



Transfert de chaleur lors la solidification d'un matériau organique à changement de phase

Mounir BOUTELDJA¹, Abdelghani LAOUER², El Hacene MEZAACHE³, Belkacem ZEGHMATI⁴
^{1,3}Laboratoire de Physico-chimie des Surfaces et Interfaces, Université de Skikda, BP. 26, Skikda 21000, Algérie
²Département de Physique, Université de Jijel, BP 98, Jijel, 18000, Algérie
⁴Laboratoire de Mathématiques et Physique, Université de Perpignan, France

bouteldjamounir@yahoo.fr, a_laouar@univ-jijel.dz, e_mezaache@yahoo.fr, Zeghmati@univ-perp.fr

Résumé : Une étude théorique et numérique du transfert de chaleur lors de la solidification d'un matériau à changement de phase contenu dans une cavité rectangulaire est présentée. Le fluide est un matériau organique généralement utilisé en tant que matériau régulateur de la température dans le domaine de l'habitat. Les parois verticales gauche et droite de la cavité sont maintenues respectivement aux températures chaude et froide tandis que les autres parois sont adiabatiques. Le modèle mathématique repose sur une approche bidimensionnelle basée sur la formulation enthalpique. Les équations couplées régissant les transferts par conduction, convection et changement de phase sont discrétisées à l'aide de la méthode des volumes finis. Un programme de calcul a été élaboré et une étude numérique utilisant les paramètres de contrôle du phénomène physique, à savoir le nombre de Grashof est réalisée afin d'explorer les mécanismes de transfert et la cinétique de la solidification. Les résultats obtenus montrent que la convection naturelle influence considérablement le transfert de chaleur ainsi que la cinétique de la solidification.

Mots-clés : MCP, solidification, front de solidification, conduction, convection naturelle, transition de phase, modélisation, solution numérique, méthode enthalpique.

1. Introduction

Le changement de phase de matériaux soumis à des contraintes thermiques intervient dans de nombreux domaines. En métallurgie : solidification et fusion des métaux purs et des alliages [1] ; en industries électroniques : fabrication des composants [2] ; dans l'habitat : isolation thermique [3-5], et en climatisation passive par stockage thermique du froid et de la chaleur [6-9]. Les matériaux à changement de phase (MCP) sont utilisés pour stocker de la chaleur dans différents secteurs de l'industrie ou intégrés dans l'enveloppe d'un habitat [10-13].

Sur le plan théorique et numérique, de nombreuses investigations ont porté sur la modélisation de la solidification d'un matériau notamment le MCP en se basant sur une approche de conduction thermique [14-16].

Le présent travail numérique a pour objectif l'étude de l'influence de la convection naturelle sur la cinétique de la solidification. Le modèle mathématique utilisé repose sur une approche bidimensionnelle basée sur la formulation enthalpique, tenant compte de la conduction thermique, de la convection et du changement de phase.

2. Système physique

Le système considéré est une cavité carrée de longueur L et de hauteur H , contenant un matériau organique à changement de phase, référencé le RT27 (Tableau 1). Les parois verticales de l'enceinte sont isothermes et soumises respectivement aux températures chaude T_h et froide T_c , dont les valeurs sont respectivement inférieure et supérieure à la température de fusion T_m ($T_c < T_m < T_h$). Par ailleurs, les deux parois horizontales sont adiabatiques (figure1).

Tableau 1 : Propriétés thermo physiques du matériau organique simulé : le RT27 [13]

Propriétés du MCP	Symbole	État solide (s)	État liquide (l)	Unité
Capacité calorifique	C	2,4	1,8	kJ/kg K
Conductivité thermique	k	0,15	0,24	W/m K
Masse volumique	ρ	760	870	kg/m ³
Viscosité dynamique	μ	$3,2 \times 10^{-3}$		kg/m s
Coefficient d'expansion thermique	β	$0,5 \times 10^{-3}$		K ⁻¹
Température de solidification	T_m	301,15 à 303,15		K
Chaleur latente	ℓ	179		kJ/kg

