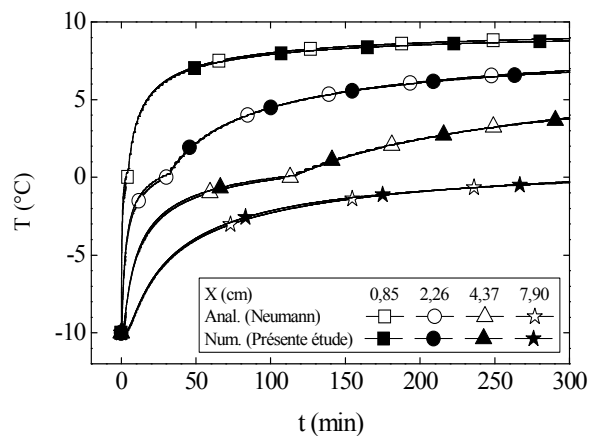


Figure 5 : Évolution de la température du MCP au cours du temps pour différentes positions axiales avec $k = 2 \text{ W/mK}$ et $T_0 = -10^\circ\text{C}$

L'évolution au cours du temps de la température du MCP est illustrée sur les figures 4, 5 et 6 pour différentes positions axiales et deux valeurs différentes de la conductivité thermique du matériau considéré. On constate que plus l'interface solide-liquide s'éloigne de la surface d'échange $X = 0$ pendant le changement de phase, le palier correspondant au processus de transfert thermique dans le matériau fondant est plus grand. D'autre part, ces figures montrent aussi que plus la conductivité thermique du matériau diminue plus la température de ce dernier met du temps pour atteindre la température imposée à la surface d'échange.

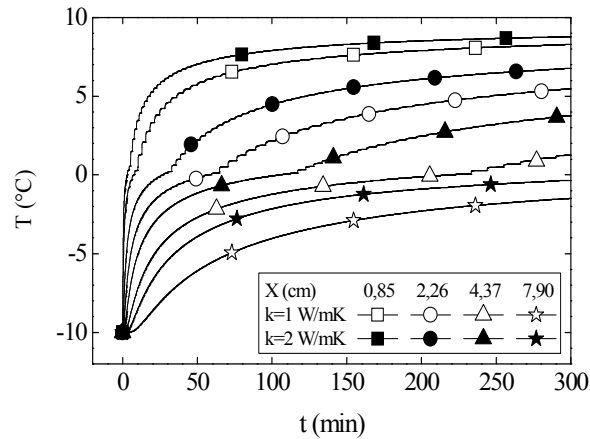


Figure 6 : Évolution de la température du MCP au cours du temps pour différentes positions axiales et deux valeurs différentes de la conductivité thermique avec $T_0 = -10^\circ\text{C}$

Conclusions et perspectives

Les résultats de validation obtenus montrent que le modèle numérique présenté, traitant le changement de phase isotherme solide-liquide en mode conductif 1D dans un milieu semi-infini, permet de prédire de façon très satisfaisante l'évolution temporelle aussi bien de la température dans les phases solide et liquide que de la position du front de fusion. Ce modèle de changement de phase peut constituer un outil important et fiable de validation des codes de calcul pour les chercheurs malgré sa simplicité. Le modèle simplifié est à présent en cours d'adaptation pour étudier des phénomènes de changement de phase solide-liquide en mode convectif (convection naturelle) 2D dans des configurations plus complexes.

Nomenclature

C_p	chaleur massique à $P = \text{cte}$, J/kgK
1D	unidimensionnel
2D	bidimensionnel
erf	fonction d'erreur
erfc	fonction d'erreur complémentaire
k	conductivité thermique, W/mK
L	chaleur latente de fusion, J/kg
MCP	matériau à changement de phase
St	nombre de Stefan
t	temps, s
T	température, K
X	coordonnée spatiale, m
X_f	position du front de fusion, m

Symboles grecs

α	diffusivité thermique, $m^2.s^{-1}$
----------	-------------------------------------

Δ	différence, variation
η	variable de similarité $X/(2\sqrt{\alpha t})$
ν	quantité $\sqrt{\alpha_l/\alpha_s}$
ξ	solution de l'équation transcendante (10)
ρ	masse volumique, $kg.m^{-3}$

Exposant, Indices

cp	changement de phase
s	solide
l	liquide
f	fusion
w	surface d'échange à $X = 0$
1	itération actuelle
0	itération précédente, état initial à $t \leq 0$

Références

- [1] B. Binet, Étude de la fusion dans des enceintes munies de sources de chaleur discrètes, Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, 1998.
- [2] M. Ahmad, Nouveaux composants actifs pour la gestion énergétique de l'enveloppe légère des bâtiments. Couplage matériaux à changement de phase, super-isolation, apports solaires, Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier, 2004.
- [3] K. El Omari, Étude de la convection autour d'un nodule sphérique contenant un matériau à changement de phase au cours de sa cristallisation, Thèse de Doctorat, Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2001.

- [4] F.C. Cavalcanti, Caractérisation thermique de produits de l'état liquide à l'état solide, Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2006.
- [5] A. Laouadi, Transfert de chaleur dans un matériau à changement de phase : Application au stockage cyclique d'énergie électrique, Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, 1996.
- [6] H. Hu, S.A. Argyropoulos, Mathematical modelling of solidification and melting : A review, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 4, 371-396, 1996.
- [7] A.C. Boucíguez, R.F. Lozano, M.A. Lara, About the exact solution in two phase-Stefan problem, Engenharia Termica (Thermal Engineering), 6 (2), 70-75, 2007.
- [8] J.F. Sacadura, Initiation aux transferts thermiques, Tec. & Doc. (Lavoisier), Imprimerie Bayeusaine, France, 1982.
- [9] L. Mansouri, M. Balistrou, B. Baudoin, Simulation numérique par volumes de contrôle du processus de solidification en milieu semi-infini avec transfert de chaleur purement conductif, Actes du 3^{ème} Colloque International Francophone d'Énergétique et Mécanique CIFEM, Moroni, Comores, ART-5-14, 2014.

25-27 Octobre 2017
Monastir - Tunisie