

## **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  $\partial v$ . 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  $\rho$  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  $v$  ;  $\sigma_{ij}$  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  $\rho$  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,  $\rho_l$  et  $\rho_s$  désignent la masse volumique pour les phases liquide et solide. Lorsque  $c_{ps}$ ,  $c_{pl}$ ,  $\rho_l$  et  $\rho_s$  sont constants pour une phase donnée et que  $0 \text{ K}$  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.

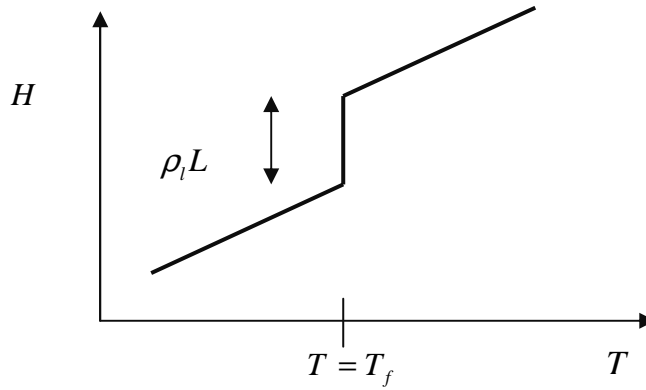


Figure 2.1: Graphique de l'enthalpie en fonction de la température

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 du 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  $\tau$  est le **nombre de Fourier** (notée également  $F_o$ ), qui caractérise le rapport entre le taux de transfert de chaleur par conduction et l'emmagasinage 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  $\rho$ ,  $c_p$  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

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