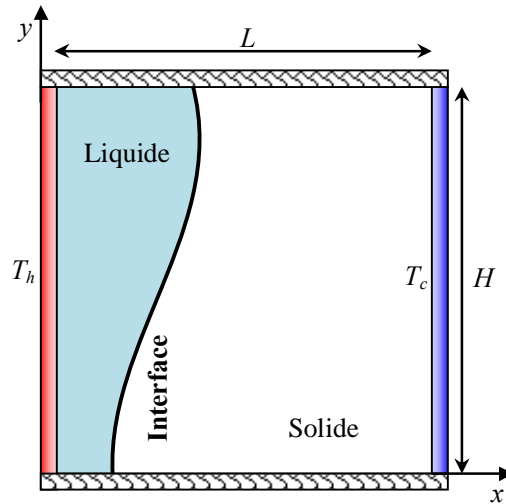


Figure 1 : Géométrie du problème physique.

3. Formulation mathématique

3.1. Hypothèses simplificatrices

Dans cette étude, les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et de l'énergie sont simplifiées en tenant compte des hypothèses suivantes : i. l'écoulement est bidimensionnel. ii. le fluide est newtonien. iii. les propriétés physiques de chaque phase solide ou liquide sont constantes. iv. la dissipation visqueuse est négligeable. v. l'approximation de Boussinesq est valable : la masse volumique est supposée constante dans tous les termes des équations de quantité de mouvement, sauf dans le terme de gravité suivant y , où elle est exprimée par :

$$\rho = \rho_o [1 - \beta(T - T_c)] \quad (1)$$

3.2. Méthode enthalpique

Cette méthode, appliquée dans la présente étude, est bien adaptée à la détermination de la position de l'interface solide-liquide, la connaissance des domaines physiques occupés par chacune des phases liquide et solide, ainsi que la cinétique de la solidification. Elle est décrite en détail dans la littérature [17].

3.3. Equations adimensionnelles [2]

3.3.1. Grandeurs de référence

$$L_r = H ; V_r = v/L_r ; t_r = L_r^2/v ; p_r = \rho V_r^2 \quad (2)$$

$$\Delta T_r = T_h - T_c ; \Delta h_r = h_h - h_c \quad (3)$$

3.3.2. Variables adimensionnelles

$$X = \frac{x}{L_r} ; Y = \frac{y}{L_r} ; \tau = \frac{t}{t_r} ; U = \frac{u}{V_r} ; V = \frac{v}{V_r} \quad (4)$$

$$\theta = \frac{(T - T_c)}{\Delta T_r} ; \hbar = \frac{(h - h_c)}{\Delta h_r} ; P = \frac{p}{p_r} \quad (5)$$

3.3.3. Nombres adimensionnels

$$Gr = \frac{\rho g \beta (T_h - T_c) H^3}{\nu^2} ; Pr = \frac{\nu}{\alpha_l} ; K = \frac{k_s}{k_l} ; C = \frac{c_l}{c_s} \quad (6)$$

3.3.4. Equations de transfert

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} + \frac{\partial(UU)}{\partial X} + \frac{\partial(UV)}{\partial Y} = -\frac{\partial P}{\partial X} + \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \right) + S_U \quad (8)$$

$$\frac{\partial V}{\partial \tau} + \frac{\partial(VU)}{\partial X} + \frac{\partial(VV)}{\partial Y} = -\frac{\partial P}{\partial Y} + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} \right) + Gr\theta + S_V \quad (9)$$

$$\frac{\partial \hbar}{\partial \tau} + \frac{\partial(U\hbar)}{\partial X} + \frac{\partial(V\hbar)}{\partial Y} = \frac{C}{Pr} \left[\frac{\partial}{\partial X} \left(K \frac{\partial \hbar}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(K \frac{\partial \hbar}{\partial Y} \right) \right] + \frac{C}{Pr} \left\{ \frac{\partial}{\partial X} \left[K \frac{\partial(\hbar_s - \hbar)}{\partial X} \right] + \frac{\partial}{\partial Y} \left[K \frac{\partial(\hbar_s - \hbar)}{\partial Y} \right] \right\} \quad (10)$$

Où les termes sources de Darcy S_U et S_V sont représentés respectivement par les équations de Carman-Kozeny suivantes [14]:

$$S_U = -\zeta \frac{(1 - f_l)^2}{(f_l^3 + \varepsilon)} U \quad (11)$$

$$S_V = -\zeta \frac{(1 - f_l)^2}{(f_l^3 + \varepsilon)} V \quad (12)$$

$$\zeta = \frac{\xi H^2}{\nu \rho_o} \quad (13)$$

Où les quantités ξ et ε ont une grande utilité numérique dans la région où le volume de contrôle est occupé par la phase solide ($f_l \rightarrow 0$). La valeur choisie pour ξ est très grande pour l'annulation de la vitesse, quant à la valeur choisie pour ε est très faible pour éviter la division par zéro. Les valeurs utilisées par différents auteurs [14] : $\xi = 10^6 \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$, $\varepsilon = 10^{-3}$.

