

### 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

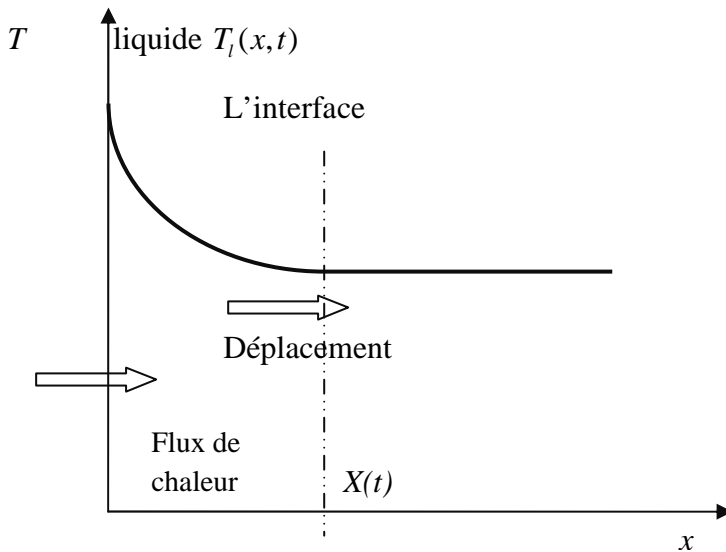
L'existence de solutions analytiques se limite à quelques problèmes simples. Les solutions analytiques pour des problèmes de fusion et de solidification sur un demi-espace de longueur infinie sont ici présentées.

#### 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 $\lambda'$

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

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

on dérive et remplace :

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

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

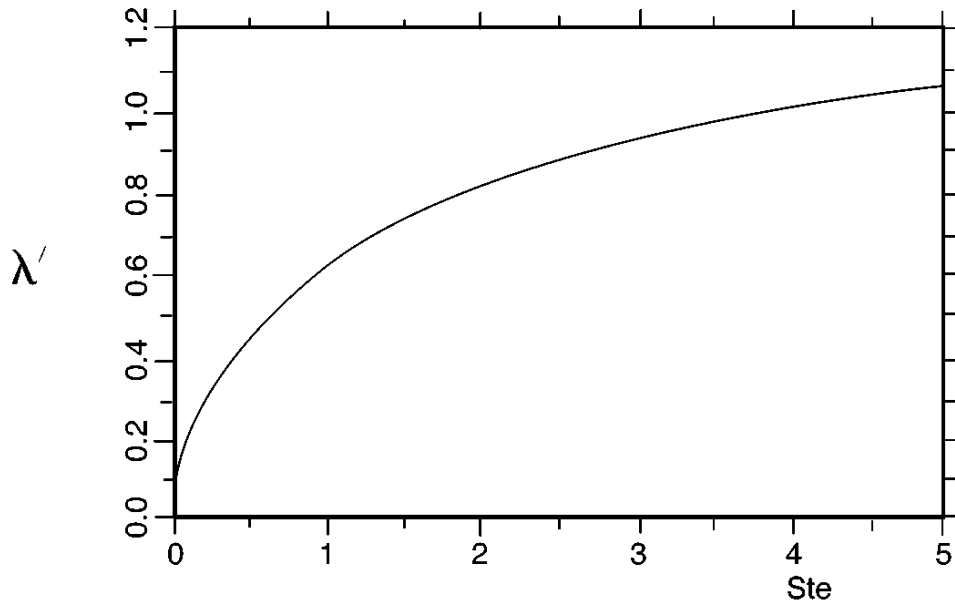


Figure 3.2 La racine  $\lambda'$  de l'équation 3.7

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  $\tau$  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  $x = 0$ .

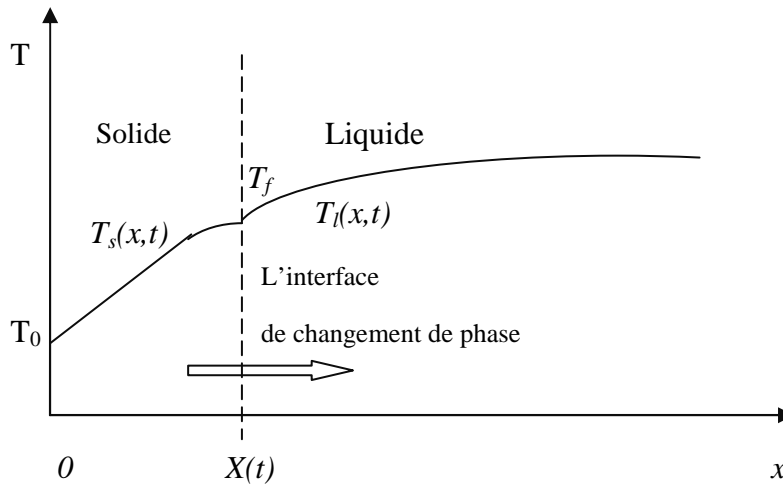


Figure 3.3 Solidifications du demi-espace liquide avec conduction dans les deux phases

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  $\lambda'$  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  $\lambda'$  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  $\lambda'$  vaudra donc 0.369871.

