

---

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
**UNIVERSITE SAAD DAHLAB DE BLIDA**  
FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR  
**DÉPARTEMENT D'AÉRONAUTIQUE**  
DE **BLIDA**

## MÉMOIRE

Pour obtenir le titre

**d'INGÉNIEUR d'ÉTAT**

en **AÉRONAUTIQUE**

Option : **P**ROPULSION

Présenté par :

DJILALI MOUHEB

## THÈME

---

**Simulation sous COMSOL, des traitements  
thermiques d'une particule sphérique injectée dans  
un fluide à haut température :**

**Application pour un matériau pur : le cuivre.**

---

Promoteur :  
Mr T. REZOUG

Co-promoteur :  
Mr M. DRIOUCHE

Soutenu en 2011

---

# Résumé

Ce travail est consacré à la modélisation et l'investigation du transfert de chaleur au sein d'une particule sphérique d'un métal pur, Le modèle de simulation numériques présentés s'appliquent en principe au changement d'état, solidification et ou fusion.

L'approche théorique et la formulation du model physique c'est basé sur la méthode à capacité effective pour prendre en considération l'effet du changement de phase Solide-Liquide.

Un model physique de transfert de chaleur avec changement de phase fondé sur la résolution de l'équation de la chaleur adaptée à géométrie sphérique, et aussi la résolution du problème de Stephan pour le suivi du franc de fusion.

La résolution numérique du problème est effectuée sous le logiciel COMSOL Multiphysics dans lequel on introduit deux fonctions qui lui permettent de prendre en considération le changement de phase.

Les résultats seront validés pour le model unidimensionnels avec la solution exacte de Newman et les résultats obtenus avec un programme en Fortran.

**Mots-clés :** projection thermique, modèle numérique, transfert de chaleur et de masse, changement de Phase, problèmes de Stephan.

# Abstract

The main purpose of this work is to design and investigate the heat transfer in a spherical particle of a pure metal, the numerical simulation model that we have here deals with state changing, solidification and/or fusion.

Theoretical approach and the physical model formulation is based on the effective capacity method to have in consideration the effect of the phase changing Solid-Liquid.

A physical model of heat transfer with phase changing based on the resolution of the heat equation adapted to the spherical geometry, and also the resolution of Stephan's problem for the tract of the fusion interface.

The numerical resolution of the problem is made under COMSOL Multiphysics in which we introduce two functions that will make it taking in consideration the phase changing.

The results will be validated for the 1-D model with the exact solution of Newman and the results of a FORTRAN program.

**Key-words:** thermal projection, Numerical Model, heat and mass transfer, phase changing, Stephan's problem.

# *Dédicaces*

**A mes très chers parents.**

**A mon cher frère.**

**A ma chère sœur.**

**A mes chers grands parents.**

**A mes amis et a tout mes cousins et cousines.**

Gustave, Flaubert (1821,1880) :

La manière la plus profonde  
de sentir quelque chose est d'en souffrir.

# *Remerciements*

*Je remercie toutes les personnes qui m'ont aidé, de près ou de loin, dans mon travail.*

*Je remercie mon promoteur et mon co-promoteur*

*Je remercie les membres de jury d'avoir pris la Peine, d'analyser mon présent travail.*

François R. de Chateaubriand (1768,1848).

C'est le devoir qui crée le droit et non le droit qui crée le devoir.

# Nomenclature

|                  |  |  |
|------------------|--|--|
| $\varphi$        | Flux de chaleur transmis par conduction          | (W)  |
| $\lambda/K$      | Conductivité thermique du milieu                 | (W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )                       |
| $h$              | Coefficient de convection                        | (W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )                       |
| $x$              | Variable d'espace dans la direction du flux      | (m)  |
| $S$              | Aire de la section de passage du flux de chaleur | (m <sup>2</sup> )  |
| $\sigma$         | Constante de Stephan                             | (5,67.10 <sup>-8</sup> W m <sup>-2</sup> K <sup>-4</sup> ) |
| $\varepsilon$    | Facteur d'émission de la surface                 |  |
| $T$              | Température                                      | (K)  |
| $\rho$           | Masse volumique                                  | (kg m <sup>-3</sup> )                                      |
| $V$              | Volume   | (m <sup>3</sup> )  |
| $C/C_p$          | Chaleur massique                                 | (J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )                      |
| $t$              | Temps  | (s)  |
| $\sigma$         | Constante de Stephan                             | (5,67.10 <sup>-8</sup> W m <sup>-2</sup> K <sup>-4</sup> ) |
| $\dot{q}$        | Densité volumique d'énergie                      | (W m <sup>-3</sup> )                                       |
| $F$              | Coefficient de forme                             |  |
| $e$              | Epaisseur du film laminaire                      | (m)  |
| $g$              | Acceleration de la gravite                       | (m s <sup>-2</sup> )                                       |
| $v$              | Variance   |  |
| $P$              | pression   | (Pa)   |
| $x, y, r$        | Variables d'espace                               | (m / $\mu$ m)  |
| $L / H_f$        | Chaleur latente                                  | (J Kg <sup>-1</sup> )                                      |
| $Q$              | Energie de chauffage                             | (J Kg <sup>-1</sup> )                                      |
| $X$              | fraction fondu                                   |  |
| $\vartheta_{sl}$ | Vitesse du frand solide-liquide                  | (m s <sup>-1</sup> )                                       |
| $erf$            | Fanction ereur                                   |  |
| $a$              | Diffusivité thermique.                           |  |

## Indice

|        |                |
|--------|----------------|
| $s, 1$ | phase solide.  |
| $l, 2$ | phase liquide. |
| $i$    | initial        |
| $w$    | paroitte       |
| $p$    | particule      |
| $eff$  | efective       |
| $ext$  | extérieur      |

# Listes des Figures

|  |    |
|--|----|
| Fig. 1 Représentation des éléments d'un turboréacteur d'avion qui ont reçu un traitement de surface par dépôt plasma. .... | 5  |
| Fig. I.1 Conduction thermique stationnaire dans un mur plane de conductivité thermique constante .....                     | 14 |
| Fig. I.2 Cylindre creux à surfaces latérale isothermes .....   | 14 |
| Fig. I.3 Sphère creuse à surface isotherme .....   | 15 |
| Fig. I.4 Écoulement en régime laminaire.....   | 19 |
| Fig. I.5 Écoulement en régime turbulent .....  | 19 |
| Fig. I.6 Similitude des profils de vitesses et de températures .....   | 20 |
| Fig. I.7 Modèle de Prandtl pour l'écoulement d'un fluide dans une conduite.....  | 21 |
| Fig. I.8 Échauffer du fluide au contact de la paroi.....   | 23 |
| Fig. I.9 Principe de l'expérience de William HESRCHELL .....   | 24 |
| Fig. I.10 Spectre des ondes électromagnétiques .....   | 25 |
| Fig. II.1 Section droite d'une particule sphérique.....  | 30 |
| Fig. II.2 Transformations de phases (solide-liquide-vapeur) possibles pour une particule mono matériau .....               | 31 |
| Fig. II.3 Aspects considérés dans le traitement d'une particule injectée dans un fluide a haute température .....          | 31 |
| Fig. III.1 Environnement du COMSOL 4.0a .....  | 39 |
| Fig. III.2 La disposition de menu contextuel des propriétés physique.....  | 39 |
| Fig. III.3 Description du system en 1-D sous COMSOL .....  | 41 |
| Fig. III.4 Description du system en 2-D sous COMSOL (Solidification). ....   | 43 |
| Fig. III.5 maillage de la géométrie, maillage structure gauche et non structure droite.....                                | 43 |
| Fig. III.6 Description du system en 2-D sous COMSOL (Fusion) .....   | 44 |
| Fig. III.7 Description du system 2-D, cas 1 température constante sur la surface.....                                      | 44 |
| Fig. III.8 Description du system2-D, cas 2 température différent sur la surface. ....                                      | 45 |
| Fig. III.9 Description du system2-D, cas 3 flux de chaleur constant. ....  | 45 |
| Fig. IV.1 Graph de la distribution des températures dans le matériau (solution exacte).....                                | 48 |
| Fig. IV.2 position de l'interface solide – liquide en fonction du temps. ....  | 49 |
| Fig. IV.3 discrétisation du segment (méthode explicite).....   | 49 |

|   |    |
|---|----|
| Fig. IV.4 Comparaison des solutions de la position de l'interface, entre la MDF et l'exact.....   | 50 |
| Fig. IV.5 Graph COMSOL 1-D de la répartition de la température à l'instant t=30s, avec $\Delta t=0.01$<br>(solidification).....   | 51 |
| Fig. IV.6 Comparaison entre les solutions de COMSOL et l'exacte, pour la localisation de<br>l'interface solide –liquide. ....   | 52 |
| Fig. IV.7 Graph COMSOL 1-D de la répartition de la température à l'instant t=100s, avec $\Delta t=0.01s$<br>(fusion).....   | 53 |
| Fig. IV.8 Position de l'interface solide – liquide en fonction du temps cas de fusion.....  | 54 |
| Fig. IV.9 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant t=30s et la position de<br>l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=0.01s$ (solidification). ....   | 55 |
| Fig. IV.10 Comparaison de la position de l'interface solide-liquide .....   | 56 |
| Fig. IV.11 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant t=100s et la position de<br>l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=0.1s$ , maillage prédéfini normal (225 élément) structure<br>(fusion).....                  | 57 |
| Fig. IV.12 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant t=100s et la position de<br>l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=0.1s$ , maillage prédéfinie Normal (580 éléments) non<br>structure (fusion). ....           | 57 |
| Fig. IV.13 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant t=100s et la position de<br>l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=0.1s$ , maillage prédéfinie fin (961 éléments) non structure<br>(fusion).....               | 58 |
| Fig. IV.14 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant t=100s et la position de<br>l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=0.1s$ , maillage prédéfinie plus fin (1856 éléments) non<br>structure (fusion). ....        | 58 |
| Fig. IV.15 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant t=100s et la position de<br>l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=0.1s$ , maillage prédéfinie extrêmement fin (24910<br>éléments) non structure (fusion)..... | 59 |
| Fig. IV.16 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant t=100s et la position de<br>l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=0.01s$ , maillage prédéfinie fin (961 éléments) non structure<br>(fusion).....              | 60 |
| Fig. IV.17 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant t=100s et la position de<br>l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=0.01s$ , maillage prédéfinie plus fin (1856 éléments) non<br>structure (fusion). ....       | 60 |

|  |    |
|--|----|
| Fig. IV.18 Répartition de la température dans la sphère à l'instant $t=100\mu\text{s}$ et la position de l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=1\text{E-}5$ s, maillage prédéfinie fin (932 éléments) non structure (fusion). .....   | 61 |
| Fig. IV.19 Répartition de la température dans la sphère à l'instant $t=100\mu\text{s}$ et la position de l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=1\text{E-}6$ s, maillage prédéfinie fin (932 éléments) non structure (fusion). .....   | 62 |
| Fig. IV.20 Répartition de la température dans la sphère à l'instant $t=100\mu\text{s}$ et la position de l'interface solide-liquide, avec $\Delta t=1\text{E-}6$ s, maillage prédéfinie fin (932 éléments) non structure, condition initiale non uniforme (fusion). .....  | 62 |
| Fig. IV.21 Répartition de la température dans la sphère à l'instant $t=0.02247\text{s}$ , avec $\Delta t=1\text{E-}5$ s, maillage prédéfinie plus fin (3896 éléments) non structure, condition initiale flux de chaleur ( $h=500(\text{w}/\text{m}^2.\text{K})$ , $T_{\text{ext}}=10000\text{K}$ , (fusion). ..... | 63 |
| Fig. IV.22 Répartition de la température dans la sphère à l'instant $t=0.28270\text{s}$ , avec $\Delta t=1\text{E-}5$ s, maillage prédéfinie plus fin (3896 éléments) non structure, condition initiale flux de chaleur ( $h=170(\text{w}/\text{m}^2.\text{K})$ , $T_{\text{ext}}=3000\text{K}$ , (fusion). .....  | 63 |

# Liste des tableaux

|  |    |
|--|----|
| Tableau III.1 : Propriétés physique du cuivre. . .....                           | 40 |
| Tableau.III.2 : propriétés physique sous COMSOL. ....                            | 41 |
| Tableau.III.3 : fonction: $C_{p\text{eff}}$ en fonction de la température. ....  | 42 |
| Tableau III.4 : fonction: $K_{\text{eff}}$ en fonction de la température. ....   | 42 |
| Tableau IV.1 : Les différent pas de temps utilise sous COMSOL .....              | 52 |
| Tableau IV.2 : L'erreur de la solution COMSOL compare à la solution exacte. .... | 53 |

## Nomenclature

## Liste des figures

# Table des Matières

|   |    |
|---|----|
| <b>Introduction</b> .....   | 1  |
| <b>CHAPITRE I :</b>   |    |
| I.1 Introduction .....  | 5  |
| I.2 Définitions .....   | 6  |
| I.3 Formulation d'un problème de transfert de chaleur .....                       | 7  |
| I.3.1 Bilan d'énergie.....  | 7  |
| I.3.2 Expression des flux d'énergie.....  | 8  |
| I.3.2.1 Conduction.....   | 8  |
| I.3.2.2 Convection.....   | 9  |
| I.3.2.3 Rayonnement .....   | 9  |
| I.3.2.4 Stockage d'énergie.....   | 10 |
| I.3.2.5 Génération d'énergie .....  | 10 |
| I.4 Mode de transfert de chaleur .....  | 11 |
| I.4.1. Transfert de chaleur par conduction .....                                  | 11 |
| I.4.1.1. L'équation de la chaleur .....   | 11 |
| I.4.1.2. Conduction en régime permanent (stationnaire) .....                      | 13 |
| I.4.2 Conduction unidirectionnelle en régime variable sans changement d'état..... | 16 |
| I.4.2.1 Milieu à température uniforme .....                                       | 16 |
| I.4.2.2 Milieu semi-infini .....  | 18 |
| I.4.3 Convection sans changement d'état .....                                     | 18 |
| I.4.3.1 Généralités. Définitions .....  | 18 |
| I.4.3.2 Convection naturelle et forcée.....                                       | 18 |
| I.4.3.3 Régime d'écoulement .....   | 18 |
| I.4.3.4 Expression du flux de chaleur .....                                       | 19 |
| I.4.3.5 Loi de Newton. Valeur du coefficient de transfert.....                    | 21 |
| I.4.3.6 Calcul du flux de chaleur en convection forcée .....                      | 22 |
| I.4.3.7 Calcul du flux de chaleur en convection naturelle .....                   | 23 |
| I.4.4 Transfert de chaleur par rayonnement .....                                  | 24 |

|   |    |
|---|----|
| I.5 Généralité sur le changement de phase .....                               | 25 |
| I.5.1 Introduction.....   | 25 |
| I.5.2 Variance — règle des phases .....                                       | 27 |
| I.5.3 Le problème de Stefan.....  | 27 |
| I.6 Conclusion .....  | 28 |
| <br><b>CHAPITRE II :</b>  |    |
| II.1 Introduction .....   | 30 |
| II.2 Modèle de transfert thermique .....                                      | 31 |
| II.2.1 Modèle thermiquement mince.....  | 32 |
| II.2.2 Hypothèses.....  | 33 |
| II.2.3 Formulation mathématique.....  | 33 |
| II.2.3.1 Méthode à capacité thermique effective .....                         | 33 |
| II.2.3.2 Transfert de chaleur .....   | 33 |
| II.2.3.3 Fusion : Problème de Stefan.....                                     | 34 |
| II.2.3.4 Solution de Newman pour le suivie de l'interface solide/liquide..... | 35 |
| II.3 Conclusions .....  | 36 |
| <br><b>CHAPITRE III :</b>   |    |
| III.1 Introduction.....   | 38 |
| III.2 Présentation du logicielle COMSOL4.0a .....                             | 38 |
| III.3 Présentation du Module utilisé .....                                    | 39 |
| III.4 Construction du model pour COMSOL.....                                  | 40 |
| III.4.1 Model a une dimension 1-D .....                                       | 41 |
| III.4.1.1 Paramètres du model .....   | 41 |
| III.4.1.2 Propriété du sous domaine.....                                      | 41 |
| III.4.1.3 Résolution .....  | 42 |
| III.4.2 model en deux dimension 2-D.....                                      | 42 |
| III.4.2.1 Paramètres du model (solidification du cuivre).....                 | 42 |
| III.4.2.2 Propriété du sous domaine.....                                      | 43 |
| III.4.2.3 Maillage du model.....  | 43 |
| III.4.2.4 Résolution.....   | 43 |
| III.4.2.5 Paramètres du model (fusion du cuivre).....                         | 44 |

|  |        |
|--|--------|
| III.4.3 Application du model en deux dimension à la géométrie sphérique .....  | 44     |
| III.4.3.1 Paramètres du model .....  | 44     |
| III.4.3.2 Propriété du sous domaine.....                                       | 45     |
| III.4.3.3 Maillage.....  | 45     |
| III.4.3.4 Résolution.....  | 45     |
| III.5 Conclusion .....   | 46     |
| <br><b>CHAPITRE IV :</b>   |        |
| IV .1 Introduction.....  | 48     |
| IV .2 Résultats des modèles 1-D.....   | 48     |
| IV .2.1 la méthode analytique .....  | 48     |
| IV .2.2 méthode des différences finies.....                                    | 49     |
| IV .2.3 Solutions du model COMSOL (solidification).....                        | 50     |
| IV .2.3 Solutions du model COMSOL (fusion) .....                               | 53     |
| IV .3 Discussion des résultats unidimensionnels 1-D .....                      | 54     |
| IV.4 Résultats des systèmes bidimensionnel 2-D.....                            | 55     |
| IV.4.1 Cas de solidification du system en 2-D.....                             | 55     |
| IV.4.2 Cas de fusion du system en 2-D .....                                    | 56     |
| IV.4.2.1 Effet du type de maillage.....  | 57     |
| IV.4.2.1 Effet de la taille du maillage.....                                   | 58     |
| IV.4.2.1 Effet du pas de temps .....   | 60     |
| IV.5 Discussion des résultats 2-D.....   | 61     |
| IV.6 Résultats de l'application du model 2-D a la géométrie sphérique .....    | 61     |
| IV.6.1 Cas d'une répartition uniforme de la température a la surface.....      | 61     |
| IV.6.2 Cas d'une répartition non uniforme de la température à la surface ..... | 63     |
| IV.6.3 Cas d'un flux de chaleur uniforme sur la surface .....                  | 63     |
| IV.7 Discussion des résultats 2-D applique à la géométrie sphérique .....      | 64     |
| IV.8 Les limite de COMSOL.....   | 64     |
| IV.9 Conclusion .....  | 64     |
| <br><b>Conclusion générale</b> .....   | <br>65 |
| <b>Bibliographie.</b>  |        |
| <b>Annexes.</b>  |        |

# Introduction

Le problème de changement de phase présente beaucoup d'intérêt dans de nombreux secteurs industriels tels que l'industrie pétrolière, l'industrie métallurgique, l'industrie chimique etc.

La caractéristique fondamentale du procédé de fusion et de solidification est la présence d'une frontière mobile entre les phases solide et liquide. Ce problème a été étudié pour la première fois en 1889 par Stefan (Rubenstein, 1971) et est depuis connu sous le nom de problème de Stefan.

Le problème de Stefan 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. Ou de nos jours à la simulation sous des logiciels de plus en plus puissants à savoir COMSOL, ANSYS, ABACUS,

Lors de l'injection d'une particule dans un jet à haute température, celle-ci peut être le siège de divers modes d'échanges de chaleur et de masse comme la conduction, la convection, le rayonnement, le changement de phase (fusion et solidification) et l'oxydation. Bien sûr la prépondérance d'un mode par rapport à un autre est tributaire de la taille des particules, de la nature du matériau mais aussi de la dynamique et thermique de l'écoulement du jet.