En se basant sur la méthode enthalpique, la fraction liquide f_l est exprimée par:

$$f_l = \begin{cases} 0 & h \leq c_s T_m & \text{(phase solide)} \\ (h - c_s T_m) / \ell & \text{Si } c_s T_m < h < c_s T_m + \ell & \text{(interface)} \\ 1 & h \geq c_s T_m + \ell & \text{(phase liquide)} \end{cases} \quad (14)$$

3.4. Conditions initiales et aux limites

Pour $\tau = 0$:

$$U = 0; V = 0; \theta = 1; \hbar = 1 \quad (15)$$

Pour $\tau > 0$:

$$X = 0 : U = 0; V = 0; \theta = 1; \hbar = 1 \quad (16)$$

$$X = 1 : U = 0; V = 0; \theta = 0; \hbar = 0 \quad (17)$$

$$Y = 0 : U = 0; V = 0; \frac{\partial \theta}{\partial Y} = 0; \frac{\partial \hbar}{\partial Y} = 0 \quad (18)$$

$$Y = 1 : U = 0; V = 0; \frac{\partial \theta}{\partial Y} = 0; \frac{\partial \hbar}{\partial Y} = 0 \quad (19)$$

4. Simulation numérique

Le modèle mathématique adopté dans cette étude explore le phénomène de la convection naturelle dans la région liquide et la conduction dans la phase solide décrite, par un système d'équations aux dérivées partielles, elliptiques, non linéaires et couplées. La résolution par voie analytique est limitée aux cas simples et unidimensionnels. Aussi, le recours aux méthodes numériques est indispensable. Citons parmi les méthodes numériques de discrétisation : la méthode des différences finies, des éléments finis et des volumes finis. La méthode retenue dans cette étude est celle des volumes finis. Les équations de bilan (7-10) sont exprimées localement sous une forme intégrale. L'un des principaux avantages de la méthode des volumes finis est d'assurer une conservation intégrale exacte des grandeurs quelle que soit la taille du maillage et elle est largement utilisée pour la résolution des phénomènes gouvernés par des équations à dérivées partielles. Elle permet aussi un traitement plus correct des milieux hétérogènes et facilite la linéarisation des termes sources [15-17].

Dans le cadre de ce travail, un programme de calcul a été élaboré en langage Fortran. Les résultats des calculs sont validés numériquement [18].

5. Résultats et discussions

L'étude numérique vise la détermination du front de solidification ainsi que la visualisation de l'écoulement de convection naturelle lors de la solidification d'un matériau à changement de phase contenu dans une cavité carrée. Le front de solidification, les isothermes θ , et les lignes de courant sont déterminés en fonction du nombre de Grashof, caractérisant l'écoulement dans la phase liquide. Les conditions de calcul sont les suivantes : $T_c = 27^\circ\text{C}$, $T_m = 29^\circ\text{C}$, $T_h = 37^\circ\text{C}$.

Initialement, l'enceinte est maintenue à une température supérieure à la température de changement de phase, égale à la température de la surface chaude. Cet état d'équilibre initial subit une évolution temporelle en imposant les conditions aux limites thermiques extérieures. Le système physique évolue alors, vers un nouvel état d'équilibre traduisant la stabilité du système. La discussion et l'analyse des résultats ont été développées pour un domaine d'investigation du nombre de Grashof comportant les valeurs $\text{Gr} = 10^4$, $\text{Gr} = 5 \times 10^5$, $\text{Gr} = 10^6$, $\text{Gr} = 5 \times 10^6$.

Les résultats numériques obtenus concernant la structure de la fraction liquide, les contours des lignes de courant adimensionnelles, et les isothermes. Elles sont illustrées par les figures 3, 4 et 5.