- La distribution de la température :

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

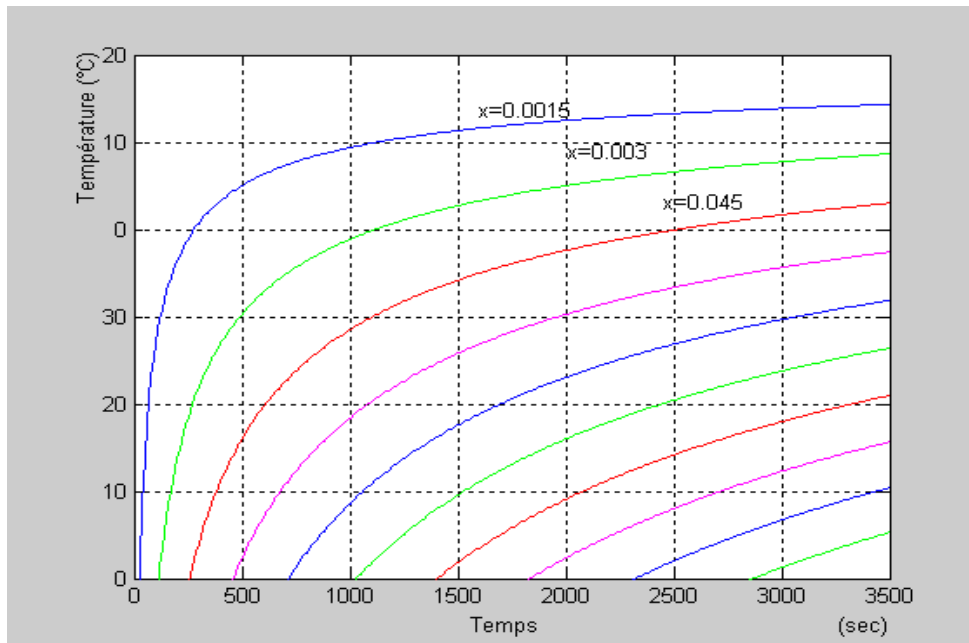


Fig.3.4 L'évolution de la température au cours de temps

- *Position de l'interface :*

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

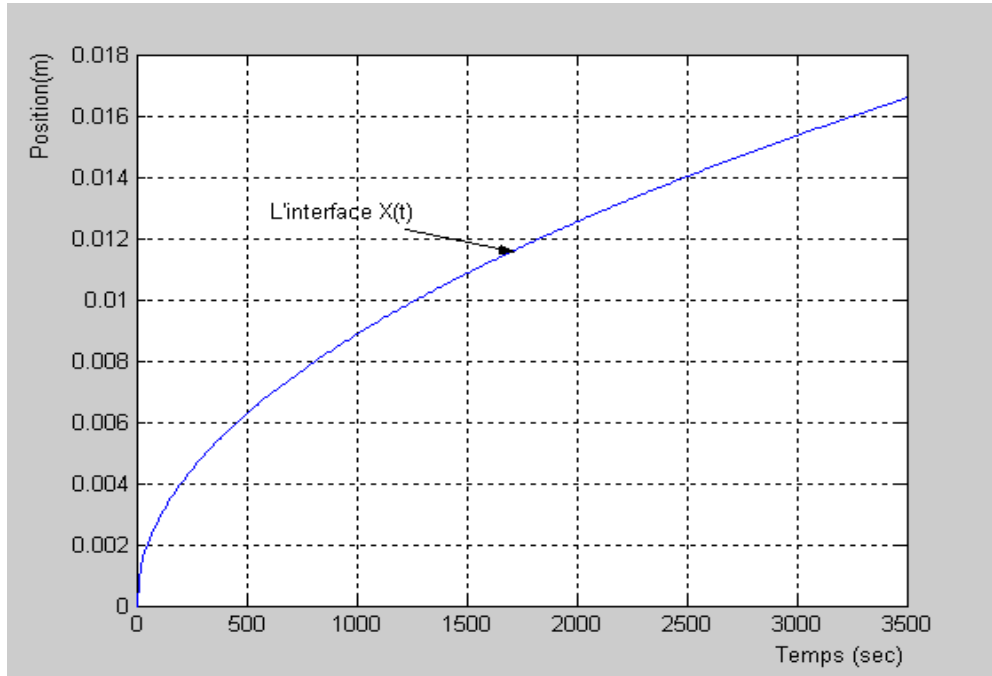