## **Application ( $h_{\infty}, T_{\infty}$ )**

La technologie de projection thermique est une solution éprouvée et reconnue pour des applications mécaniques, thermiques, anti-usure, anti-corrosion et de génie électrique les plus diverses. Bien que d'application courante depuis trente ans dans les domaines aéronautique et spatial ainsi que nucléaire, elle n'est présente que maintenant dans le secteur de l'automobile, des textiles, de la chimie, de la pétrochimie, de l'électronique et du biomédical.

Elle permet d'apporter des solutions à des problèmes de corrosion, d'usure, de fatigue, de protections électromagnétiques et thermiques, par l'élaboration de revêtements

## *Introduction*

---

de plus en plus élaborés. Elle est actuellement utilisée pour la synthèse de nouveaux matériaux dans des domaines où une grande pureté du produit est exigée.

Dans l'industrie aéronautique, les enjeux économiques et écologiques orientent actuellement la recherche vers l'élaboration de matériaux alliant à la fois légèreté pour une plus faible consommation carburant, un moindre rejet de pollution dans l'atmosphère et une augmentation de la résistance à l'usure et à la fatigue.

Globalement, l'étude thermique d'un processus de projection peut être divisée en deux parties :

- La première s'intéresse aux échanges fluides à haute température et particules avant impact sur un substrat.
- la seconde étudie l'impact, le refroidissement des lamelles résultantes et la construction du dépôt.

Ainsi, la qualité des revêtements obtenus dépend fortement de l'histoire thermique des particules en vol avant impact. Par exemple, l'obtention d'un revêtement plus ou moins poreux dépend fortement de l'état de fusion et de la vitesse des particules au moment de l'impact.

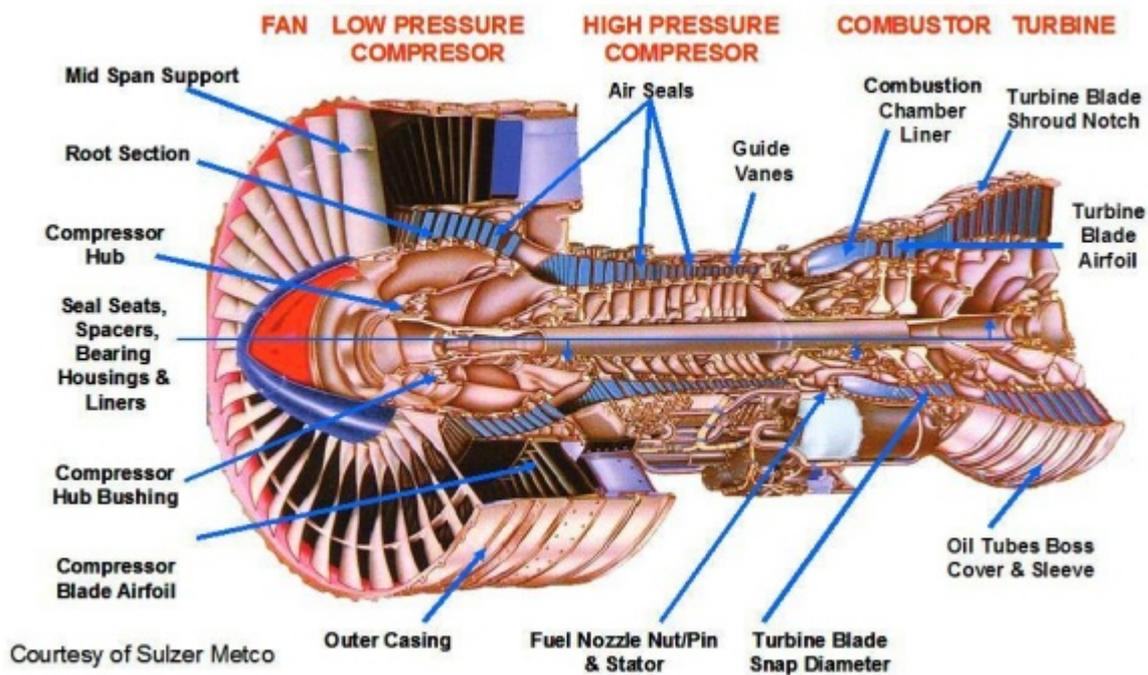


Fig. 1 Représentation des éléments d'un turboréacteur d'avion qui ont reçu un traitement de surface par déposition plasma.

## **Position du problème et objectifs**

Le travail de cette thèse a comme but la modélisation et l'investigation du transfert de chaleur fluide-particule, à savoir la distribution de la température en tout point et à n'importe quel temps, aussi le changement de phase dans la particule qui se traduit par la détermination de la position du front.

# Généralités sur le transfert thermique avec changement de phase

SOMMAIRE

PAGE

---

|   |    |
|---|----|
| <u>I.1. Introduction</u> .....                                      | 5  |
| <u>I.2. Définitions</u> .....                                       | 6  |
| <u>I.3. Formulation d'un problème de transfert de chaleur</u> ..... | 7  |
| <u>I.4. Mode de transfert de chaleur</u> .....                      | 11 |
| <u>I.5. Généralité sur le changement de phase</u> .....             | 26 |
| <u>I.6. Conclusion</u> .....  | 29 |

---

Heraclite (-540,-480) :

Un savoir multiple n'enseigne pas la sagesse.

## I.1. Introduction

Les multiples procédés utilisés dans l'industrie sont très souvent le siège d'échanges de chaleur, soit parce que c'est le but recherché (fours, coulée, échangeurs, thermoformage, induction, lits fluidisés, trempe, refroidissement), soit parce que ceux-ci interviennent d'une manière inévitable (chocs thermiques, pertes de chaleurs, rayonnement). Des connaissances de base en ce domaine sont donc nécessaires à l'ingénieur de production ou de développement pour

- comprendre les phénomènes physiques qu'il observe;
- maîtriser les procédés et donc la qualité des produits.

Le deuxième principe de la thermodynamique admet que la chaleur (ou énergie thermique) ne peut passer que d'un corps chaud vers un corps froid, c'est-à-dire d'un corps à température donnée vers un autre à température plus basse. Ce chapitre a pour objet d'étudier la manière dont s'effectue cet échange. Le transfert de chaleur se produit suivant deux modes semblables:

- soit par contact: c'est la conduction thermique;
- soit à distance: c'est le rayonnement thermique.

On considère un troisième mode de transfert d'énergie calorifique qui est la convection, (échange de chaleur entre un fluide et un solide). Dans ce cas le phénomène thermique est compliqué par des déplacements de matière et au transfert de chaleur se superpose le transfert de masse.

La thermodynamique établit les conditions de cette transmission de chaleur et détermine les conséquences qui en résultent, mais elle ne se préoccupe pas de la vitesse de cette transmission. En thermodynamique classique, les transformations réversibles supposent essentiellement le voisinage de l'équilibre et par conséquent, les échanges ne peuvent s'effectuer qu'entre corps à températures très voisines. Dans la pratique, ces transferts de chaleur s'effectuent entre corps dont les différences de températures sont finies et la vitesse avec laquelle ils s'effectuent, jouent un rôle important. [2]

## I.2. Définitions [2]

### La chaleur:

Lorsqu'on introduit une quantité de chaleur dans un corps, la température de ce dernier augmente. Dans le cas d'un changement de phase, une partie de cette chaleur est utilisée pour satisfaire les besoins thermiques liés à ce phénomène (fusion, évaporation, etc...).

### La température:

C'est la manifestation mesurable de la chaleur stockée. On dit aussi que la température est liée à la moyenne d'énergie cinétique due au mouvement des atomes et molécules du corps par la relation:

$$\frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} k_B T \quad (\text{Eq. I.1})$$

### La conservation de la chaleur:

Une fois que l'énergie a été transformée en chaleur, cette dernière se "conserve" lors des différents transferts qu'elle subit.

$$Q + \Delta Q = Q' \quad (\text{Eq. I.2})$$

### La chaleur spécifique:

La relation fondamentale  $\Delta Q = m \cdot c_p \cdot \Delta T$  exprime que, si un corps de masse  $m$  stocke  $\Delta Q$  joules, sa température s'élèvera de  $\Delta T$ .  $C_p$ , la chaleur spécifique (en  $J/(kg \cdot K)$ ) est une propriété physique des matériaux et elle dépend généralement de la température. Elle caractérise sa capacité à emmagasiner de la chaleur. La chaleur spécifique d'une substance est fonction de sa structure moléculaire et de sa phase.

### L'enthalpie:

On appelle "enthalpie" la quantité d'énergie contenue dans l'unité de masse d'un corps porté d'une température de référence  $T_0$  à la température  $T$ . Elle contient d'éventuelles chaleurs de transformation survenues dans l'intervalle  $T_0 - T$ . [ $H(T_0) = 0$  ;  $T_0 = 0^\circ C$  ou  $20^\circ C$  selon les tables]:

$$\Delta H = \frac{\Delta Q}{m} [J/kg] \quad (\text{Eq. I.3})$$

### La chaleur latente de changement d'état:

La chaleur latente spécifique d'une substance est la quantité de chaleur nécessaire pour entraîner le changement de phase d'une unité de masse de la substance. L'unité S.I de la chaleur latente spécifique est le [J/kg]. La chaleur latente de fusion est la quantité d'énergie thermique dégagée par 1 kg de substance solide (p. ex. quand elle fond) sans qu'il y ait de changement de température. La chaleur latente de vaporisation est la quantité d'énergie thermique nécessaire pour transformer à l'état de vapeur 1 kg d'une substance sans qu'il y ait changement de température.

### Flux de chaleur:

La chaleur s'écoule sous l'influence d'un gradient de température par conduction des hautes vers les basses températures. La quantité de chaleur transmise par unité de temps et par unité d'aire de la surface isotherme est appelée densité de flux de chaleur :

$$\Phi = \frac{1}{S} \frac{dQ}{dt} \quad (\text{Eq. I.4})$$

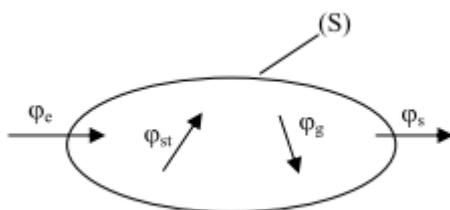
On appelle flux de chaleur la quantité de chaleur transmise sur la surface S par unité de temps :

$$\varphi = \frac{dQ}{dt} \quad (\text{Eq. I.5})$$

## I.3. Formulation d'un problème de transfert de chaleur

### I.3.1. Bilan d'énergie

Il faut tout d'abord définir un système (S) par ses limites dans l'espace et il faut ensuite établir l'inventaire des différents flux de chaleur qui influent sur l'état du système et qui peuvent être :



- $\varphi_{st}$  flux de chaleur stocké.
- $\varphi_g$  flux de chaleur généré.
- $\varphi_e$  flux de chaleur entrant.
- $\varphi_s$  flux de chaleur sortant.

On applique alors le 1<sup>er</sup> principe de la thermodynamique pour établir le bilan d'énergie du système (S) en (W) :

$$\varphi_e + \varphi_g = \varphi_S + \varphi_{St} \quad (\text{Eq. I.6})$$

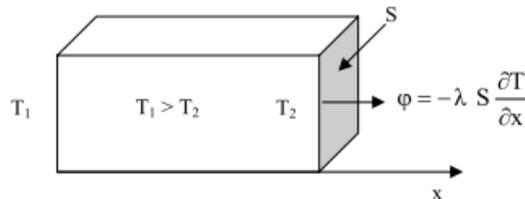
### I.3.2. Expression des flux d'énergie

Il faut maintenant établir les expressions des différents flux d'énergie. En reportant ces expressions dans le bilan d'énergie, nous obtiendrons l'équation différentielle dont la résolution permettra de connaître l'évolution de la température en chaque point du système.

#### I.3.2.1. Conduction

C'est le transfert de chaleur au sein d'un milieu opaque, sans déplacement de matière, sous l'influence d'une différence de température. La propagation de la chaleur par conduction à l'intérieur d'un corps s'effectue selon deux mécanismes distincts : une transmission par les vibrations des atomes ou molécules et une transmission par les électrons libres.

La théorie de la conduction repose sur l'hypothèse de Fourier : la densité de flux est proportionnelle au gradient de température :



$$\vec{\varphi} = -K \overrightarrow{\text{grad}}(T) \quad (\text{Eq. I.7})$$

Ou sous forme algébrique:

$$\varphi = -\lambda S \frac{\partial T}{\partial x} \quad (\text{Eq. I.8})$$

avec :

$\varphi$  Flux de chaleur transmis par conduction

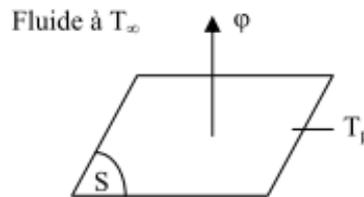
$\lambda$  Conductivité thermique du milieu

- x Variable d'espace dans la direction du flux  
 S Aire de la section de passage du flux de chaleur

### I.3.2.2. Convection

C'est le transfert de chaleur entre un solide et un fluide, l'énergie étant transmise par déplacement du fluide. Ce mécanisme de transfert est régi par la loi de Newton :

$$\varphi = h S (T_P - T_\infty) \quad (\text{Eq. I.9})$$



avec :

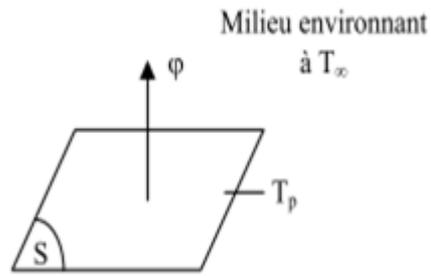
- $\varphi$  Flux de chaleur transmis par convection  
 h Coefficient de transfert de chaleur par convection  
 $T_P$  Température de surface du solide  
 $T_\infty$  Température du fluide loin de la surface du solide  
 S Aire de la surface de contact solide/fluide

**Remarque :** La valeur du coefficient de transfert de chaleur par convection  $h$  est fonction de la nature du fluide, de sa température, de sa vitesse et des caractéristiques géométriques de la surface de contact solide/fluide.

### I.3.2.3. Rayonnement

C'est un transfert d'énergie électromagnétique entre deux surfaces (même dans le vide). Dans les problèmes de conduction, on prend en compte le rayonnement entre un solide et le milieu environnant et dans ce cas nous avons la relation :

$$\varphi = \sigma \varepsilon_P S (T_P^4 - T_\infty^4) \quad (\text{Eq. I.10})$$



Avec :

- $\varphi$  Flux de chaleur transmis par rayonnement
- $\sigma$  Constante de Stephan
- $\varepsilon_p$  Facteur d'émission de la surface
- $T_p$  Température de la surface
- $T_\infty$  Température du milieu environnant la surface
- $S$  Aire de la surface

#### I.3.2.4. Stockage d'énergie

Le stockage d'énergie dans un corps correspond à une augmentation de son énergie interne au cours du temps d'où (à pression constante) :

$$\varphi_{st} = \rho V c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{Eq. I.11})$$

Avec :

- $\varphi_{st}$  Flux de chaleur stocké
- $\rho$  Masse volumique
- $V$  Volume
- $c$  Chaleur massique
- $T$  Température
- $t$  Temps

#### I.3.2.5. Génération d'énergie

Elle intervient lorsqu'une autre forme d'énergie (chimique, électrique, mécanique, nucléaire) est convertie en énergie thermique. Nous pouvons l'écrire sous la forme :

$$\varphi_g = \dot{q} V \quad (\text{Eq. I.12})$$

Avec :

$\varphi_g$  Flux d'énergie thermique générée

$q$  Densité volumique d'énergie générée

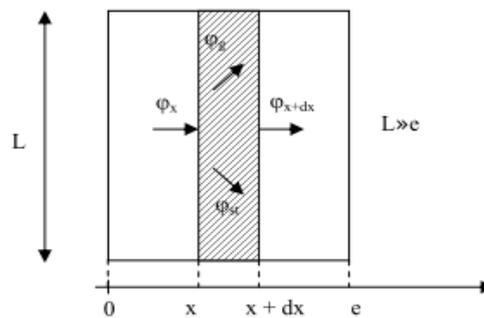
$V$  Volume

## I.4. Mode de transfert de chaleur

### I.4.1. Transfert de chaleur par conduction

#### I.4.1.1. L'équation de la chaleur

Dans sa forme monodimensionnelle, elle décrit le transfert de chaleur unidirectionnel au travers d'un mur plan :



Considérons un système d'épaisseur  $dx$  dans la direction  $x$  et de section d'aire  $S$  normalement à la direction  $Ox$ . Le bilan d'énergie sur ce système s'écrit :

$$\varphi_x + \varphi_g = \varphi_{x+dx} + \varphi_{St} \quad (\text{Eq. I.13})$$

Avec :

$$\varphi_x = -\left(\lambda S \frac{\partial T}{\partial x}\right) \quad (\text{Eq. I.14})$$

$$\varphi_g = q S dx \quad (\text{Eq. I.15})$$

$$\varphi_{x+dx} = -\left(\lambda S \frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x+dx} \quad (\text{Eq. I.16})$$

$$\varphi_{st} = \rho c S dx \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{Eq. I.17})$$

En reportant dans le bilan d'énergie et en divisant par  $dx$  nous obtenons :

$$\frac{(\lambda S \frac{\partial T}{\partial x})_{x+dx} - (\lambda S \frac{\partial T}{\partial x})_x}{dx} + \dot{q} S = \rho c S \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{Eq. I.18})$$

Soit :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda S \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \dot{q} S = \rho c S \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{Eq. I.19})$$

Et dans le cas tridimensionnel, nous obtenons l'équation de la chaleur dans le cas le plus général :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{q} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{Eq. I.20})$$

Cette équation peut se simplifier dans un certain nombre de cas :

- a) Si le milieu est isotrope :  $\lambda_x = \lambda_y = \lambda_z$
- b) S'il n'y a pas de génération d'énergie à l'intérieur du  $\dot{q} = 0$  système :
- c) Si le milieu est homogène,  $\lambda$  n'est fonction que de  $T$ .

Les hypothèses a) + b) + c) permettent d'écrire :

$$\lambda \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{d\lambda}{dT} \left[ \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 \right] = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{Eq. I.21})$$

d) Si de plus  $\lambda$  est constant (écart modéré de température), nous obtenons l'équation de Poisson :

$$a \nabla^2 T = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{Eq. I.22})$$

Le rapport  $a = \frac{\lambda}{\rho c}$  est appelé la **diffusivité thermique**.

e) En régime permanent, nous obtenons l'équation de Laplace :

$$\nabla^2 T = 0 \quad (\text{Eq. I.23})$$

Par ailleurs, les hypothèses a), c) et d) permettent d'écrire :

- Equation de la chaleur en coordonnées cylindriques :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\dot{q}}{\lambda} = \frac{1}{a} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{Eq. I.24})$$

- Equation de la chaleur en coordonnées sphériques :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2 (rT)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} + \frac{\dot{q}}{\lambda} = \frac{1}{a} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{Eq. I.25})$$

### I.4.1.2. Conduction en régime permanent (stationnaire)[1]

#### I.4.1.2.a. Transfer unidirectionnel

Certaines applications pratiques peuvent être traitées par des systèmes unidimensionnels où la température ne varie essentiellement que dans une seule direction. Les cas de référence sont représentés par le problème plan, cylindrique ou sphérique.

Ces cas sont représentés par une configuration géométrique simple, d'un corps homogènes sans source de chaleur.