Les isothermes sont schématisées par les figures 3(a), (b), (c) et (d). La condition adiabatique imposée aux parois horizontales est bien illustrée. En effet, chaque isotherme intercepte la frontière adiabatique à angle droit. Au voisinage des parois chaude et froide, la température devient de plus en plus uniforme à cause des conditions isothermes imposées aux limites verticales. Les isothermes proches de la paroi froide sont constituées par des lignes presque droites, parallèles à cette paroi. Ainsi, le transfert de chaleur est de nature conductif. Dans la zone fluide : $0 < X < 0.8$, la courbure des isothermes, principalement pour $Gr = 5 \times 10^5$ à $Gr = 5 \times 10^6$ illustre en toute évidence, l'effet important de la convection naturelle.

On note également que l'augmentation du nombre de Grashof a pour effet d'accroître la déformation des isothermes, surtout au voisinage de l'interface (solide/liquide). Par ailleurs, la région proche de la paroi froide (partie solide), est caractérisée par un gradient de température relativement faible par rapport à celui dans la partie liquide. Avec l'augmentation du nombre de Grashof de 10^4 à 5×10^6 , le transfert convectif de l'écoulement domine dans la cavité. Cet effet de la convection naturelle est nettement remarquable sur les isothermes ayant tendance à modifier leurs allures (figures 3 (a), (b), (c) et (d)).