Fig.3.5 la position de l'interface

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

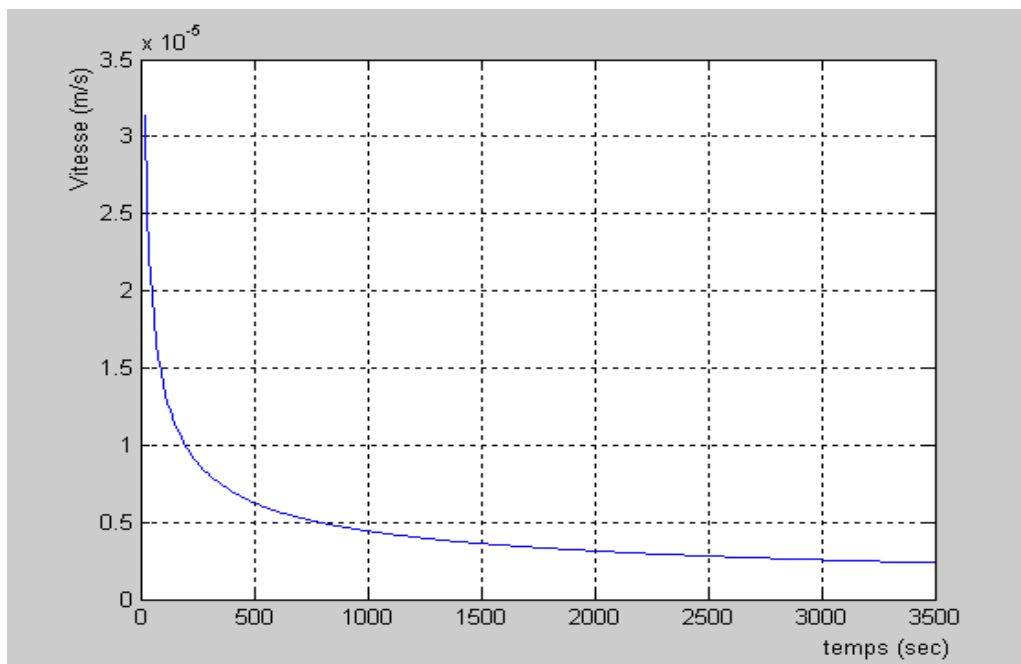


Fig.3.6 la vitesse de l'interface solide-liquide

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

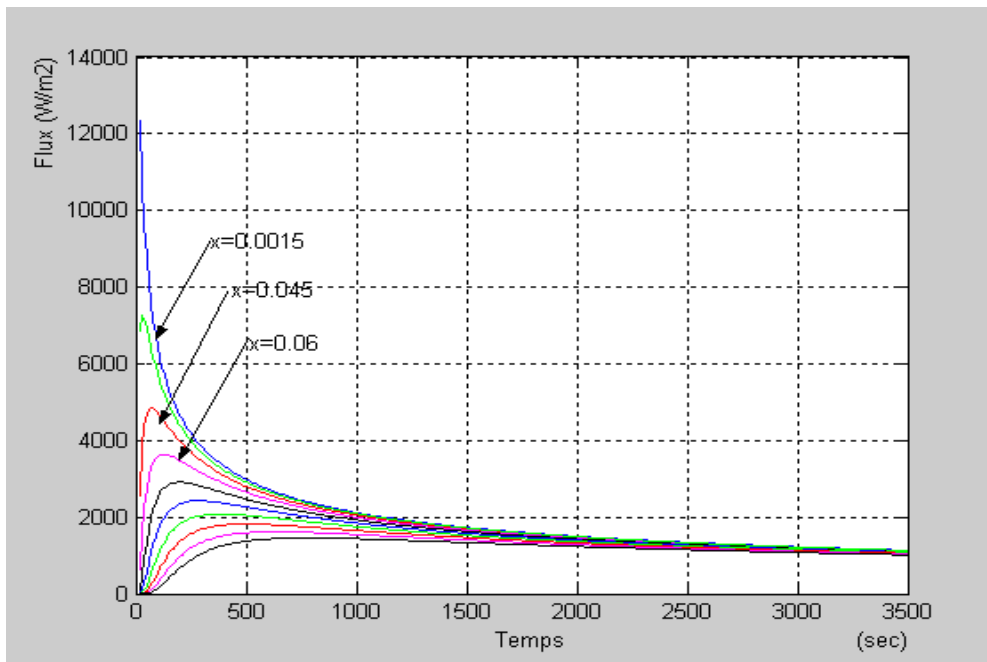


Fig.3.7 Le flux de chaleur