- **Mur simple à faces isothermes**

Ce cas est représenté par un mur de bâtiment. Il est constitué donc d'un milieu limité par deux plans parallèles (ses faces). À l'intérieur duquel la chaleur se propage uniquement dans la direction normale à ces plans. En conséquence, le gradient de température est unidirectionnel et perpendiculaire aux faces du mur, tandis que les surfaces isothermes sont des plans parallèles aux faces.

Soit un tel mur plan, d'épaisseur  $\delta$ , constitué d'un matériau homogène et isotrope de conductivité thermique  $\lambda$  constante. Supposons que les dimensions de la surface  $S$  dans le plan  $yOz$  sont beaucoup plus grandes que celles dans la direction  $Ox$  et que les températures  $T_1$  et  $T_2$  ( $T_1 > T_2$ ) sur les faces de ce mur sont connues, constantes et uniformes. Dans le cadre de ces hypothèses, l'équation différentielle de Laplace qui décrit la propagation de la chaleur dans ce mur prend la

forme: 
$$\frac{d^2 T}{dx^2} = 0 \quad (\text{Eq. I.26})$$

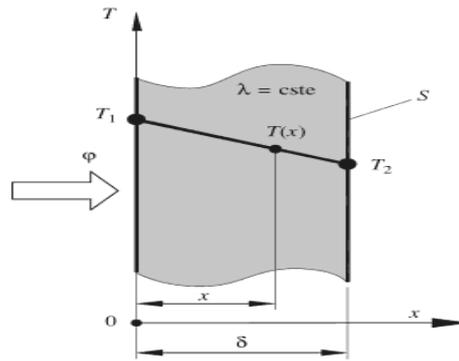


Fig. I.1 Conduction thermique stationnaire dans un mur plane de conductivité thermique constante [1].

### - Cylindre creux simple à surface isothermes

Ce problème est un modèle du cas pratique de transfert thermique par conduction à travers des éléments de construction de forme cylindrique, des conduites qui transportent les différents fluides, des tubes de ventilation, etc.

On considère un cylindre creux fait d'un matériel homogène et isotrope de conductivité  $\lambda$  constante, limité par une surface intérieure de rayon  $r_1$  et d'une surface extérieure de rayon  $r_2$ , qui ont des températures constantes et uniformes  $T_1$  et  $T_2$  ( $T_1 > T_2$ ). Si le cylindre a une longueur  $L$  beaucoup plus grande que son diamètre, les isothermes sont des surfaces cylindriques coaxiales de rayon  $r_1 \leq r \leq r_2$ . La conduction thermique est donc unidirectionnelle et présente un gradient de température radial (fig. I.2)

Comme dans le cas du mur plan .....

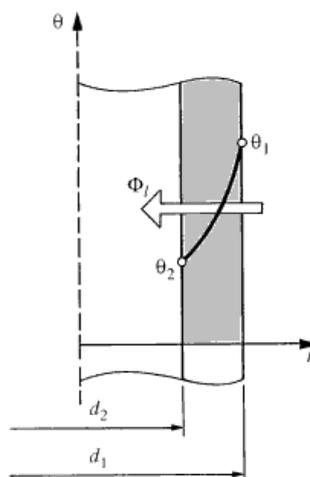


Fig. I.2 Cylindre creux à surfaces latérale isothermes.[1]

### - Sphère creuse à surface isothermes

Ce problème représente un cas pratique moins souvent rencontré que les deux précédents. Néanmoins, grâce aux avantages offerts par la géométrie sphérique volume maximal couvert par une surface minimale, distribution uniforme de pression, cette géométrie est adaptée à certaines circonstances: par exemple, dans l'architecture et la construction des bâtiments civils et industriels prévus avec des coupoles hémisphériques ou bien dans l'industrie chimique où l'on utilise des réservoirs sphériques de stockage pour différents agents chimiques.

Le traitement de ce problème est semblable au précédent.

On considère une sphère creuse de rayon intérieur  $r_1$  et extérieur  $r_2$ , construite d'un matériau homogène et isotrope. Ayant une conductivité thermique  $\lambda$  constante. Les surfaces limites ont des températures constantes et uniformes  $T_1$  et  $T_2$  (fig. I.3). Comme dans les cas antérieurs, on doit déterminer le champ de température et le flux thermique qui traverse la structure de la sphère, par rapport à un système de coordonnées sphériques. Qui est décrit par l'équation différentielle de la conduction de la forme:

$$\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dT}{dr} = 0 \quad (\text{Eq. I.27})$$

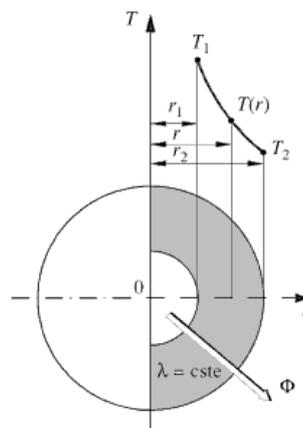


Fig. I.3 Sphère creuse à surface isotherme [1]

#### I.4.1.2.b. Transfert multidirectionnel

Dans le cas où la propagation de la chaleur ne s'effectue pas selon une direction unique, deux méthodes de résolution peuvent être appliquées :

##### - Méthode du coefficient de forme

Dans les systèmes bi- ou tridimensionnels où n'interviennent que deux températures limites  $T_1$  et

$T_2$ , on montre que le flux de chaleur peut se mettre sous la forme :

$$\varphi = \lambda F(T_1 - T_2) \quad (\text{Eq. I.28})$$

Avec :

$\lambda$  Conductivité thermique du milieu séparant les surfaces  $S_1$  et  $S_2$

$T_1$  Température de la surface  $S_1$

$T_2$  Température de la surface  $S_2$

$F$  Coefficient de forme

Le coefficient de forme  $F$  ne dépend que de la forme, des dimensions et de la position relative des deux surfaces  $S_1$  et  $S_2$ .

#### - Méthodes numériques

Dans le cas où la méthode du coefficient de forme ne peut pas s'appliquer (surfaces non isothermes par exemple), il faut résoudre l'équation de Laplace numériquement. On utilise des méthodes de discrétisation du domaine considéré (espace ou plan). Ou la simulation par un code commerciale.

### I.4.1. Conduction unidirectionnelle en régime variable sans changement d'état.

#### I.4.1.1. Milieu à température uniforme

On va étudier le transfert de chaleur vers un milieu à température uniforme, ce qui est a priori contradictoire car il est nécessaire qu'il y ait un gradient thermique pour qu'il se produise un transfert de chaleur. Cette approximation du milieu à température uniforme peut néanmoins être justifiée dans certains cas que l'on va préciser. Considérons par exemple la trempe d'une bille métallique qui consiste à immerger une bille initialement à la température  $T_i$  dans un bain à température  $T_0$  maintenue constante. Si l'on suppose que la température à l'intérieur de la bille est uniforme, ce qui sera d'autant plus vrai que sa dimension est petite et sa conductivité thermique élevée, on peut écrire le bilan thermique de cette bille entre deux instants  $t$  et  $t + dt$  :

$$-hS(T - T_0) = \rho cV \frac{dT}{dt} \quad \text{soit:} \quad \frac{dT}{T - T_0} = -\frac{hS}{\rho cV} \quad (\text{Eq. I.29})$$

d'où :

$$\frac{T-T_0}{T_i-T_0} = \exp\left(-\frac{hS}{\rho cV} t\right) \quad (\text{Eq. I.30})$$

On remarque que le  $\frac{\rho cV}{hS}$  groupement est homogène à un temps, on l'appellera  $\tau$  la constante de temps du système :

$$\tau = \frac{\rho cV}{hS} \quad (\text{Eq. I.31})$$

Cette grandeur est fondamentale dans la mesure où elle donne l'ordre de grandeur de temps du phénomène physique, on a en effet :

$$\frac{T-T_0}{T_i-T_0} = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (\text{Eq. I.32})$$

Il est toujours intéressant en physique de présenter les résultats sous forme adimensionnelle, on verra que deux nombres adimensionnels sont particulièrement importants en régime variable :

- Le nombre de Biot :

$$B_i = \text{nombre de Biot} = \frac{\text{Resistance thermique interne } \frac{\ell}{\lambda S}}{\text{Resistance thermique externe } \frac{1}{hS}} \quad (\text{Eq. I.33})$$

$\ell$  est la dimension caractéristique du milieu,  $r = \ell$  pour une sphère.

$$\text{Soit : } B_i = \frac{h\ell}{\lambda} \quad (\text{Eq. I.34})$$

L'hypothèse d'uniformité de la température est justifiée lorsque  $B_i < 0,1$ .

- Le nombre de Fourier :

$$F_o = \frac{at}{\ell^2} \quad (\text{Eq. I.35})$$

La connaissance des nombres de Biot et de Fourier permet de déterminer l'évolution de la température de la sphère. On considère généralement qu'un système tel que  $B_i < 0,1$  peut être considéré comme étant à température uniforme, le critère  $B_i < 0,1$  est appelé le critère d'accommodation thermique.

### **I.4.1.2. Milieu semi-infini**

Un milieu semi-infini est une paroi d'épaisseur suffisamment grande pour que la perturbation appliquée sur une face ne soit pas ressentie par l'autre face. Un tel système représente l'évolution d'un mur d'épaisseur finie pendant un temps suffisamment court pour la perturbation créée sur une face n'ait pas atteint l'autre face (vrai tout le temps que la température de l'autre face n'a pas varié).

## **I.4.2. Convection sans changement d'état [2]**

### **I.4.2.1. Généralités. Définitions**

Les transferts de chaleur qui s'effectuent simultanément avec des transferts de masse sont dits transferts de chaleur par convection. Ce mode d'échange de chaleur existe au sein des milieux fluides dans lesquels il est généralement prépondérant.

### **I.4.2.2. Convection naturelle et forcée**

Selon la nature du mécanisme qui provoque le mouvement du fluide on distingue :

- La convection libre ou naturelle : le fluide est mis en mouvement sous le seul effet des différences de masse volumique résultant des différences de températures sur les frontières et d'un champ de forces extérieures (la pesanteur).
- La convection forcée : le mouvement du fluide est induit par une cause indépendante des différences de température (pompe, ventilateur...).

L'étude du transfert de chaleur par convection permet de déterminer les échanges de chaleur se produisant entre un fluide et une paroi.

#### Régime d'écoulement

Compte-tenu du lien entre le transfert de masse et le transfert de chaleur, il est nécessaire de considérer le régime d'écoulement. Considérons à titre d'exemple l'écoulement d'un fluide dans une conduite :

- En régime laminaire, l'écoulement s'effectue par couches pratiquement indépendantes. :

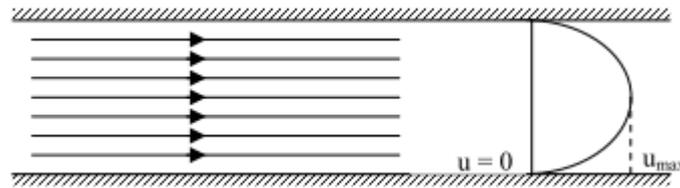


Fig. I.4 Ecoulement en régime laminaire.

Entre deux filets fluides adjacents les échanges de chaleur s'effectuent donc :

- Par conduction uniquement si l'on considère une direction normale aux filets fluides.
- Par convection et conduction (négligeable) si l'on considère une direction non normale aux filets fluides.
- En régime turbulent, l'écoulement n'est pas unidirectionnel :

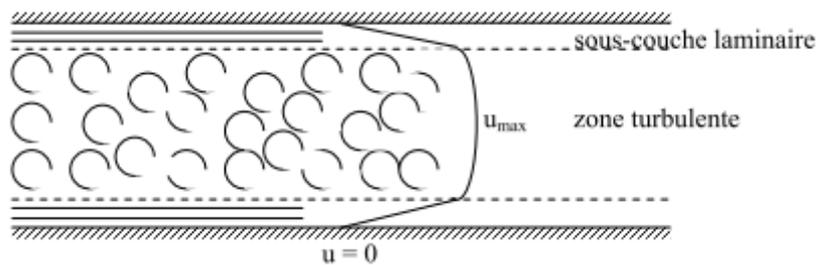


Fig. I.5 Ecoulement en régime turbulent.

L'échange de chaleur dans la zone turbulente s'effectue par convection et conduction dans toutes les directions. On vérifie que la conduction est généralement négligeable par rapport à la convection.

### I.4.2.3. Expression du flux de chaleur

#### a. Analogie de Reynolds

De même qu'au niveau moléculaire on explique la viscosité des gaz par la transmission des quantités de mouvement des molécules lors des chocs intermoléculaires, on explique la transmission de la chaleur par la transmission d'énergie cinétique lors de ces mêmes chocs.

Cette liaison intime des phénomènes de viscosité et de transfert de chaleur conduisent à l'analogie de

*Reynolds* : dans un écoulement fluide avec transfert de chaleur dans un tube, le profil des vitesses et le profil des températures sont liés par une relation de similitude :

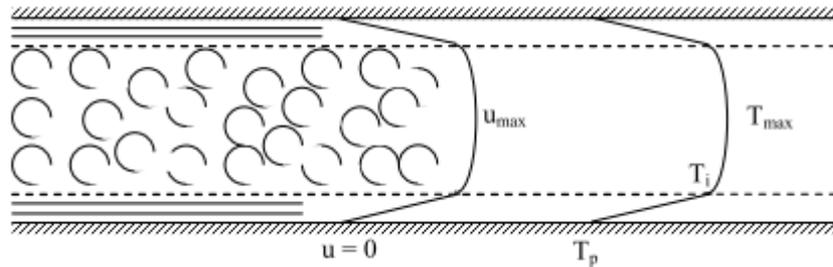


Fig. I.6 Similitude des profils de vitesses et de températures.

### b. Couches limites dynamiques et thermiques

Quelque soit le régime d'écoulement, il demeure une sous-couche laminaire (couche limite dynamique) dont l'épaisseur est d'autant plus réduite que le nombre de Reynolds est grand. L'épaisseur de cette couche limite varie en fonction de nombreux paramètres : nature du fluide, température, rugosité de la paroi...

L'analogie de Reynolds montre que le gradient thermique est particulièrement important au voisinage de la paroi, c'est à dire dans la sous-couche laminaire. Quelque soit le régime d'écoulement du fluide, on considère que la résistance thermique est entièrement située dans le film laminaire qui joue le rôle d'isolant thermique (couche limite thermique).

### c. Expression du flux de chaleur

On considère que cette résistance thermique  $R$  est équivalente à celle que le flux de chaleur rencontrerait en conduction à travers une paroi dont l'épaisseur serait celle du film laminaire et qui posséderait les mêmes caractéristiques thermiques que le fluide soit :

$$R = \frac{e}{\lambda} \quad (\text{Eq. I.36})$$

avec :

- $e$  épaisseur du film laminaire
- $\lambda$  conductivité thermique du fluide

Rigoureusement, le flux de chaleur par unité de surface s'écrit alors :

$$\varphi = \frac{\lambda}{e} (T_P - T_i) \quad (\text{Eq. I.37})$$

où  $T_i$  est la température à la limite du film laminaire.

Pour un régime thermique bien établi, on peut considérer en première approximation que par suite des courants de convection la masse fluide au-delà du film laminaire est à une température constante et prendre comme loi de la densité de flux de chaleur la relation :

$$\varphi = \frac{\lambda}{e} (T_P - T_\infty) \quad (\text{Eq. I.38})$$

Avec :

$T_\infty$  : Température du fluide loin de la paroi ( $^{\circ}\text{C}$ ) qui correspond au modèle de Prandtl représenté ci-après à titre d'exemple pour l'écoulement d'un fluide dans une conduite :

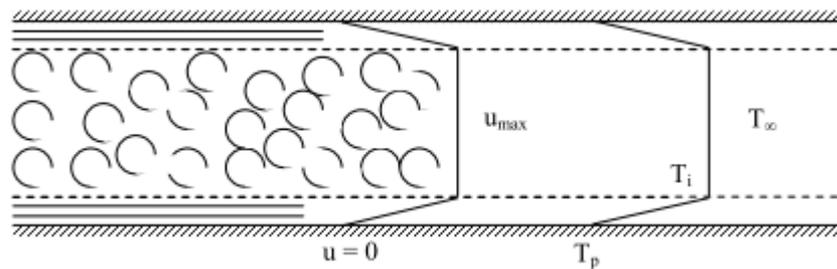


Fig. I.7 Modèle de Prandtl pour l'écoulement d'un fluide dans une conduite.

$T_\infty$ , qui est la température moyenne du fluide dans une section perpendiculaire à l'écoulement dans le cas de la circulation d'un fluide dans une canalisation, dépend du régime d'écoulement. Dans le cas d'un échange paroi-fluide, on prendra pour  $T_\infty$  la température du fluide loin de la paroi.

#### I.4.2.3. Loi de Newton. Valeur du coefficient de transfert

Cette loi simple présente néanmoins une énorme difficulté dans son application puisque l'on ne connaît pas l'épaisseur  $e$  du film laminaire. C'est ce qui amène à définir un coefficient de transfert superficiel ou coefficient de transfert de chaleur par convection par :

$$h = \frac{\lambda}{e} \quad (\text{Eq. I.39})$$

Quelque soit le type de convection (libre ou forcée) et quelque soit le régime d'écoulement du fluide (laminaire ou turbulent), le flux de chaleur  $\phi$  est donné par la relation dite loi de Newton :

$$\varphi = hS \Delta\theta \quad (\text{Eq. I.40})$$

Le problème majeur à résoudre avant le calcul du flux de chaleur consiste à déterminer  $h$  qui dépend d'un nombre important de paramètres : caractéristiques du fluide, de l'écoulement, de la température, de la forme de la surface d'échange,...

#### I.4.2.4. Calcul du flux de chaleur en convection forcée

L'application de l'analyse dimensionnelle montre que la relation liant le flux de chaleur transféré par convection aux variables dont il dépend peut être recherchée sous la forme d'une relation entre trois nombres adimensionnels :

$$N_U = f(R_e, P_r) \quad (\text{Eq. I.41})$$

Définis par :

$$N_U = \frac{hD}{\lambda} \quad \text{Nombre de Nusselt} \quad (\text{Eq. I.42})$$

$$R_e = \frac{\rho u D}{\mu} \quad \text{Nombre de Reynolds} \quad (\text{Eq. I.43})$$

$$P_r = \frac{c_p \mu}{\lambda} \quad \text{Nombre de Prandtl} \quad (\text{Eq. I.44})$$

Le calcul d'un flux de chaleur transmis par convection forcée s'effectue donc de la manière suivante :

1. Calcul des nombres adimensionnels de Reynolds et de Prandtl.
2. Suivant la valeur de  $Re$  et la configuration  $\rightarrow$  choix de la corrélation.
3. Calcul de  $Nu$  par application de cette corrélation

$$h = \frac{\lambda N_U}{D} \text{ et } = hS(T_P - T_\infty) \quad (\text{Eq. I.45})$$

### I.4.2.5. Calcul du flux de chaleur en convection naturelle

#### a. Mécanisme de la convection naturelle

Considérons un fluide au repos en contact avec une paroi plane à température  $T_0$ . Si l'on porte la paroi à une température  $T = T_0 + \Delta T$ , le fluide au contact de la paroi va s'échauffer par conduction et la masse du volume unité va passer de  $\rho_0$  à  $\rho_0 - \Delta\rho$  :

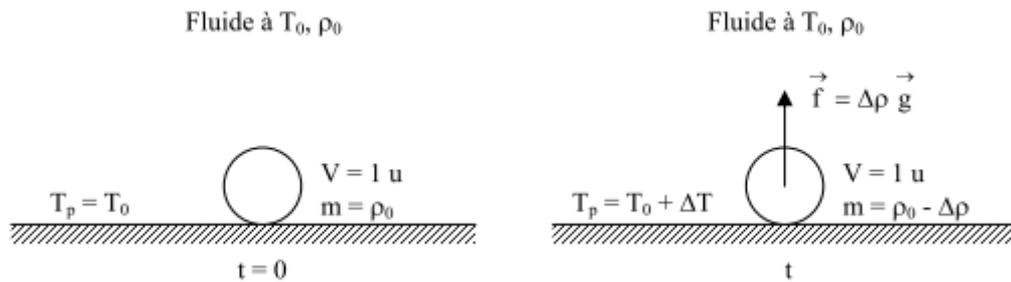


Fig. I.8 Echauffer du fluide au contact de la paroi.