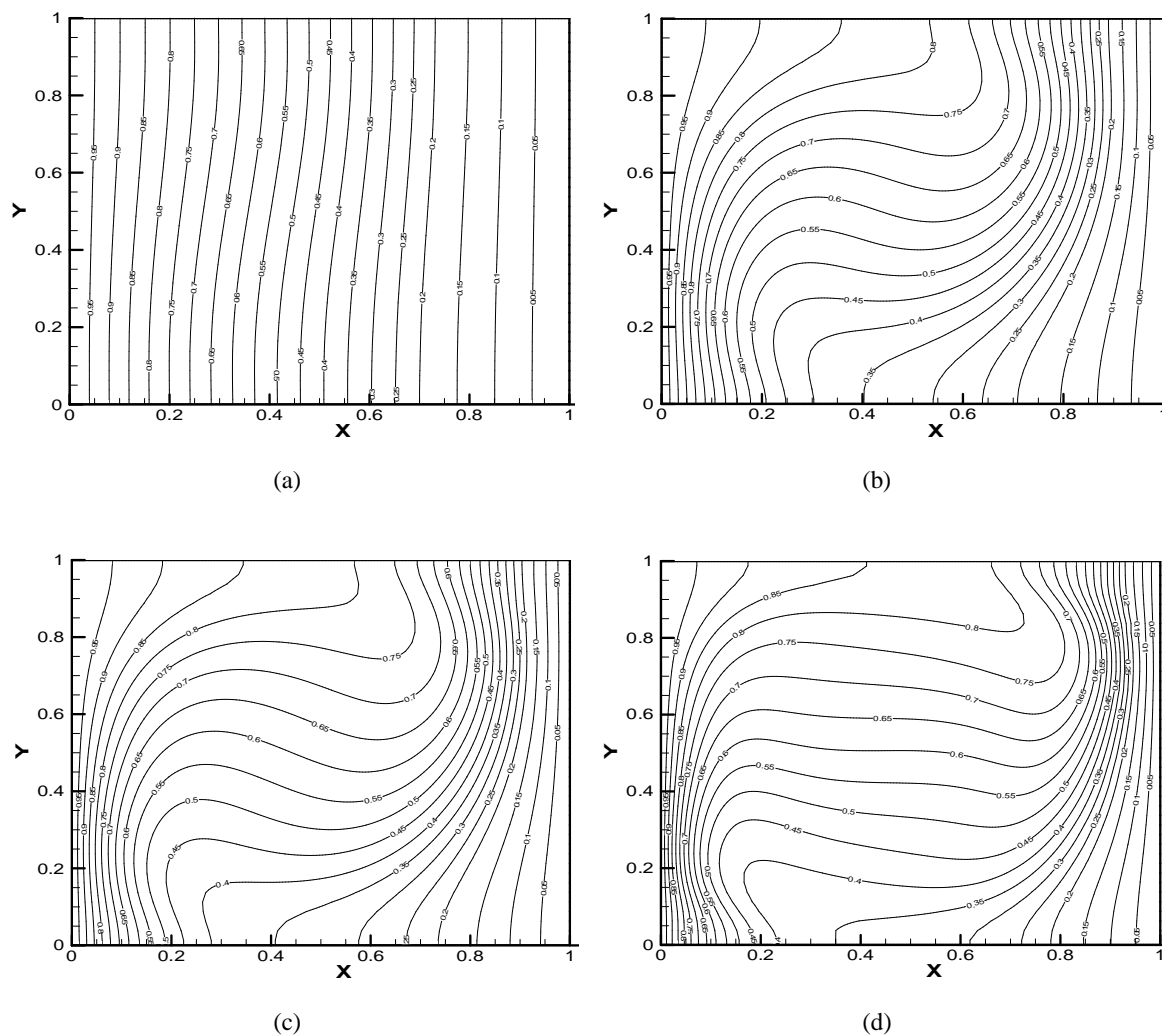


Figure 3 : Structure des isothermes adimensionnelles pour différentes valeurs du nombre de Grashof (a) $Gr = 10^4$, (b) $Gr = 5 \times 10^5$, (c) $Gr = 10^6$ et (d) $Gr = 5 \times 10^6$

Pour les contours de la fonction de courant illustrés par les figures 4 (a) et (b), une structure unicellulaire naissante pour le nombre de Grashof, $Gr = 10^5$, dont le maximum $|\varphi_{\max}|=5.5$ est située au centre de la partie liquide de la cavité ($0.3 \leq X \leq 0.5$). L'augmentation du nombre de Grashof, de 10^5 à 5×10^6 , provoque un élargissement de la structure unicellulaire de l'écoulement. On remarque aussi que l'écoulement s'effectue de la région chaude (paroi chaude) vers la région froide (phase solide). Ces cellules engendrent ainsi un mouvement de recirculation et un transport convectif important situé au centre de chacune d'elles. Ces processus peuvent être expliqués par l'augmentation du débit qui entraîne l'atténuation des trajectoires des particules.