Il sera donc soumis à une force ascensionnelle Le  $\vec{f} = -\Delta\rho\vec{g}$  principe fondamental de la dynamique permet d'évaluer l'accélération du fluide :

Pour un volume unité :  $m = \rho$  d'où :  $\Delta\rho g = \gamma \rho$  et  $\gamma = \frac{\Delta\rho}{\rho} g$

En introduisant le coefficient de dilatation cubique  $\beta$  du fluide défini par  $\beta = \frac{1}{\rho} \frac{\Delta\rho}{\Delta T}$

il devient :  $\beta = \gamma g \Delta T$ .

$\beta g \Delta T$  est donc le module de l'accélération produite par l'expansion thermique due à la variation  $\Delta T$  de la température  $T_0$ . Ce mouvement du fluide induit par les différences de masse volumique résultantes des gradients de température va donner naissance aux courants de convection.

#### b. Calcul du flux de chaleur

L'application de l'analyse dimensionnelle montre que la relation liant le flux de chaleur transféré par convection aux variables dont il dépend peut être recherchée sous la forme d'une relation entre trois nombres adimensionnels :  $Nu = f(Gr, Pr)$  définis par :

$$Nu = \frac{hD}{\lambda} \quad \text{Nombre de Nusselt} \quad (\text{Eq. I.46})$$

$$G_r = \frac{\beta g \Delta T \rho^2 L^3}{\mu^2} \quad \text{Nombre de Grashof} \quad (\text{Eq. I.47})$$

$$P_r = \frac{c_p \mu}{\lambda} \quad \text{Nombre de Prandtl} \quad (\text{Eq. I.48})$$

### I.4.3. Transfert de chaleur par rayonnement

Vu les dimensions du corps à étudier qui sont de l'ordre du  $\mu\text{m}$  ; et la prépondérance des deux autres modes (conduction et convection), le rayonnement du corps est négligeable. Pour cela ce mode sera présenté juste brièvement.

Tous les corps, quelque soit leur état : solide, liquide ou gazeux, émettent un rayonnement de nature électromagnétique. Cette émission d'énergie s'effectue au détriment de l'énergie interne du corps émetteur. Le rayonnement se propage de manière rectiligne à la vitesse de la lumière, il est constitué de radiations de différentes longueurs d'onde comme l'a démontré l'expérience de William HESRCHELL :

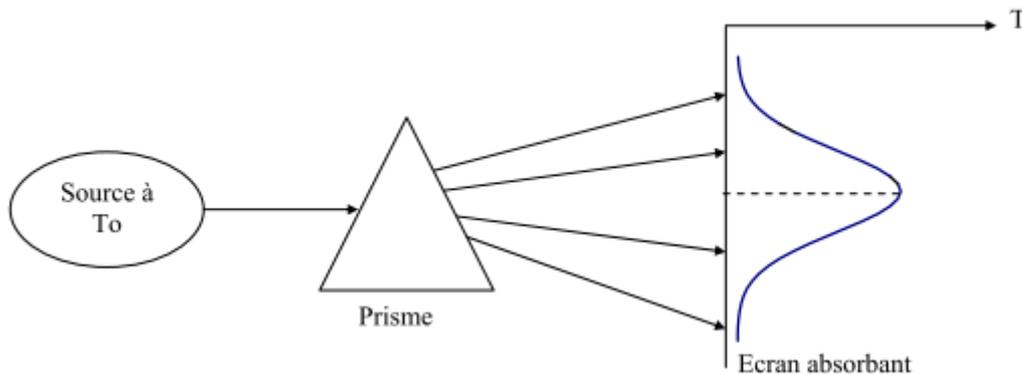


Fig. I.9 Principe de l'expérience de William HESRCHELL .

En passant à travers un prisme, les radiations sont plus ou moins déviées selon leur longueur d'onde. On envoie donc les radiations émises par une source à la température  $T_0$  sur un prisme et on projette le faisceau dévié sur un écran absorbant (noirci), on obtient ainsi la décomposition du rayonnement total incident en un spectre de radiations monochromatiques.

Si l'on déplace le long de l'écran un thermomètre, on mesure la température  $T_e$  caractérisant l'énergie reçue par l'écran dans chaque longueur d'onde. En construisant la courbe  $T_e = f(\lambda)$ , on obtient la répartition spectrale de l'énergie rayonnée pour la température  $T_0$  de la source. On constate alors que:

- L'énergie émise est maximale pour une certaine longueur d'onde  $\lambda_m$  variable avec  $T_0$

- L'énergie n'est émise que sur un intervalle  $[\lambda_1, \lambda_2]$  de longueur d'onde caractérisant le rayonnement thermique.

On trouvera représenté sur la figure ci-dessous les différents types d'ondes électromagnétiques et leurs longueurs d'ondes correspondantes. On retiendra que le rayonnement thermique émis par les corps se situe entre 0,1 et 100  $\mu\text{m}$ . On notera par ailleurs que le rayonnement est perçu par l'homme :

- Par l'œil : pour  $0,31 \mu\text{m} > \lambda > 0,79 \mu\text{m}$  rayonnement visible.
- Par la peau : pour  $0,79 \mu\text{m} < \lambda < 314 \mu\text{m}$  rayonnement IR.

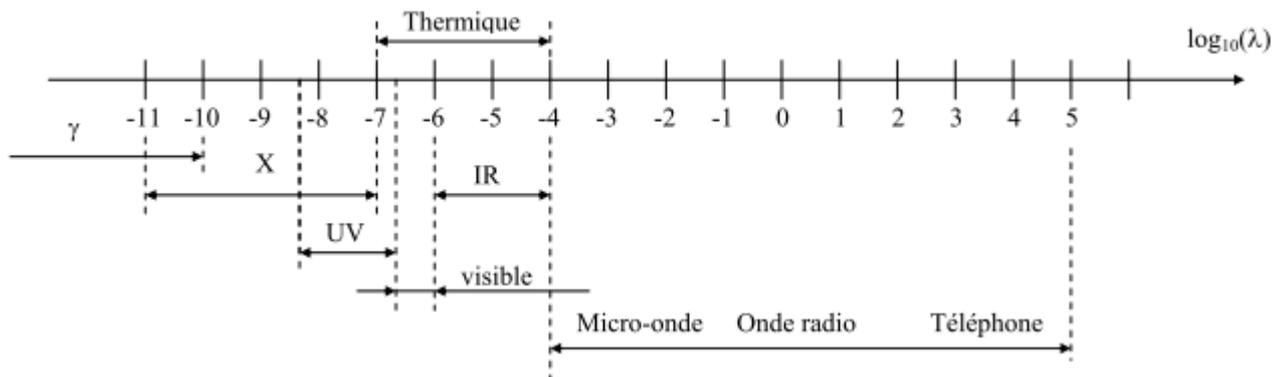


Fig. I.10 Spectre des ondes électromagnétiques.

## I.5. Généralité sur le changement de phase

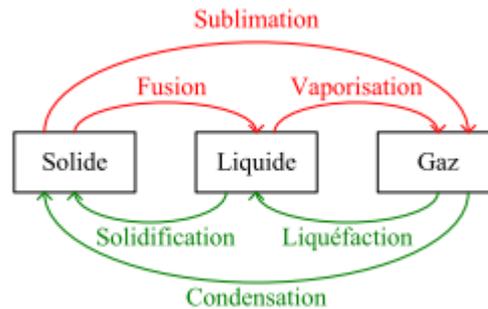
### I.5.1. Introduction

Dans cette partie, nous nous limitons à l'étude des corps purs, c'est-à-dire des substances composées d'une seule espèce chimique. Les corps purs peuvent exister sous les trois états de la matière : liquide, solide ou gazeux. Ces trois états de la matière diffèrent par leurs propriétés thermo-physiques (densité, capacité calorifique...), optiques ou mécaniques. On parle parfois de phase liquide ou solide ou gazeuse, bien que la définition d'une phase ne corresponde pas exactement à la définition de l'état de la matière. En effet, pour certaines substances solides ou liquides, il peut exister plusieurs phases d'un même état qui se distinguent par l'arrangement des atomes, molécules ou particules et qui va correspondre à des propriétés différentes du matériau (exemples : le Fer possède deux phases solides différentes correspondant à des arrangements d'atomes différents dans le réseau cristallin, l'Hélium possède deux phases liquides différentes).

Chaque phase est caractérisée par des grandeurs intensives continues dans l'espace. Une variation soudaine d'une ou de plusieurs des grandeurs intensives caractérisant le système

peut provoquer un changement d'état (ou changement de phase ou transition de phase) de tout ou d'une partie du système.

- système composé d'une seule phase = système monophasique (homogène).
- système composé de deux phases = système diphasique (hétérogène).
- système composé de plusieurs phases = système polyphasique (hétérogène).



On sait par expérience qu'un changement de phase commence à se manifester à l'échelle microscopique : c'est la nucléation (exemples : des petites gouttes de liquide microscopiques apparaissent au sein d'une phase vapeur avant que celle-ci ne se condense totalement sous forme liquide, la solidification d'un liquide s'amorce à partir de germes cristallins microscopiques de la phase solide...).

Dans les deux états dits condensés de la matière (solide ou liquide), les forces entre les atomes ou les molécules déterminent la structure de la matière. Ce sont les forces intermoléculaires qui contribuent à la cohésion d'un liquide ou d'un solide.

Dans le cas du changement de phase solide-liquide ou inverse, la formulation mathématique du phénomène et plus connu sous le nom du **problème de Stefan**.

### I.5.2. Variance — règle des phases

Phase : système caractérisé par la continuité des paramètres intensifs  $T$ ,  $P$ ,  $\mu$ ,  $s...$

Phase homogène : les paramètres intensifs sont uniformes dans tout le système (ils ne dépendent pas de la position dans le système)

Définition : la variance d'un système est le nombre de paramètres intensifs indépendants.

Exemples :

- Pour un gaz,  $v = 2$  ( $P$  et  $T$  peuvent varier indépendamment)
- Pour un mélange eau(L) — eau(g),  $v = 1$  (si  $P$  est fixé, par exemple 1Atm,  $T$  est parfaitement déterminé, ici  $0^\circ\text{C}$ )
- Pour un mélange de deux gaz:  $P_1, P_2, T$  sont indépendants ;  $v = 3$

La règle des phases est :  $v = c + 2 - \varphi$  (Eq. I.49)

( $\varphi$  est le nombre de phases distinctes,  $c$  le nombre de corps purs).

### I.5.3. Le problème de Stefan [6]

Le problème de Stefan décrit l'évolution en temps d'une interface liquide-solide dans des problèmes avec changement de phase. Le problème consiste à trouver la température et la position de l'interface entre deux phases d'un matériel pur.

La simulation numérique de ce problème est plus difficile que celle du problème d'advection à cause du couplage non-trivial entre la vitesse de propagation de l'interface et la solution.

Soit  $\Omega$  le domaine du matériel, pour lequel en chaque point le matériel est soit liquide soit solide. La région où le matériel est liquide est notée  $\Omega_1$  et la région où le matériel est solide est notée  $\Omega_2$ . Soit  $V$  la vitesse à laquelle l'interface se déplace.

Les équations qui modélisent ce problème sont les suivantes :

$$C_1 \frac{dT}{dt} = \frac{d}{dx} \left( k_1 \frac{dT}{dx} \right) \text{ si } x \in \Omega_1 \quad (\text{Eq. I.50})$$

$$C_2 \frac{dT}{dt} = \frac{d}{dx} \left( k_2 \frac{dT}{dx} \right) \text{ si } x \in \Omega_2 \quad (\text{Eq. I.51})$$

Au front, la vitesse  $V$  satisfait la condition suivante :

$$LV = - \left[ k_1 \frac{dT_{liq}}{dx} - k_2 \frac{dT_{sol}}{dx} \right] \quad (\text{Eq. I.52})$$

$L$  est la chaleur latente de solidification,  $C_1$ ,  $C_2$  sont les capacités volumiques de la chaleur,  $k_1$  et  $k_2$  sont les coefficients de diffusion thermique respectivement dans les phases 1 et 2.

La température au front est donnée. On la note  $T_F$ . Elle est constante et correspond à la température de changement de phase du matériel.

La position du front est régie par l'équation :

$$\frac{dx_F}{dt} = V \quad (\text{Eq. I.53})$$

## I.6. Conclusion

Au terme de cette étude, il apparaît que la formulation d'un problème en transfert thermique fait appel en grande partie à une bonne maîtrise de l'outil mathématique et à une bonne compréhension du phénomène à étudier, afin de bien poser les hypothèses qui le décrivent.

Nous retiendrons aussi, que la solution exacte n'est possible que pour des problèmes simples et monodimensionnels, pour les autres cas on recourt à l'outil informatique et exige, que se soit la programmation ou l'utilisation de codes commerciaux.

# CHAPITRE

## II

# Modèle physique

### SOMMAIRE

### PAGE

---

|  |    |
|--|----|
| <u>II. 1. Introduction</u> .....                 | 31 |
| <u>II.2. Modèle de transfert thermique</u> ..... | 32 |
| <u>II.3. Conclusions</u> .....                   | 37 |

---

Victor Hugo (1802 ,1885) :

I l vient une heure où protester ne  
suffit plus : après la philosophie, il faut l'action.

## II. 1. Introduction

Ce chapitre est consacré au développement du modèle physique nécessaire à l'étude du traitement thermique de particules homogènes pur, injecté dans un jet à haute température.

L'accent est mis sur la simulation du traitement thermique des particules, conduction interne et les changements de phase susceptibles de se produire.

Les particules étudiées ont un rayon inférieur  $50\mu\text{m}$  et sont constituées de matériaux homogènes et isotropes, obtenues par exemple par mécanofusion. Elles sont utilisées essentiellement pour produire des revêtements métalliques minces. L'extension de l'étude au changement de phase bidimensionnel et transitoire, est effectuée dans le but de quantifier l'effet d'un chauffage uniforme et non uniforme (détermination du gradient de température dans la particule) et ainsi prédire son comportement thermique (solidification, fusion et évaporation).

Nous considérons le cas d'un milieu infini, où la particule est immobile et la température du fluide est constante.

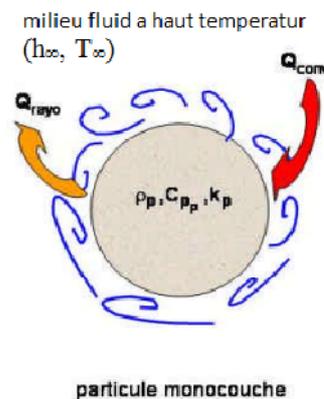


Fig. II.1 Section droite d'une particule sphérique. [2]

Les différents changements de phase susceptibles de s'effectuer dans une particule sous des conditions de haute température. Ceci peut faire de la particule une succession plus ou moins complexe de phases, comme schématisé sur la Figure II.2. Pour ce qui concerne notre étude nous traiterons seulement le changement de phase solide liquide (fusion ou solidification).

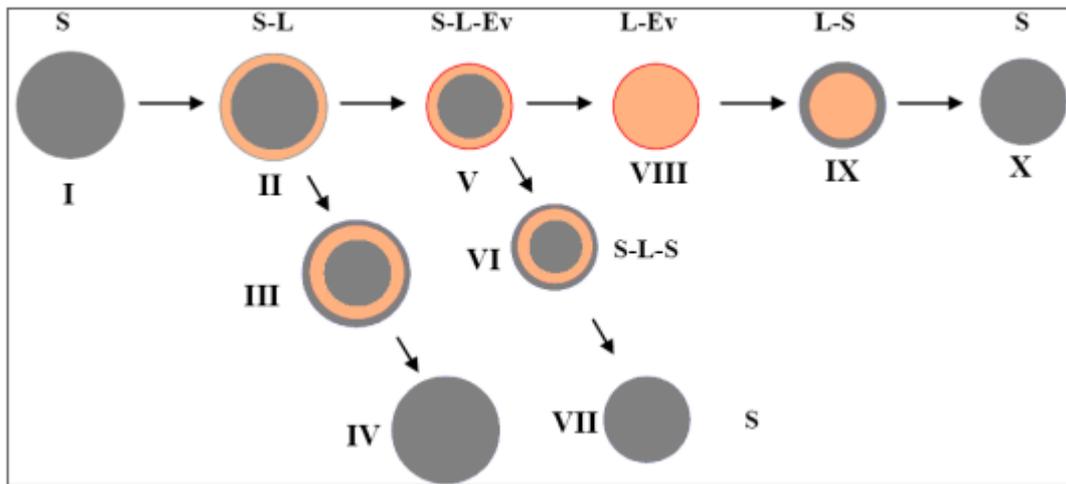


Fig. II.2 Transformations de phases (solide-liquide-vapeur) possibles pour une particule mono matériau. [3]

## II.2. Modèle de transfert thermique

Le traitement d'une particule de poudre dans un fluide nous amène à considérer simultanément son aspect thermique et son aspect dynamique puisqu'il recouvre le transfert de chaleur (convection, conduction et rayonnement), le transfert de masse (évaporation) et le transfert de quantité de mouvement (traînée). La Figure II-3 résume les paramètres et les phénomènes à prendre en compte pour étudier et modéliser le comportement d'une particule de matière dans un fluide à haute température. Pour ce qui nous concerne, l'étude est seulement portée sur la simulation du traitement thermique de la particule (transfert de chaleur et changement de phase).

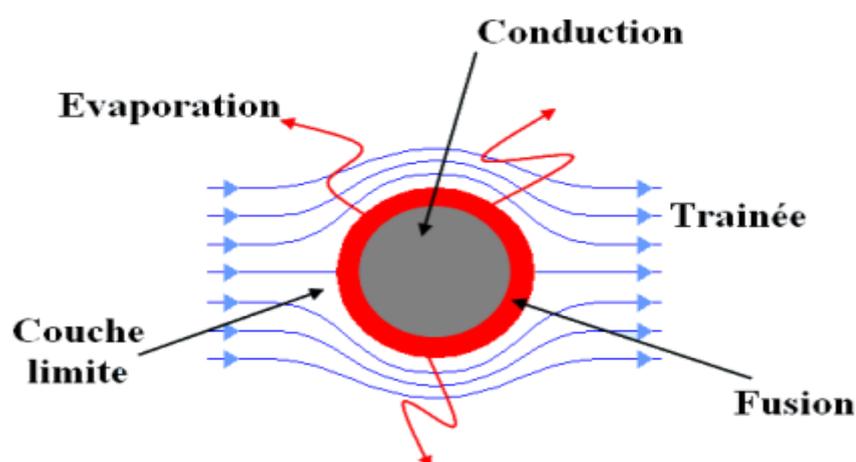


Fig. II.3 Aspects considérés dans le traitement d'une particule injectée dans un fluide à haute température. [3]

### II.2.1. Modèle thermiquement mince

La température d'une particule isolée injectée dans le jet est calculée tout en négligeant la conduction interne de la chaleur, en d'autres termes, la particule est considérée comme un milieu thermiquement mince donc à conductivité thermique infinie, c'est-à-dire à température uniforme. Le traitement thermique d'une particule peut être décrit en quatre étapes [3] :

- échauffement de la particule solide : la température de la particule est calculée à partir de l'énergie totale qu'elle absorbe à sa surface.

$$\frac{dT_P}{dT} = \frac{6 \cdot Q_n}{\pi \cdot d_P^3 \cdot c_P \cdot \rho_P} \quad (\text{Eq. II.1})$$

$Q_n$  est l'énergie nécessaire pour chauffer la particule par conduction-convection.

- fusion de la particule : la fusion s'effectue à température constante ( $T = T_f$ ), quand la température de la particule atteint la température de fusion. L'énergie transmise du fluide à la particule est supposée totalement convertie en énergie latente de fusion  $\Delta H_f$ , la fraction fondue de la particule est donnée par l'équation :

$$\frac{dX_P}{dT} = \frac{6 \cdot Q_n}{\pi \cdot d_P^3 \cdot \Delta H_f \cdot \rho_P} \quad (\text{Eq. II.2})$$

$X_P$  étant la fraction fondue de la particule comprise entre 0 et 1.

- échauffement de la particule liquide : au cours de cette étape deux cas sont possibles, la particule s'évaporant ou non. Si la particule ne s'évapore pas, son échauffement est semblable à celui déterminé dans son état solide décrit par l'équation Eq. II.1 mais avec la chaleur spécifique de la phase liquide.
- évaporation de la particule liquide : si la particule s'évapore, le diamètre de la particule varie selon l'équation suivante :

$$\frac{d(d_P)}{dT} = \frac{6 \cdot Q'_n}{\pi \cdot d_P^3 \cdot \Delta H_V \cdot \rho_P} \quad (\text{Eq. II.3})$$

$Q'_n$  est l'énergie dissipée par l'évaporation ( $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ). Quand la température de la particule atteint la température d'ébullition ( $T_p = T_b$ ), toute l'énergie absorbée par la particule est convertie en énergie latente d'évaporation.

## II.2.2. Hypothèses

Pour représenter le transfert de chaleur, entre le fluide et une particule isolée, il est considéré que :

- la particule est sphérique et monolithique ;
- les fronts de fusion sont des surfaces avec une tension de surface négligeable ;
- pas de solidification éventuelle de la particule fondue ;
- pas d'évaporation subie par la particule ;
- la couche limite qui entoure la particule est en équilibre thermodynamique local ;
- l'oxydation des matériaux métalliques n'est pas prise en compte ;
- le milieu fluide est optiquement mince ;
- Le mode de transfert par conduction est prépondérant.

## II.2.3. Formulation mathématique

### II.3.3.1 Méthode à capacité thermique effective

La méthode à capacité thermique effective pour résoudre les problèmes de conduction de chaleur avec changement de phase est basée sur l'utilisation d'une capacité thermique efficace sur la plage de fusion, directement proportionnelle à la chaleur latente. Cette méthode utilise le concept de trois plages de température à capacité thermique différente au sein du système. La région où la fusion et la solidification se produit doit être prise comme une plage de températures, même pour un matériau pur. Cette gamme de température est caractérisée par une capacité thermique effective qui est régi par Eq. II.4.

Où,  $H_f$  est la chaleur latente de fusion et de  $\Delta T_f$  est la gamme relativement restreinte de températures, on suppose que la fusion s'y produit [5].

$$C_{Peff} = \frac{H_f}{\Delta T_f} \quad (\text{Eq. II. 4}).$$

### II.3.3.2 Transfert de chaleur

Considérons une particule solide de rayon  $R$ . La distribution de température dans la sphère peut être décrite par l'équation de continuité du flux d'énergie thermique, adaptée à sa géométrie sphérique :

$$\rho_s C_{ps} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 K_s \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (\text{Eq. II.5})$$

Considérons les conditions aux limites, au centre de la particule ( $r = 0$ ) la symétrie du domaine étudié permet d'écrire :

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{Eq. II.6})$$

Tandis qu'en surface ( $r = R$ ), le transfert de chaleur s'effectue par convection :

$$K_s \frac{\partial T}{\partial r} = h \cdot (T_\infty - T_s) \quad (\text{Eq. II.7})$$

Le coefficient de transfert de chaleur est calculé à partir de la corrélation de Ranz et Marshall :

$$h = \frac{N_U \bar{K}}{d_p} \quad (\text{Eq. II.8})$$

### II.2.3.3 Fusion : Problème de Stefan

Quand la température de surface atteint la température de fusion du matériau, une phase liquide apparaît et sa distribution de température peut être décrite comme pour celle de la phase solide :

$$\rho_l C_{pl} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 K_l \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (\text{Eq. II.9})$$

A l'interface solide-liquide, la température est égale à la température de fusion  $T = T_f$ , la position du front de changement de phase solide-liquide est déterminée par la résolution du problème de Stefan. Il s'agit de la formulation mathématique la plus classique, utilisée souvent comme référence pour les autres formulations. Cette formulation de base suppose plusieurs hypothèses simplificatrices qui restent, pour la plupart, acceptables :

- le transfert de chaleur est principalement conductif dans les deux phases solide et liquide, et la diffusion est isotrope ;
- la température de changement de phase d'un corps est une constante qui ne dépend que du corps lui-même ;
- l'interface entre les phases liquide et solide est fine (surfacique) ;
- la tension de surface à cette interface est négligeable ;

- les propriétés thermo-physiques du matériau sont différentes entre les deux phases, mais constantes au sein de chaque phase ;
- il n'y a pas de surfusion.

La vitesse du front de changement de phase solide-liquide est donnée par l'évolution dans le temps de sa position  $R_{sl}$  :

$$\vartheta_{sl} = \frac{\partial R_{sl}}{\partial t} \quad (\text{Eq. II.10})$$

La vitesse du front de changement de phase est donnée par la condition de Stefan (condition de flux thermique) :

$$K_s \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right| - K_l \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right| = \rho_l L_{sl} \vartheta_{sl} \quad (\text{Eq. II.11})$$

En raison de cette dernière condition, le problème de Stefan est non linéaire. Le déplacement de l'interface solide-liquide est fonction du taux de transfert de chaleur au sein des phases solide et liquide. En retour, ce taux dépend de la position et du déplacement de l'interface. De façon pratique, il faut recourir à des méthodes de résolution numériques.

#### II.2.3.4 Solution de Newman pour le suivie de l'interface solide/liquide

Une solution particulière du problème existe, et est particulièrement utile pour définir la distribution de la température et la position du front de fusion, dans le cas unidimensionnelle. Elle est dite la solution de Newman [3]. Pour cette solution exacte on suppose que corps et la température initiale  $V$  et a pour  $t > 0$  la surface  $X = 0$  est soumise la température constante  $T_w$ . Les conditions aux limites des équations sont redéfinies pour être :

$$v_2 \rightarrow V \text{ pour } x \rightarrow \infty \text{ et } v_1 = T_w \text{ pour } x = 0 \quad (\text{Eq. II.12})$$

En résolvant l'équation de la chaleur pour les deux phases avec les conditions de Stefan, on arrive à l'équation transcendante suivante :

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{\text{erf}(\lambda)} - \frac{K_2 \cdot K_1^{1/2} \cdot (V - T_1) \cdot e^{-K_1 \lambda^2 / K_2}}{K_1 \cdot K_2^{1/2} \cdot (T_1 - T_w) \cdot \text{erfc}(\lambda \cdot (\frac{K_1}{K_2})^{1/2})} = \frac{\lambda \cdot H_f \cdot \pi^{1/2}}{c_1 \cdot (T_1 - T_w)} \quad (\text{Eq. II.13})$$

La position de l'interface solide-liquide est simplement donnée par :

$$X = 2 \cdot \lambda \cdot (K_1 \cdot t)^{1/2} \quad (\text{Eq. II. 14})$$

En plus de l'équation définissant l'emplacement de l'interface solide-liquide il est également possible d'obtenir les expressions qui définissent les températures dans les deux phases:

$$v_1 = T_w + \frac{T_1 - T_w}{\text{erf}(\lambda)} \cdot \text{erf} \left( \frac{x}{2 \cdot (K_1 \cdot t^{1/2})} \right) \quad (\text{Eq. II. 15})$$

$$v_2 = V + \frac{T_1 - T_w}{\text{erf}(\lambda)} \cdot \text{erf} \left( \frac{x}{2 \cdot (K_1 \cdot t^{1/2})} \right) \quad (\text{Eq. II. 16})$$

### II.3. Conclusions

Ce chapitre, détaille le modèle développé pour étudier le transfert de chaleur fluide-particule et les changements de phase susceptibles d'avoir lieu dans une particule émergée. La conduction de la chaleur et la distribution de la température dans la sphère sont décrites par l'équation de continuité du flux d'énergie thermique, adaptée à la géométrie sphérique. Les mouvements des fronts de changement de phase sont calculés par la résolution du problème de Stefan.

# CHAPITRE



# Simulation sous COMSOL4.0a

| SOMMAIRE   | PAGE |
|--|------|
| <u>III.1 Introduction</u> .....                          | 38   |
| <u>III.2 Présentation du logicielle COMSOL4.0a</u> ..... | 38   |
| <u>III.3 Présentation du Module utilisé</u> .....        | 39   |
| <u>III.4 Construction du model pour COMSOL</u> .....     | 40   |
| <u>III.5 Conclusion</u> .....                            | 46   |

Gustave, Le Bon (1841,1931) :

Pour progresser, il ne suffit pas de vouloir  
agir, il faut d'abord savoir dans quel sens agir.

### III.1 Introduction

La simulation sur ordinateur est devenue un allier essentielle pour le scientifique, l'ingénieure et l'industrielle. L'analyse numérique des composantes, est particulièrement importante en développant des produits ou en optimisation des modèles. Aujourd'hui un grand éventail d'options pour la simulation est parcourable ; les chercheurs utilisent tous des langages de programmation fondamentaux à de divers modules à niveau élevé appliquant des méthodes avancées. Bien que chacune de ces techniques ait ses propres attributs, ils partagent tous le même souci : Prouvent-ils compter sur les résultats ? [5]

La première partie de ce chapitre est consacré a la présentation du logicielle de simulation **COMSOL 4.0a**, et aussi les module utiliser pour notre simulation.

La seconde partie est dédiée à la construction des modèles. Et leurs validations.

### III.2 Présentation du logicielle COMSOL4.0a

Le logicielle COMSOL Multiphysics est produit comme un résolveur numérique des problèmes de la physique base sure la méthode d'analyse par éléments finis.

COMSOL Multiphysics est un environnement interactif puissant pour modéliser et résoudre toutes sortes de problèmes scientifiques. Base sure la méthode d'analyse par éléments finis. Il fournit un environnement de travail puissant pour la construction des modèles, qui permet d'accéder à toutes ses fonctionnalités. Il offre aussi la possibilité de simuler les phénomènes physique couplée. [5]

Conçu comme une plate-forme flexible qui permettra même à des utilisateurs débutants de modéliser tous les aspects matériels appropriés de leurs modèles. Les utilisateurs avancés peuvent aller plus profonds et employer leur connaissance pour développer les solutions personnalisées, applicables à leurs seules circonstances. Avec ce genre d'environnement de modélisation inclusif, COMSOL donne la possibilité d'ajouter n'importe quel effet matériel aux modèles. En effet dans notre cas, il nous a permit d'ajouter deux fonctions, permettant a notre model de prendre en considération le changement de phase.

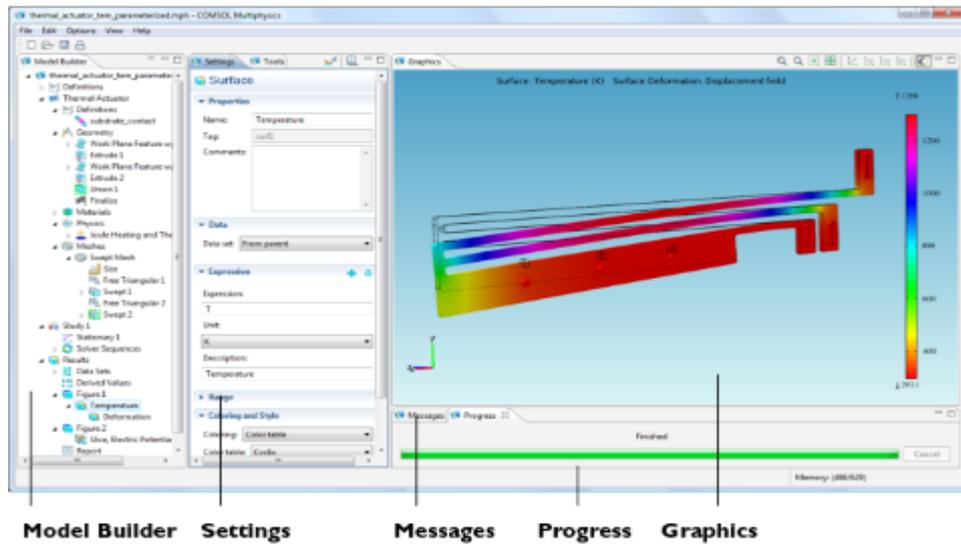


Fig. III.1 Environnement du COMSOL 4.0a.

### III.3 Présentation du Module utilisé

Le module de transfert de chaleur est un module optionnel dans COMSOL Multiphysics. Il offre une interface utilisateur personnalisée, doter d'un environnement et de fonctionnalité optimisée, pour l'analyse et la modélisant du transfert de chaleur. Il est développé par une large assistance comprenant des chercheurs, des professeurs et des élèves. Pour aider les utilisateurs à tous les niveaux des compétences.

Ce module a été développé pour augmenter les capacités de base parcourables dans COMSOL Multiphysics. Le module supporte tous les mécanismes principaux comprenant le transfert de chaleur par rayonnement, conductions, convections.[5]

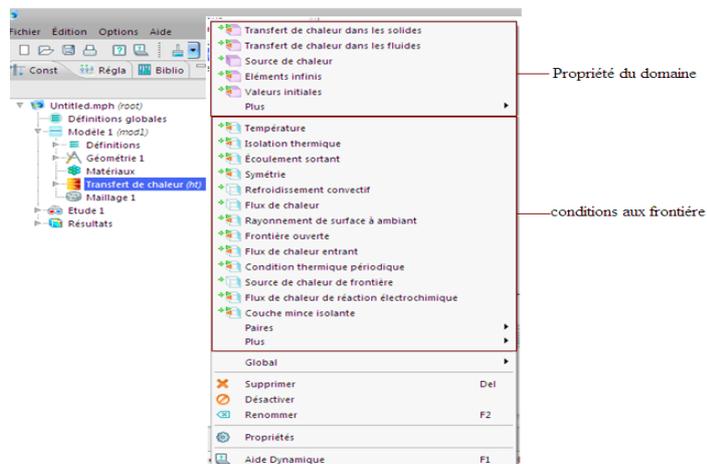


Fig. III. 2 La disposition du menu contextuel des propriétés physique.

### III.4 Construction du model pour COMSOL

Afin de créer une comparaison significative entre la solution analytique, celle des différences finies et celle obtenues par COMSOL Multiphysics. Il est important de créer une définition complète des propriétés physiques des matériaux. En plus des propriétés physiques utilisées pour définir le problème, il était également important de rendre compatibles les hypothèses concernant les températures, afin de créer une relation significative entre les différentes analyses effectuées. Le tableau 1 montre l'ensemble des données utilisées, pour la solution analytique et la solution en différence finie.

**Tableau 1 : Propriétés physique du cuivre.**

| Propriété                      | Symbole  | Valeur                 |
|--------------------------------|----------|------------------------|
| Conductivité thermique solide  | K1       | 365 W/m·K              |
| Conductivité thermique liquide | K2       | 174 W/m·K              |
| Densité solide                 | $\rho_1$ | 8920 kg/m <sup>3</sup> |
| Densité liquide                | $\rho_2$ | 8920 kg/m <sup>3</sup> |
| Chaleur spécifique solide      | Cp1      | 435 J/kg·K             |
| Chaleur spécifique liquide     | Cp2      | 494.5 J/kg·K           |
| Température de fusion          | T1       | 1356 K                 |
| Chaleur de fusion              | Hf       | 205000 J/kg            |
| Température initiale           | Ti       | 1400 K                 |
| Température aux parois         | Tw       | 400 K                  |

Au vu des données analytiques qui sont en notre possession, à savoir les résultats d'une simulation, par un programme en différence finie de la solidification du cuivre en 1-D, qui utilise la méthode enthalpique et qui est validé par une solution exacte dite de Newman. C'est sur cette base que se réalisera la validation du modèle en COMSOL en 1-D, qui sera étendu au modèle 2-D, et traiteront aussi la fusion du matériau.

### III.4.1 Model a une dimension 1-D

#### III.4.1.1 Paramètres du model

Le système physique qui a été créé pour obtenir la solution en 1-D sous COMSOL est indiqué ci-dessous dans la figure III.3.

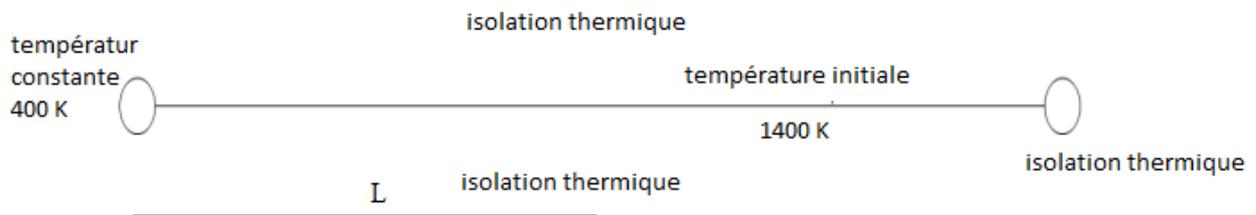


Fig. III.3 Description du system en 1-D sous COMSOL

#### III.4.1.2 Propriété du sous domaine

Tableau 2 : propriétés physique sous COMSOL

| Propriété                     | Symbole | Valeur                 |
|-------------------------------|---------|------------------------|
| Conductivité thermique solide | K1      | 365 W/m·K              |
| Densité                       | $\rho$  | 8920 kg/m <sup>3</sup> |
| Chaleur spécifique            | Cp1     | 465 J/kg·K             |
| Température initiale          | Ti      | 1400 K                 |
| Température aux parois        | Tw      | 400 K                  |
| Température de fusion         | T1      | 1356 K                 |
| Langueur du system            | L       | 0.25 m                 |

Sans modification, COMSOL ne prend pas en considération le phénomène de changement de phase, pour remédier à ce problème on définira deux fonctions, qui apporteront des données permettant à COMSOL de prendre en considération le changement de phase.

##### a. Fonction : $C_{p\_eff}(T)$

$C_{p\_eff}$  est une fonction d'interpolation, qui définit la variation du  $C_{p\_eff}$  par rapport à la température, les valeurs de cette fonction sont obtenues par la pratique. Le tableau 3 montre la variation du  $C_{p\_eff}$  par rapport à la température.

**Tableau 3 fonction:  $C_{p_{eff}}$  en fonction de la température.**

| Température ( K) | $C_{p_{eff}}$ (J/kg.K) |
|------------------|------------------------|
| 298              | 435                    |
| 1340             | 435                    |
| 1350             | 10250                  |
| 1360             | 10250                  |
| 1370             | 494                    |
| 1500             | 494                    |

**b. Fonction :  $K_{eff}$  (T)**

Est une fonction définie par intervalle, qui permet à COMSOL de prendre en considération le changement de conductivité thermique entre la phase liquide et solide. Elle est aussi fonction de la température.

**Tableau 4 fonction:  $K_{eff}$  en fonction de la température.**

| Début (K) | Fin (K) | $K_{eff}$       |
|-----------|---------|-----------------|
| 289       | 1350    | 365             |
| 1350      | 1360    | $1/2*(365+174)$ |
| 1360      | 1500    | 174             |

**III.4.1.3 Résolution**

La résolution des problèmes est lancée pour un temps d'exposition de 30s, avec un pas de temps différent. Les résultats seront affichés dans le chapitre suivant.