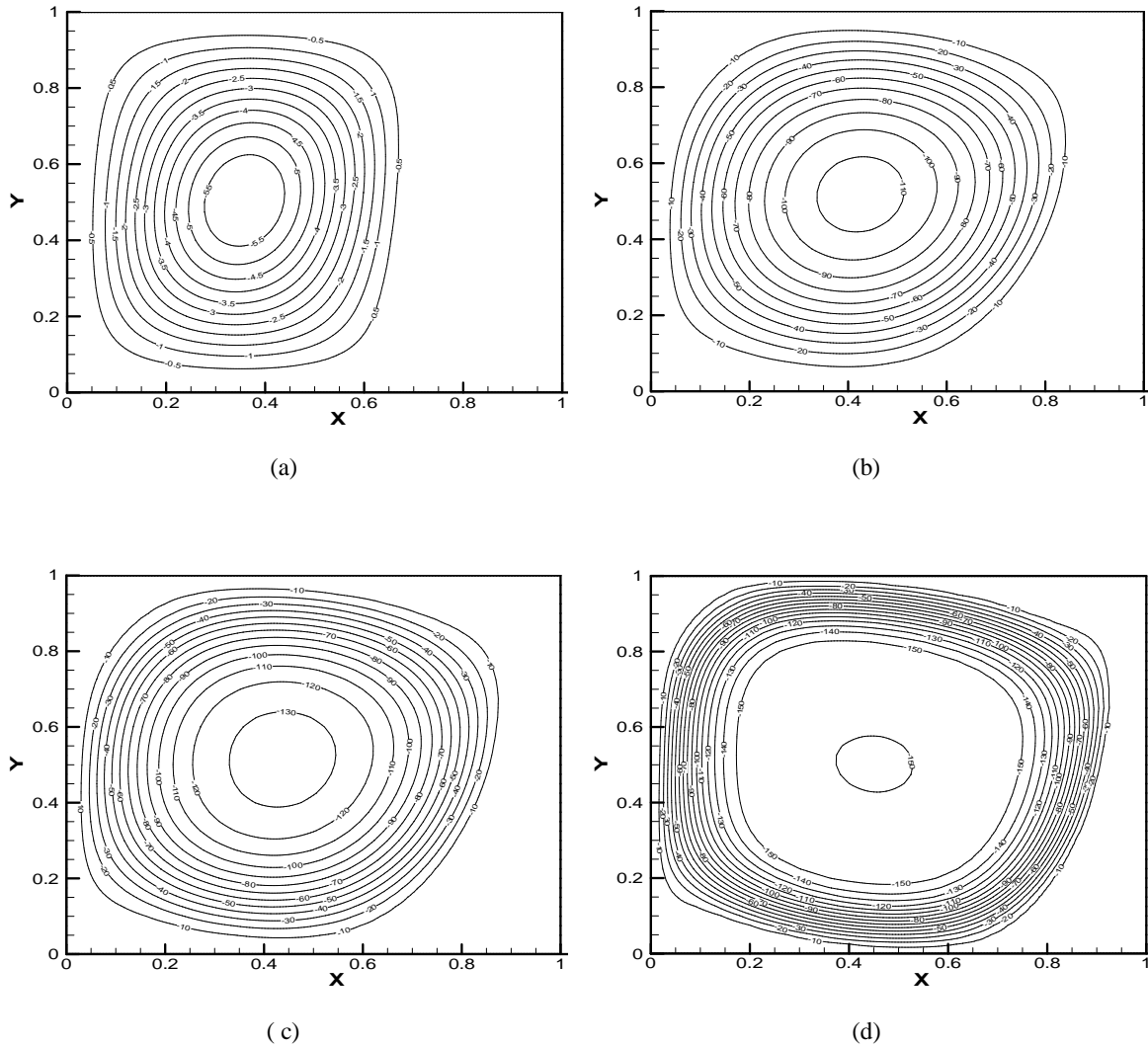


Figure 4 : Structure des lignes de courant adimensionnelles pour différentes valeurs du nombre de Grashof
(a) $Gr=10^4$, (b) $Gr = 5 \times 10^5$, (c) $Gr = 10^6$ et (d) $Gr = 5 \times 10^6$

Pour les différents nombre de Grashof de 10^4 à 5×10^6 , comme le montrent les figures 4 (a), (b), (c) et (d), l'effet de la convection naturelle influe directement sur la forme de l'interface en entraînant une déformation marquée dans le bas de la cavité.

A l'interface, la concentration des lignes de la fraction liquide, désignant l'interface liquide-solide, dans un intervalle très petit, montre que le gradient d'enthalpie à l'interface est très important et égale à la chaleur latente de fusion. Loin de l'interface, le gradient devient très faible (presque négligeable). L'interface peut être représentée par l'isotherme $T=302,15$ K (température de solidification) dont sa valeur adimensionnelle est égale à 0.2 étant donné que le RT 27 est le matériau considéré dans notre étude.