**III.4.2 Model en deux dimensions 2-D****III.4.2.1 Paramètres du model (solidification du cuivre)**

Pour pouvoir obtenir une comparaison de la solution COMSOL Multiphysics, et la solution exacte ; il est nécessaire de choisir un système qui peut être lié à ce qui existe déjà.

Le modèle 2-D, est un rectangle pris à une température initiale de 1400 K, isolé sur deux de ses cotés, et soumis à l'instant  $t > 0$  à la température extérieure de 400 K. comme montré en figure III.4

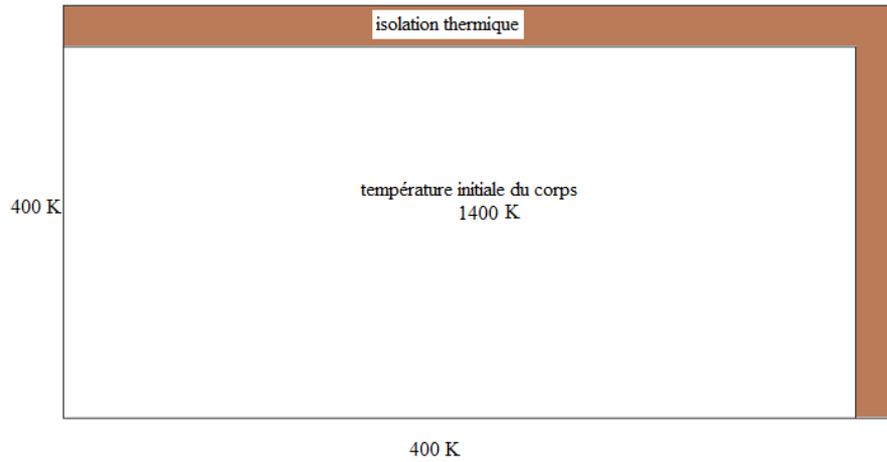


Fig. III.4 Description du system en 2-D sous COMSOL (Solidification).

### III.4.2.2 Propriété du sous domaine

Les propriétés du sous domaine sont les mêmes que pour le modèle en 1-D, on prend le cas du matériau isotrope.

### III.4.2.3 Maillage du modèle

Le maillage du modèle est construit directement avec COMSOL, pour cette géométrie deux types de maillage sont utilisés, un maillage structuré et un maillage triangulaire libre (non structuré), pour les deux types différentes tailles de maille sont utilisées pour déterminer les paramètres optimaux pour l'approche des résultats.

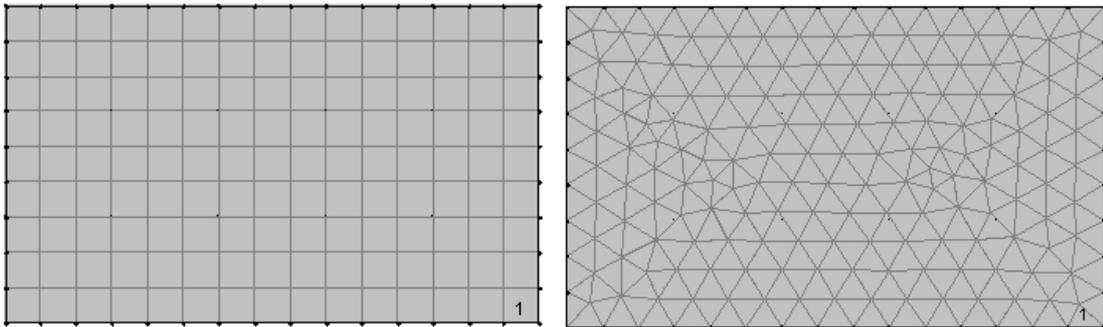


Fig. III.5 maillage de la géométrie, maillage structure gauche et non structure droite.

### III.4.2.4 Résolution

La résolution des problèmes est lancée pour un temps d'exposition de 30s, avec un pas de temps différent. Les résultats seront affichés dans le chapitre suivant.

### III.4.2.5 Paramètres du model (fusion du cuivre)

On se basons sur la même géométrie que pour la solidification ; les mêmes paramètres et la même étude. Seul les conditions initial et aux limite change. Comme c'est montre dans la figure III.5.

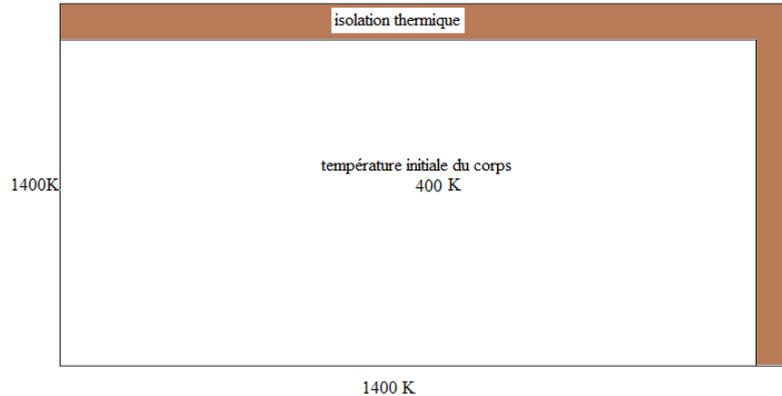


Fig. III.6 Description du system en 2-D sous COMSOL (Fusion).

### III.4.3 Application du model en deux dimension à la géométrie sphérique

#### III.4.3.1 Paramètres du model

Le modèle est une sphère de diamètre ne dépassons pas les  $100\mu\text{m}$ , initialement a la température de 300 K. a l'instante  $t > 0$  la sphère et chauffé, trois études seront faite sure ce model en fonction des conditions aux limites, les deux premier cas seront pris avec condition de type Dirichlet. Une température constante repartie sur tout le périmètre pour le premier cas, et le second avec défiantes températures sur la surface. Pour ce qui concerne le troisième il sera prit avec condition aux limite de type Neumann, le périmètre et soumis a un flux de chaleur constant.

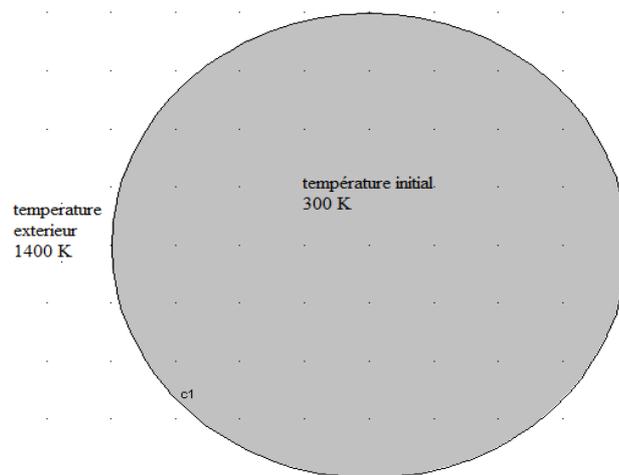


Fig. III.7 Description du system 2-D, cas 1 température constante sur la surface.

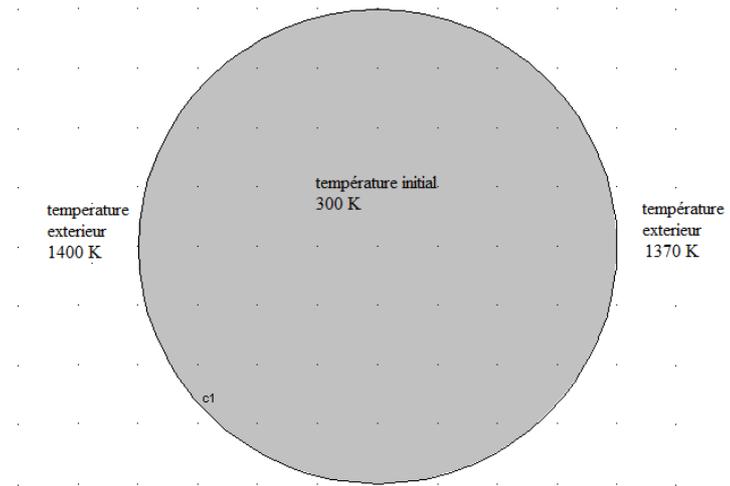


Fig. III.8 Description du system2-D, cas 2 température différent sur la surface.

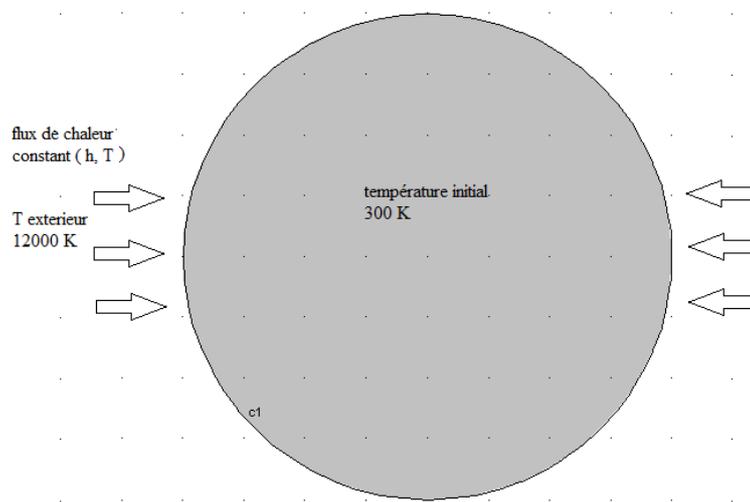


Fig. III.9 Description du system2-D, cas 3 flux de chaleur constant.

### III.4.3.2 Propriété du sous domaine

Les propriétés du sous domaine sont les mêmes que pour le modèle en 1-D, on prend le cas du matériau isotrope.

### III.4.3.3 Maillage

Le maillage utilisé sera défini à partir des résultats obtenus de l'analyse du modèle précédent.

### III.4.3.4 Résolution

La résolution des problèmes est lancée pour un temps d'exposition et de l'ordre de 0.05 à 1 ms, avec différents pas de temps.

### III.5 Conclusion

Dans une première partie de ce chapitre, a été donnée une vue globale sur le logiciel de simulation COMSOL Multiphysics. On peut voir la maniabilité et l'importance d'une interface adaptée à chaque étude. COMSOL offre une grande palette d'analyse physique, sous forme de module et pour chaque module est attribuée une interface, spécialement optimisée pour pouvoir accéder aux paramètres et fonctionnalités qui lui sont attribués.

La seconde partie a été consacrée à l'établissement du modèle physique, l'intégration des propriétés du système ainsi que les modifications apportées sous forme de fonction, permettant à COMSOL de prendre en considération le changement de phase et le déplacement de l'interface, des paramètres qui n'ont pas été initialement dans le logiciel.

# CHAPITRE IV

## Résultats et Discussions

| SOMMAIRE  | PAGE |
|---|------|
| <u>IV .1 Introduction</u> .....   | 48   |
| <u>IV .2 Résultats des modèles 1-D</u> .....  | 48   |
| <u>IV .3 Discussion des résultats unidimensionnels 1-D</u> .....                            | 54   |
| <u>IV.4 Résultats des systèmes bidimensionnels 2-D</u> .....                                | 55   |
| <u>IV.5 Discussion des résultats 2-D</u> .....  | 61   |
| <u>IV.6 Résultats de l'application du model 2-D applique à la géométrie sphérique</u> ..... | 61   |
| <u>IV.7 Discussion des résultats 2-D applique à la géométrie sphérique</u> .....            | 64   |
| <u>IV.8 Les limite de COMSOL</u> .....  | 64   |
| <u>IV.9 Conclusion</u> .....  | 64   |

Jules Barbey d'Aurevilly (1808,1889) :  
C'est surtout ce qu'on ne comprend pas qu'on explique.

## IV .1 Introduction

Dans ce chapitre, nous commençons par présenter les résultats du traitement thermique en une dimension avec les trois méthode analytique, méthode des différence fini et celle de COMSOL, et aussi les résultats de l'analyse en 2-D sous COMSOL, pour la solidification du cuivre.

Nous passerons ensuite a la présentation des résultats sous COMSOL pour le cas de fusion du cuivre en 1-D et 2-D.

Et en finira par présenter les résultats du traitement thermique d'une particule sphérique sous différentes condition limite.

## IV .2 Résultats des modèles 1-D

### IV .2.1 la méthode analytique

En utilisant la méthode de Newman décrit au chapitre 2, l'auteur de cette analyse a utilise MAPLE afin de déterminer une solution exacte au problème. Un code MAPLE en une dimension est indiqué dans les Annexes. En utilisant ces informations, les fonctions de la solution exacte et les données d'entrée dans le tableau 1 du précédant chapitre, une solution est atteinte montrons la répartition de la température en fonction de la distance dans le matériau après un temps de 30 secondes, qui est perçu dans la figure IV.1.

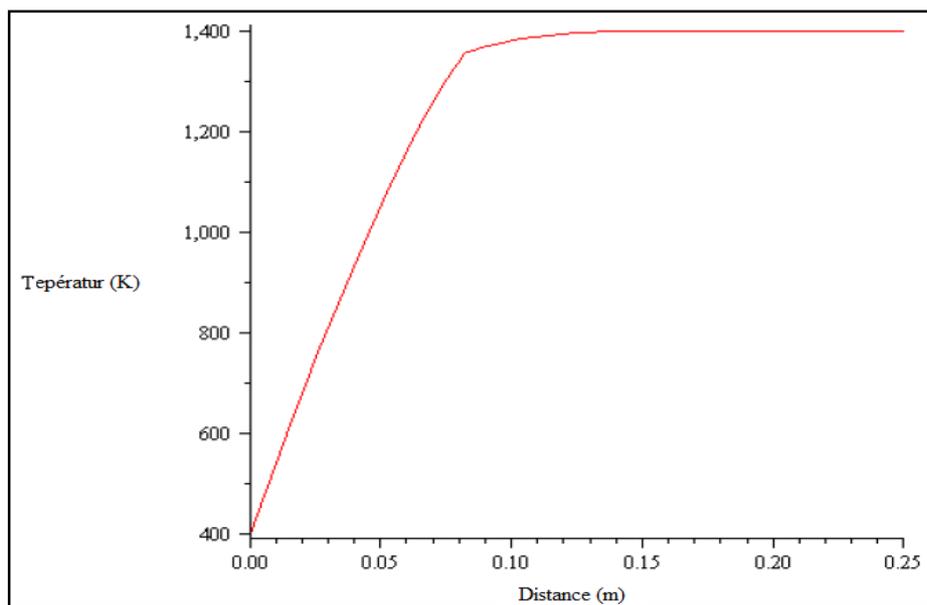


Fig. IV.1 Graph de la distribution des températures dans le matériau (solution exacte).

A partir de ce graph il est possible de montrer la discontinuité dans la pente de la distribution de température qui se produit en raison de la perte de chaleur latente dans le processus de solidification, qui dans ce cas est représenté approximativement entre 0,08 et 0,15 mètres dans le matériau après 30 secondes.

L'emplacement de l'interface solide - liquide dans le matériau sera suivi en fonction du temps. Comme c'est décrit dans la solution exacte au chapitre 2. Les résultats obtenus sont montrés dans la figure IV.2.

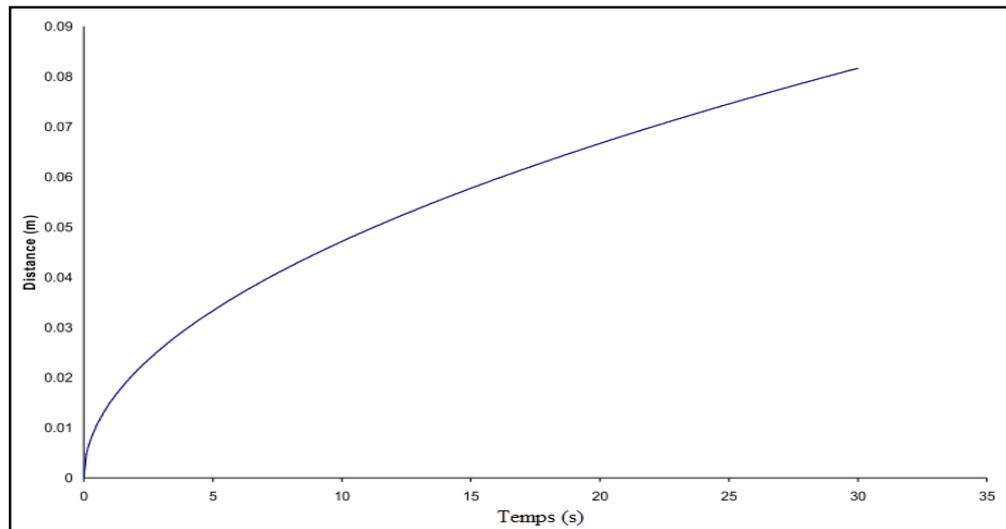


Fig. IV.2 position de l'interface solide – liquide en fonction du temps.

#### IV .2.2 méthode des différences finies

Une méthode aux différences finies est utilisée pour déterminer la température du système sur toute sa longueur en fonction du temps, ainsi que pour déterminer l'emplacement de l'interface solide-liquide. La méthode aux différences finies est basée sur une application de la méthode Enthalpique.

La première étape pour parvenir à une solution approchée à un problème en différences finies est de créer une série de segments discrets de taille uniforme délimitée par des nœuds comme le montre la figure IV.3, sur laquelle sont définies les propriétés du matériau, puis un ensemble d'équations algébriques (équations aux différences finies) sont résolues et une solution approchée est obtenue.

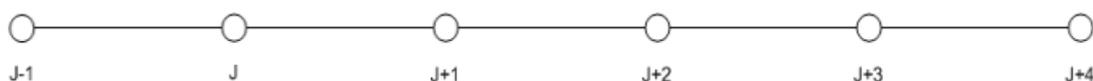


Fig. IV.3 discrétisation du segment (méthode explicite).

La méthode explicite pour résoudre l'équation aux différences finies est utilisée. Pour ce faire l'auteur utilise un code en Fortran qui est montré en annexes, un ensemble de solutions a été obtenu pour montrer l'emplacement de l'interface solide-liquide en fonction du temps. Ce résultat a été comparé à celui de la solution analytique exacte, et est montré dans la figure IV.4.

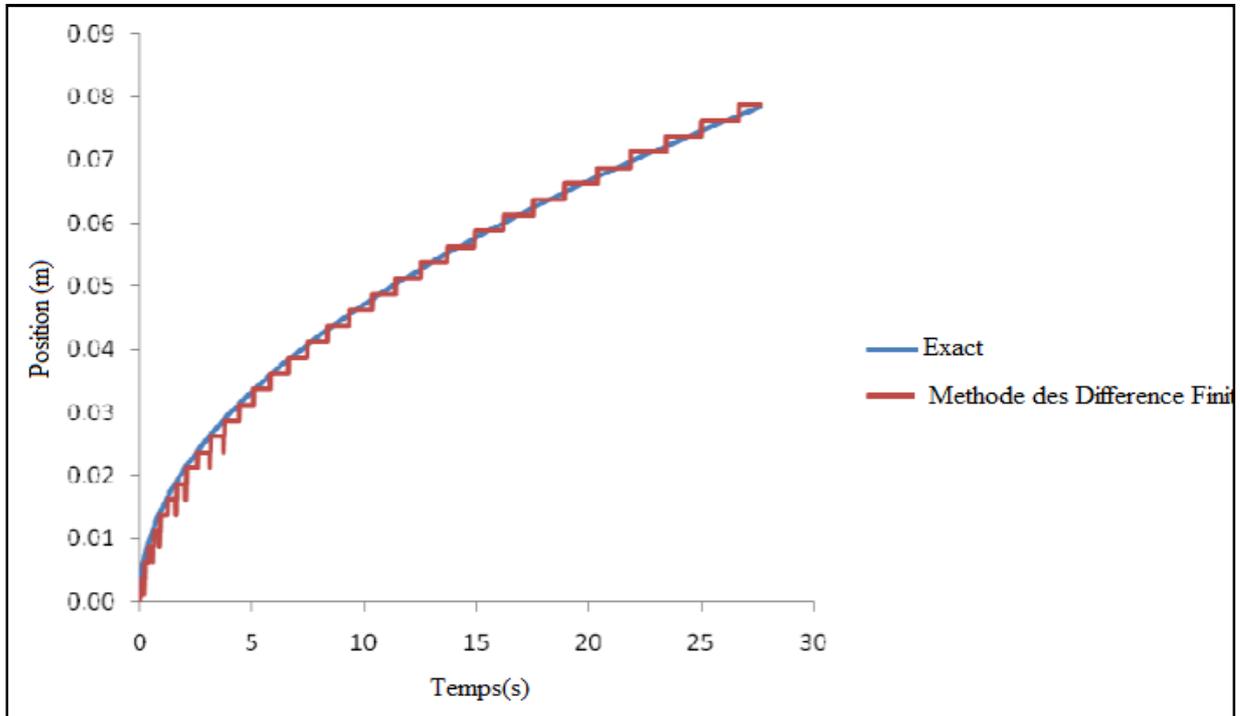


Fig. IV.3 comparaison des solutions de la position de l'interface, entre la MDF et l'exact.

Cela montre que, l'erreur relative entre la MDF et la solution est d'environ 3,2%. Cela démontre que la solution explicite en différence finie peut être utilisée comme approchée pour la résolution du problème de changement de phase.

### IV .2.3 Solutions du model COMSOL (solidification)

La solution résultante qui a été obtenue pour COMSOL en utilisant les paramètres prédéfinis, pour 30s d'exposition ; avec un pas de temps de 0.1, est montrée dans la figure IV.4

Avec la modification des paramètres dans le model de COMSOL, il est devenu possible de créer une exacte représentation du transfert de chaleur à travers le matériau au cours du temps, y compris le changement de phase.

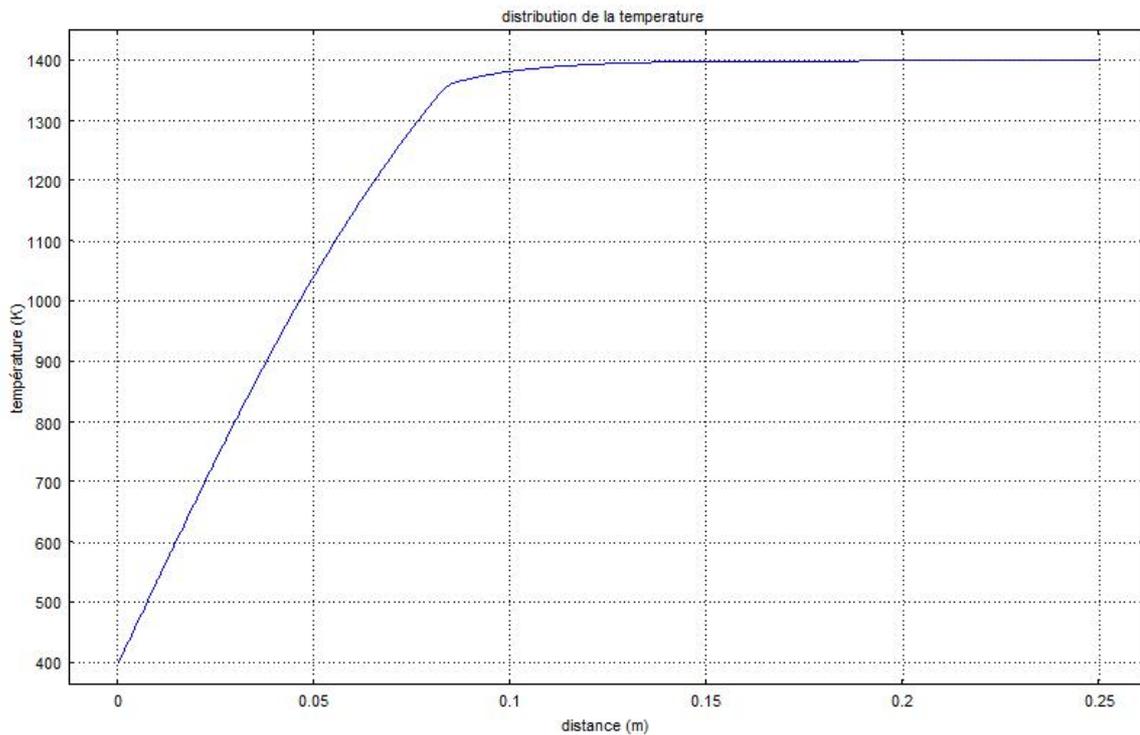


Fig. IV.4 Graph COMSOL 1-D de la répartition de la température à l'instant  $t=30s$ , avec  $\Delta t=0.01$  (solidification).

Lorsque les équations sont modifiées, comme indiqué au chapitre précédant, il est possible de remarquer trois régions distinctes, une première zone à pente élevée qui correspond à la partie solidifiée, qui est caractérisé par un coefficient de transfert de chaleur élevé ; la seconde zone qui est caractérisé par une variation rapide de la pente qui se sont comptabilisation lors de la perte de chaleur latence dans le système qui correspond à la température de solidification 1356K et une troisième zone à pente faible correspondant à la partie liquide, caractérisé par un coefficient de transfert de chaleur faible.

#### IV .2.3.1 Effet de la variation du pas de temps

Une série de six solutions améliorées ont été créées avec des propriétés du matériau identiques, et seul le pas de temps est modifier.

Tableau IV.1 : Les différents pas de temps utilisés sous COMSOL

| Option | Pas de temps |
|--------|--------------|
| 1      | 0.5          |
| 2      | 0.1          |
| 3      | 0.05         |
| 4      | 0.01         |
| 5      | 0.001        |
| 6      | 0.0001       |

Il est important de le dire, que tout en diminuant le pas de temps pour une éventuellement améliorer des résultats de l'analyse, il y a une augmentation considérable des ressources nécessaires à l'analyse, à la fois la puissance de calcul et de le temps nécessaire pour compléter l'analyse.

Pour ce rendre compte de l'effet du pas de temps, les six options sont comparées entre elles et aussi à la solution exacte, les résultats sont montrés dans la figure IV.5.

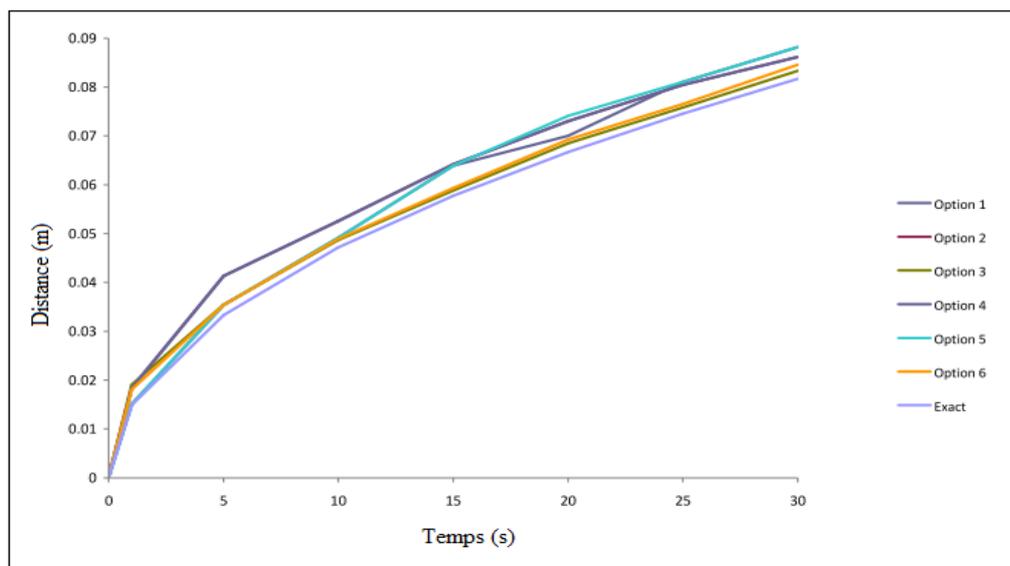


Fig. IV.5 Comparaison entre les solutions de COMSOL et l'exacte, pour la localisation de l'interface solide-liquide.

En plus de la comparaison visuelle de la figure IV.5 ci-dessus, une comparaison analytique entre les différents points de la solution COMSOL et les points correspondants dans la solution exacte a été déterminée en utilisant l'équation :

$$\%Difference = \frac{x_{COMSOL} - x_{Exact}}{\left(\frac{x_{COMSOL} + x_{Exact}}{2}\right)} \times 100$$

(Eq.IV.1)

Ces différences, ont ensuite été moyennées pour obtenir la moyenne en pourcentage pour chacune des options, les résultats sont présentés dans le tableau IV.2.

**Tableau IV.1 : L'erreur de la solution COMSOL compare à la solution exacte.**

| Option | Erreur (%) |
|--------|------------|
| 1      | 6.07(%)    |
| 2      | 12.28(%)   |
| 3      | 6.03(%)    |
| 4      | 12.28(%)   |
| 5      | 6.87(%)    |
| 6      | 5.92(%)    |

### IV .2.3 Solutions du model COMSOL (fusion)

En utilisons toujours les même propriétés du matériau et le même model COMSOL, avec la variation des conditions initial et ou limites, a fin de décrire le phénomène de fusion.

La simulation et lancer pour des conditions, tel que 400 K pour la température initial du system, et 1400 K pour la température a la limite  $x=0$  a l'instant  $t=0$ . Le résultat obtenu pour les 100 premiers seconde de fusion du system son montre sur la figure IV.6, ci-dessous.

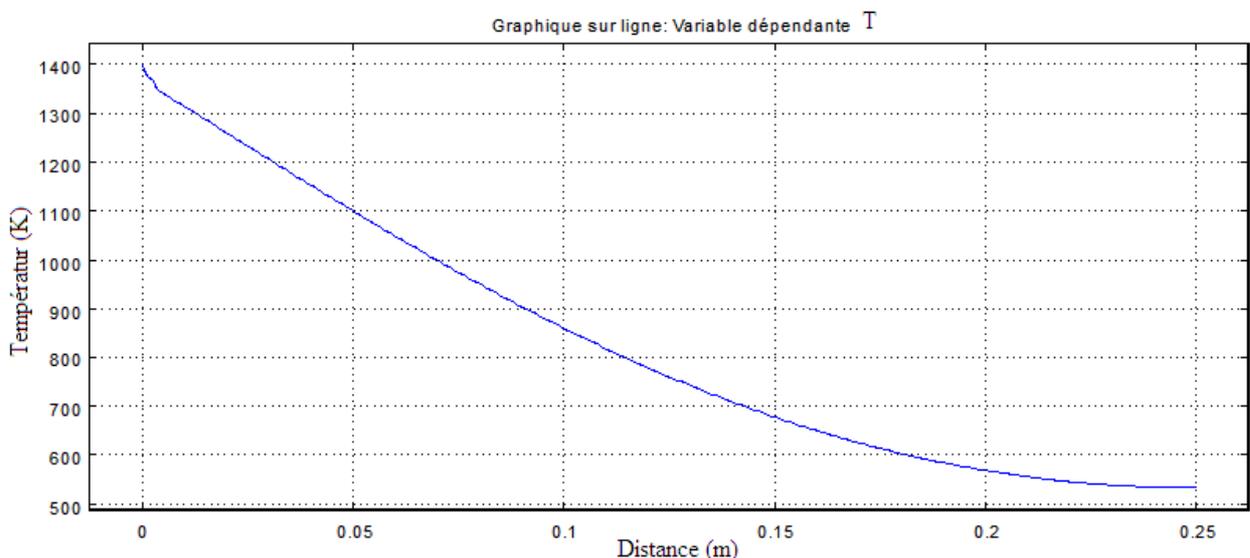


Fig. IV.6 Graph COMSOL 1-D de la répartition de la température à l'instant  $t=100s$ , avec  $\Delta t=0.01s$  (fusion).

Le suivie de l'interface solide-liquide, montre qu'elle se déplace lentement dans le cas de fusion, on voit que après les 100 premières seconde de fusion, l'interface se déplace de 0.005 m, ce qui est en accord avec la réalité.

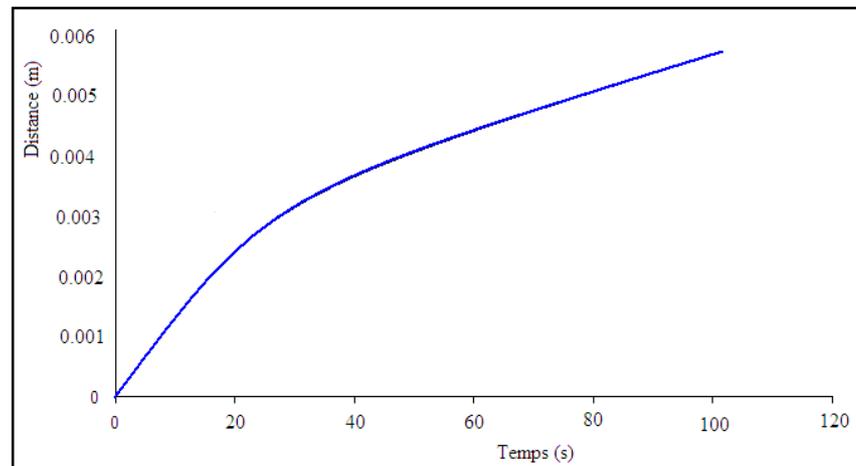


Fig. IV.7 Position de l'interface solide – liquide en fonction du temps cas de fusion.

### IV .3 Discussion des résultats unidimensionnels 1-D

Les solutions unidimensionnelles qui sont obtenues en injectant les fonctions  $C_{p\text{eff}}$  et  $K_{\text{eff}}$ , telle qu'il est décrit par la méthode à capacité de chaleur effective, dans le modèle en COMSOL, sont nettement précises.

La solution résultant de la simulation sous COMSOL Multiphysics, est précise et similaire à celle obtenue par la méthode explicite en différences finies, utilisant comme approche du problème la méthode Enthalpique avec conditions de Dirichlet. Comme il est montré dans la figure IV.6.

En plus des modifications apportées aux propriétés des matériaux à savoir les deux fonctions, l'utilisation d'un pas de temps approprié est nécessaire pour compléter l'analyse transitoire au sein de COMSOL. Il a été démontré que la solution résultant de COMSOL, avec un pas de temps 0,00001s est le pas maximum qu'on peut traiter. En plus il est montré que si possible de décrire avec précision l'emplacement du solidus avec un pas de temps de 0.0001, en accumulant une erreur moyenne de 6%, au cours des 30 premières secondes du processus de solidification.

Il est important de noter que l'amélioration de l'emplacement de l'interface solide-liquide au fil du temps entre les six méthodes de solution ne peut être significative. En plus les résolutions

du problème avec un pas de 0.0001s nécessité une longue période de calcul pour les 30 premier seconde, et cela malgré la simplicité du system.

## IV.4 Résultats des systèmes bidimensionnel 2-D

### IV.4.1 Cas de solidification du system en 2-D

En utilisant les conditions décrites aux chapitre précédant, il est possible de créer une corrélation entre l'analyse unidimensionnelle qui a été validé et l'analyse bidimensionnelle qui a été menée. Les résultats obtenu sous COMSOL Multiphysics, pour les paramètres suivant un maillage non structure, de taille normal, avec un pas de temps de 0.01s, et cela pour les 30 premier seconde de solidification, sont montrés dans la figure IV.8

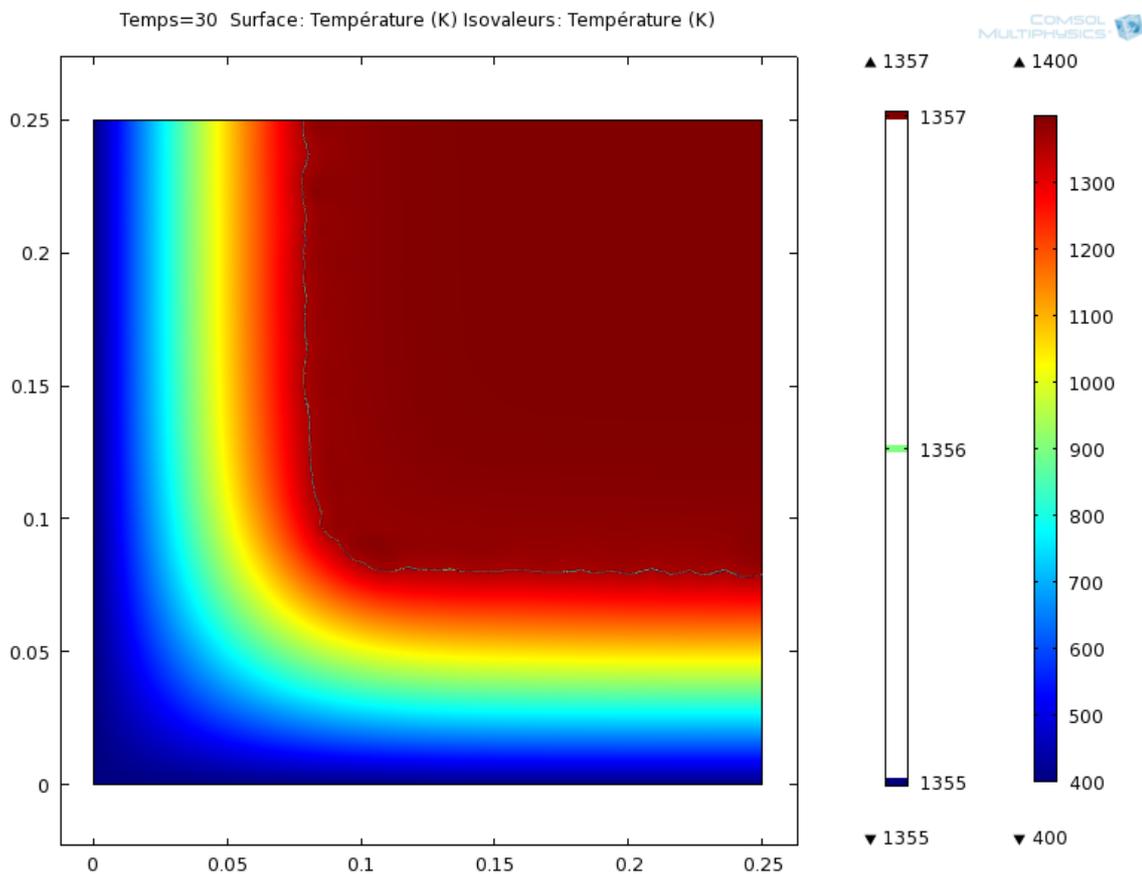


Fig. IV.8 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant  $t=30$ s et la position de l'interface solide-liquide, avec  $\Delta t=0.01$ s (solidification).

En utilisant ces résultats, il est de nouveau nécessaires pour créer un système qui pourrait bien définir l'emplacement de l'interface solide-liquide dans le système, selon les deux directions X et Y, de comparer ces résultats à ceux de la solution exacte et la solution optimale obtenue pour l'analyse unidimensionnelle de COMSOL, comme le montre la figure IV.9.