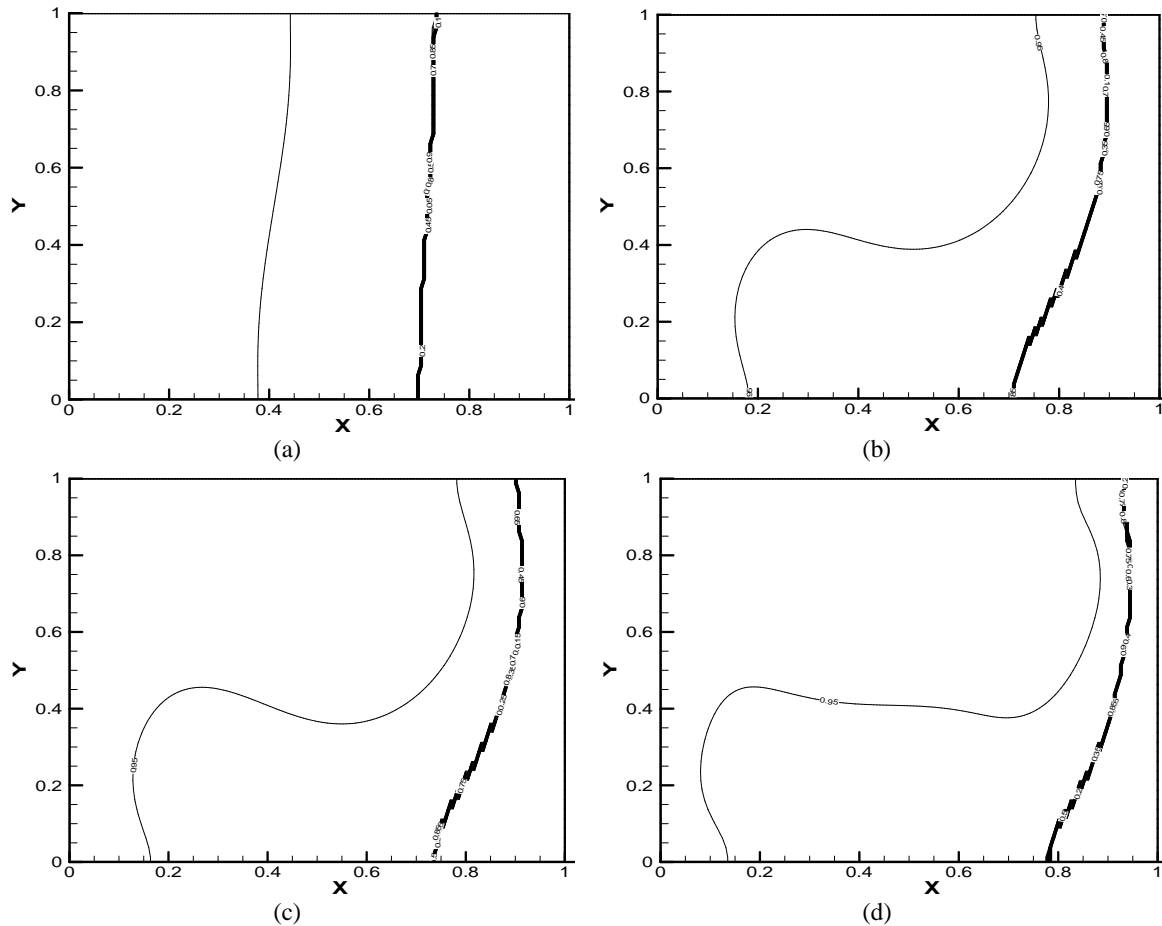


Figure 5 : Structure de la fraction liquide pour différentes valeurs du nombre de Grashof
 (a) $Gr=10^4$, (b) $Gr = 5 \times 10^5$, (c) $Gr = 10^6$ et (d) $Gr = 5 \times 10^6$

Conclusion

Une modélisation basée sur la formulation porosité-enthalpie, tenant compte des modes de transfert conductif et convectif, est appliquée à l'étude du transfert de chaleur par changement de phase d'un matériau contenu dans une cavité carrée. L'influence de la convection naturelle sur la solidification d'un MCP contenue dans une cavité est investie numériquement. Les résultats obtenus ont montré que le retard à la cinétique de la solidification est d'autant plus important que le nombre de Grashof est élevé. Cette étude montre également que l'approche physique basée sur un modèle purement conductif reste donc limitée aux cas de faibles valeurs du nombre de Grashof. Des perspectives peuvent être envisagées, notamment, l'influence du facteur d'aspect de la cavité et la nature du matériau.

Nomenclature

C rapport des chaleurs spécifiques
 c_l chaleur spécifique du liquide, J/kg K
 c_s chaleur spécifique du solide, J/kg K
 f_l fraction adimensionnelle du liquide
 g accélération gravitationnelle, m/s^2
 Gr nombre de Grashof
 h enthalpie massique, J/kg
 \hat{h} enthalpie adimensionnelle
 H hauteur de la cavité, m
 k conductivité thermique, W/m K
 K rapport des conductivités thermiques
 ℓ chaleur latente de solidification, J/kg

u composante de la vitesse suivant x , m/s
 U composante de la vitesse adimensionnelle suivant x
 v composante de la vitesse suivant y , m/s
 V composante de la vitesse adimensionnelle suivant y
 x coordonnée cartésienne suivant l'horizontale, m
 X coordonnée cartésienne adimensionnelle suivant x
 y coordonnée cartésienne suivant la verticale, m
 Y coordonnée cartésienne adimensionnelle suivant y
Symboles Grecs
 α diffusivité thermique, m^2/s
 β coefficient d'expansion thermique, K^{-1}
 θ température adimensionnelle

L	longueur de la cavité, m	ν	viscosité cinématique, m^2/s
p	pression, Pa	ρ	masse volumique, kg/m^3
P	pression adimensionnelle	τ	temps adimensionnel
Pr	nombre de Prandtl		
S_U	terme source de l'équation du mouvement (8)	Indices	
S_V	terme source de l'équation du mouvement (9)	c	froid
t	temps, s	h	chaud
T	température, K	l	liquide
T_c	température de la paroi froide, K	m	solidification
T_h	température de la paroi chaude, K	s	solide
T_m	température de solidification, K	r	référence

Références

- [1] C. Gau, R. Viskanta, Melting and solidification of pure metal on a vertical wall, *Journal of Heat Transfer*, vol. 108, pp.174-181, 1986.
- [2] R. Bessaïh, S. Bouabdallah, Numerical study of oscillatory natural convection during solidification of a liquid metal in a rectangular enclosure with and without magnetic field, *Numerical Heat Transfer, Part A*, 54: 331-348, Taylor & Francis Group, 2008.
- [3] O. Arfi, E. Mezaache, Etude numérique du problème de transfert thermique instationnaire dans un mur d'habitat bicouches contenant un matériau à changement de phase, *The 3rd International Seminar on New and Renewable Energies*, 2014.
- [4] O. Arfi, E. Mezaache, Transfert thermique instationnaire dans un mur tri-couches subissant un changement de phase par solidification, *Sciences & Technologie A*, 17-25, 2014.
- [5] R. Chebbah, E. Mezaache, S. Laouar, Etude de la régulation de la température d'une cavité équipée d'un échangeur à matériau à changement de phase, *Actes de la 2^{ème} Conférence Internationale de Mécanique (ICM05)*. Constantine, Algérie, 2015.
- [6] M. Teggat, E. Mezaache, Numerical investigation of total solidification time of a liquid phase change material enclosed in rectangular cavities, *International Review of Physics* 6 (2), 158-164, 2012
- [7] M. Teggat, E. Mezaache, Numerical investigation of a PCM heat exchanger for latent cool storage, *Energy Procedia* 36, 1310-1319, 2013
- [8] M. Teggat, E. Mezaache, Heat transfer analysis during heat recovery in cylindrical latent thermal storage unit, *International Journal of Heat and Technology*, 191-196, 2014
- [9] V. Morisson, M. Rady, E. Palomo, E. Arquis, Systèmes de stockage d'énergie thermique couplés à la production d'électricité par des technologies solaires thermodynamiques. *Récents Progrès en Génie des Procédés*, 92, 2005.
- [10] K. Ismail, R. Moraes, A numerical and experimental investigation of different containers and PCM options for cold storage modular units for domestic applications, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 52, pp. 4195-4202, 2009.
- [11] M. Teggat, E. Mezaache, A. Benchatti, B. Zeghmatti, Comparative study of heat transfer during solidification of phase change materials inside three different capsules, *International Journal of Heat and Technology* 28 (2), 19-24, 2010.
- [12] M. Teggat, E. Mezaache, Study of heat transfer during solidification of phase change material inside capsules, *ICHMT Digital Library Online*, 2008.
- [13] V. Dubovsky, E. Assis, E. Kochavi, G. Ziskind, R. Letan, Study of solidification in vertical cylindrical shells, *5th European Thermal-Sciences Conference*, The Netherlands, 2008.
- [14] H. Murakami, Modelling of turbulent flow heat transfer and solidification in a twin roll caster, *PhD thesis, McGill University*, Canada, 1993.
- [15] S. Kim, S. Anghaie, G. Chen, A Fixed-Grid two-phase numerical model for convection-dominated melting and solidification, *Proc. First MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics*.MIT. Cambridge MA, 12-14, 2001.
- [16] S.V. Patankar, Numerical heat transfer and fluid flow, *MacGraw-Hill*, 1980.
- [17] S. Kim, S. Anghaie, G.Chen, A Fixed-Grid two-phase numerical model for convection-dominated melting and solidification, *Proc. First MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics*.MIT. Cambridge.MA, 12-14, June 2001.
- [18] S. Laouar, E. Mezaache, M. Daguene, Analysis of the quasi periodic scenario leading to chaos in a square cavity, *International Journal on Heat and Mass Transfer, IREHEAT*, Vol. 3, No 2, 2015.
- [19] M. Bouteldja, Etude théorique et numérique de la solidification des matériaux à changement de phase, *Mémoire de Magister, Université de Skikda*, 2012.