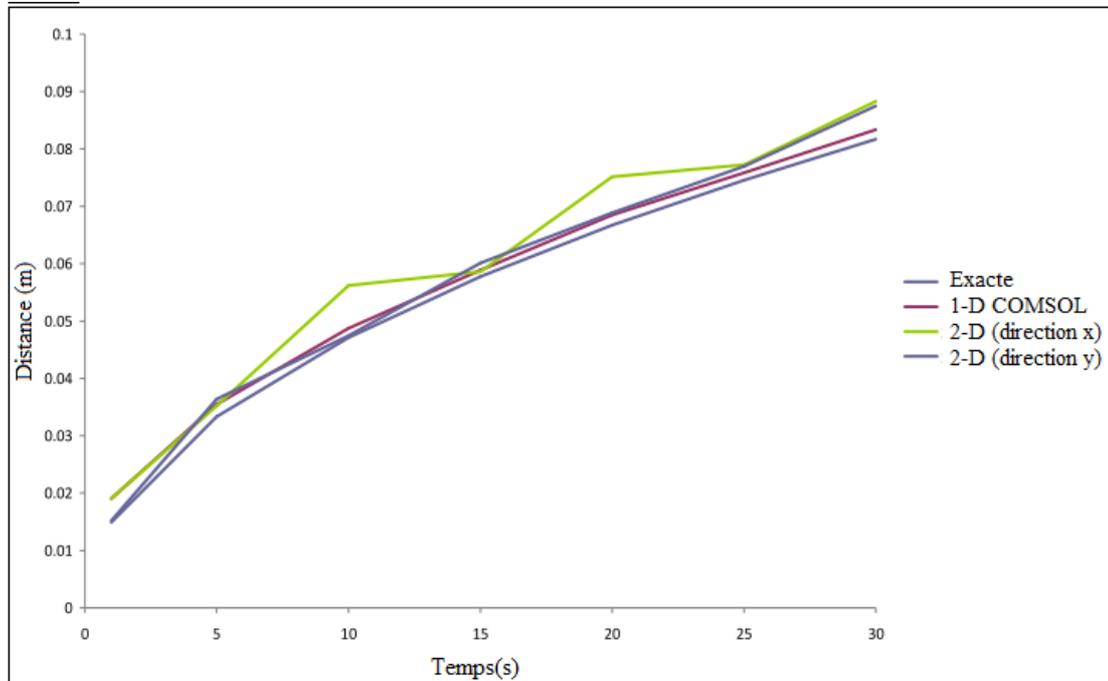


Fig. IV.9 Comparaison de la position de l'interface solide-liquide.

On peut constater que l'erreur entre les deux solutions, est plus importante selon l'axe X que selon l'axe Y. Elle est de l'ordre de 10.30 % selon X et de 4.00% selon Y.

En raison du manque de puissance de mon ordinateur, et le temps colossal que prend l'analyse, même pour une précision moindre, les résultats qui van suivre seront exécuté pour qui son pas très précis. Le pas de temps maximal pour la discrétisation temporel sera de 0.001s, avec un maillage prédéfini maximum, plus fin qui correspond à une taille maximum de 0.00925 m pour la maille.

#### IV.4.2 Cas de fusion du system en 2-D

Les propriétés et les conditions du system sont talque décrit dans chapitre 3, précédant. La première analyse est lancer avec les paramètres suivant ; 0.1s pour le pas de temps, un maillage structure prédéfinie normal, et cela pour les 100 premières seconde. Les résultats sont montre dans la figure IV.10

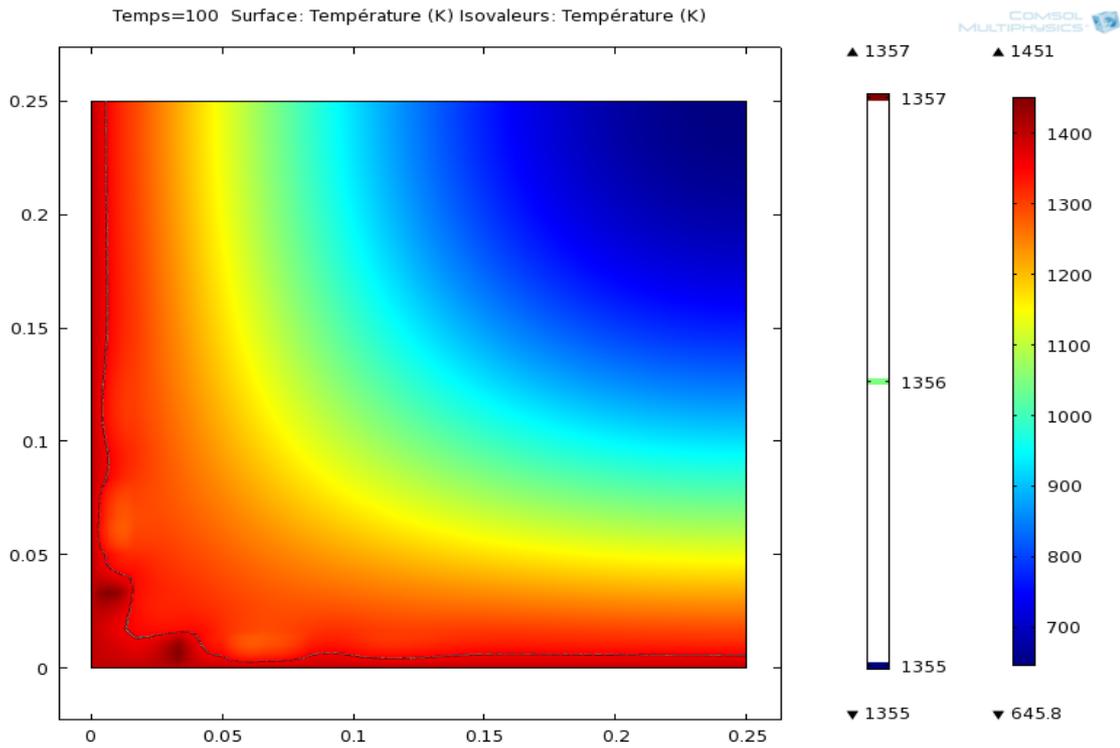


Fig. IV.10 Résultats 2-D de la répartition de la température à l’instant  $t=100s$  et la position de l’interface solide-liquide, avec  $\Delta t=0.1s$ , maillage prédéfini normal (225 élément) structure (fusion).

#### IV.4.2.1 Effet du type de maillage

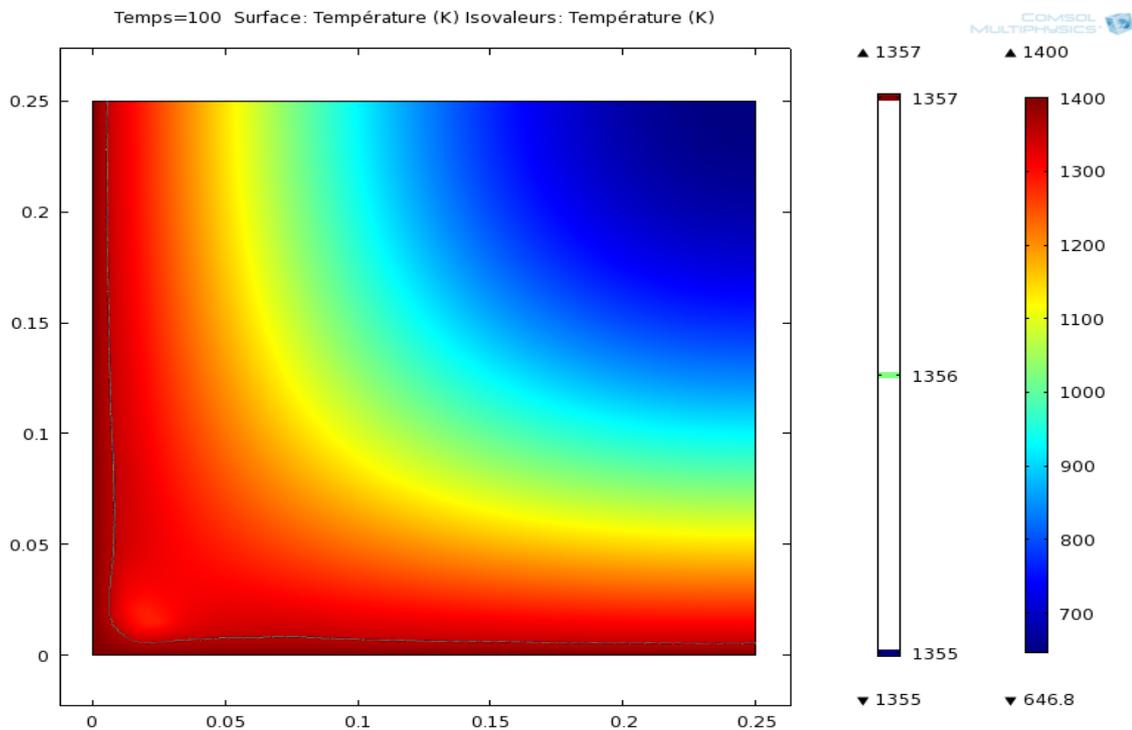


Fig. IV.11 Résultats 2-D de la répartition de la température à l’instant  $t=100s$  et la position de l’interface solide-liquide, avec  $\Delta t=0.1s$ , maillage prédéfinie Normal (580 éléments) non structure (fusion).

## IV.4.2.1 Effet de la taille du maillage

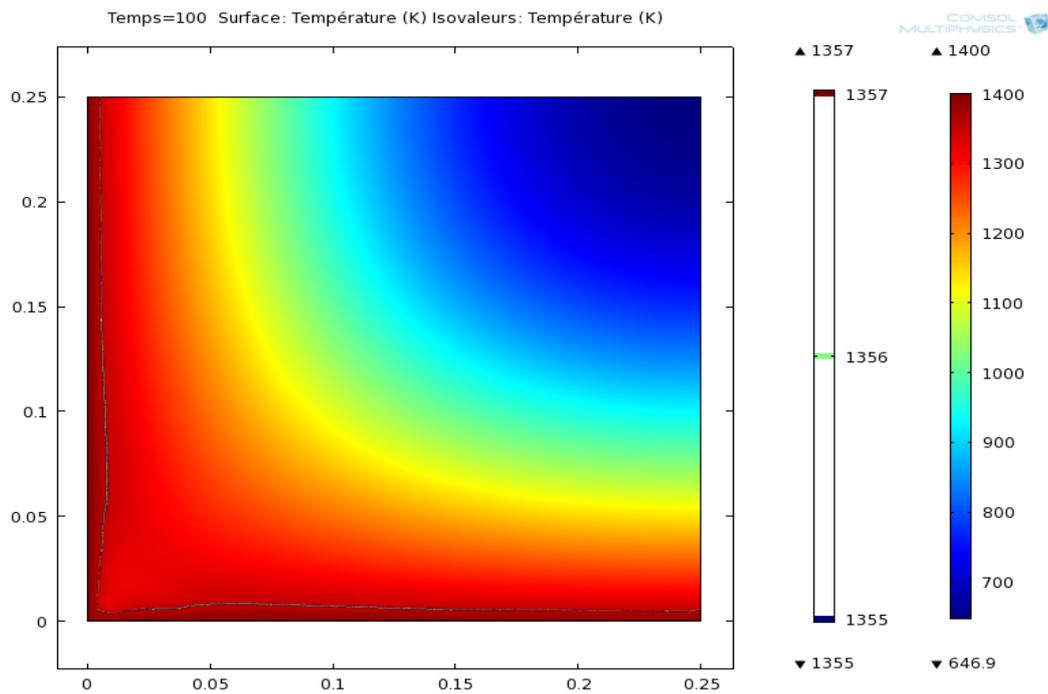


Fig. IV.12 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant  $t=100s$  et la position de l'interface solide-liquide, avec  $\Delta t=0.1s$ , maillage prédéfinie fin (961 éléments) non structure (fusion).

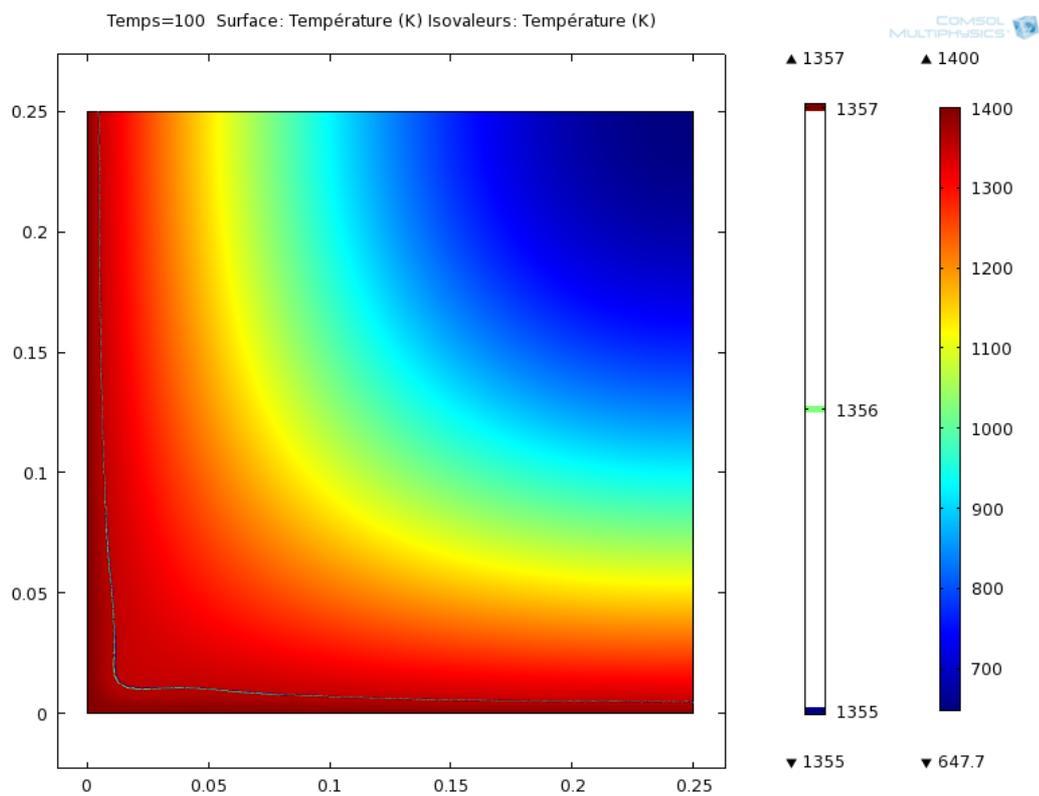


Fig. IV.13 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant  $t=100s$  et la position de l'interface solide-liquide, avec  $\Delta t=0.1s$ , maillage prédéfinie plus fin (1856 éléments) non structure (fusion).

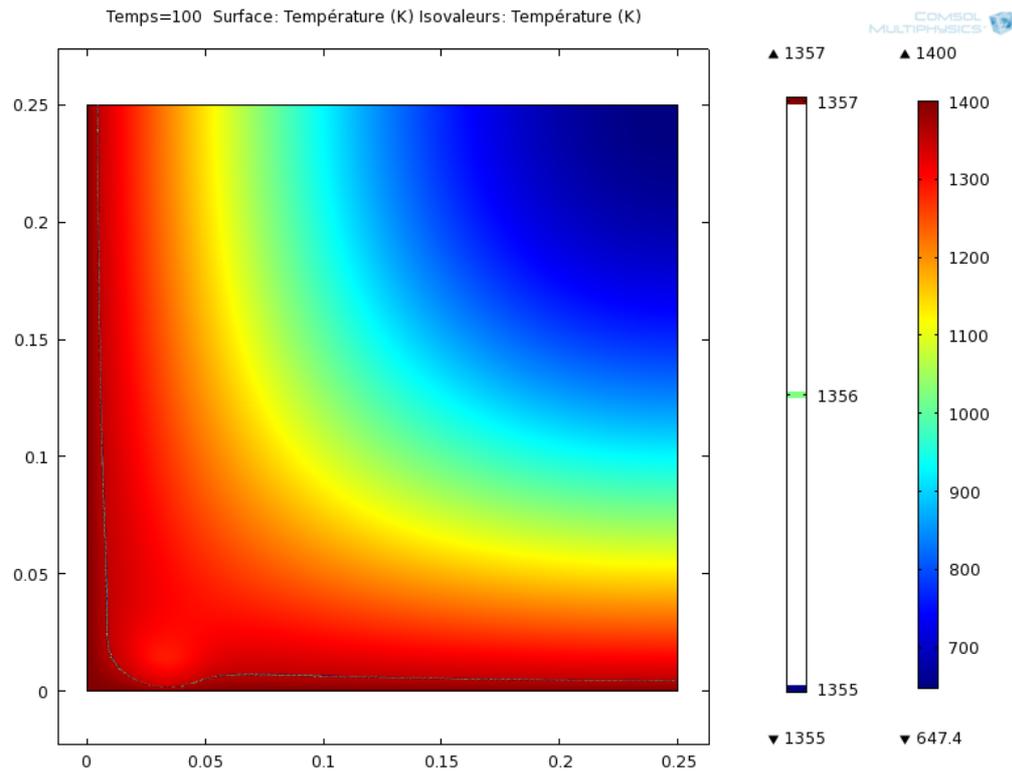


Fig. IV.14 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant  $t=100$ s et la position de l'interface solide-liquide, avec  $\Delta t=0.1$ s, maillage prédéfinie extrêmement fin (24910 éléments) non structure (fusion).

On peut conclure que la variation des dimensions du maillage a un effet non négligeable pour le rapprochement à la solution exacte dans la détermination des distributions de la température et de la position de l'interface solide-liquide.

Le maillage triangulaire non structure prédéfini ; plus fin avec un pas de temps  $\Delta t=0.1$ s peut être retenu comme un maillage optimal, puisque les résultats obtenue se rapproche plus des résultats attendu.

IV.4.2.1 Effet du pas de temps

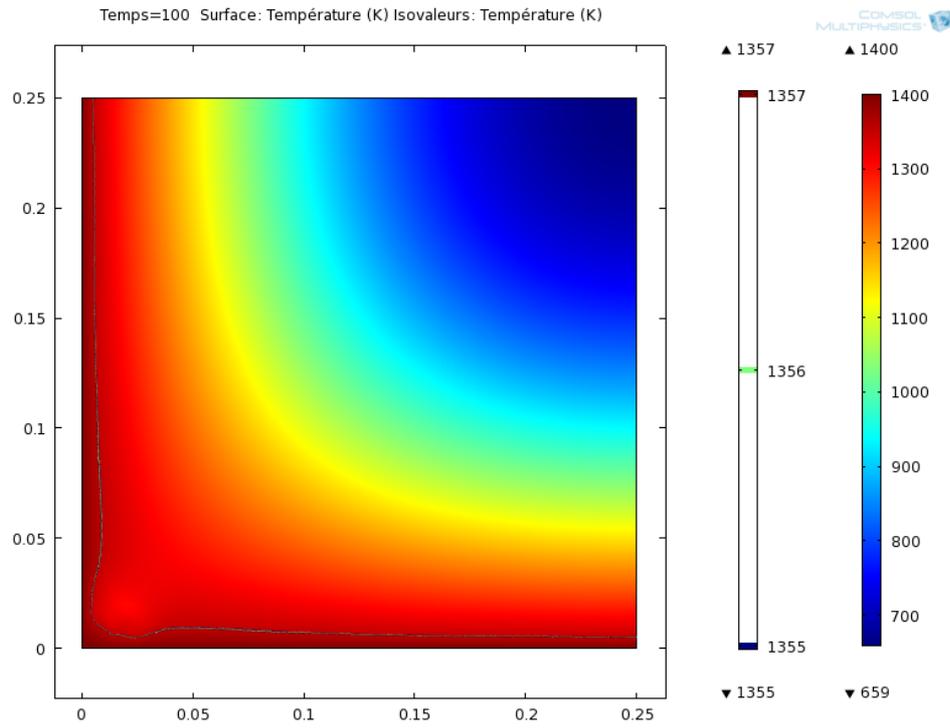


Fig. IV.15 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant  $t=100s$  et la position de l'interface solide-liquide, avec  $\Delta t=0.01s$ , maillage prédéfinie fin (961 éléments) non structure (fusion).

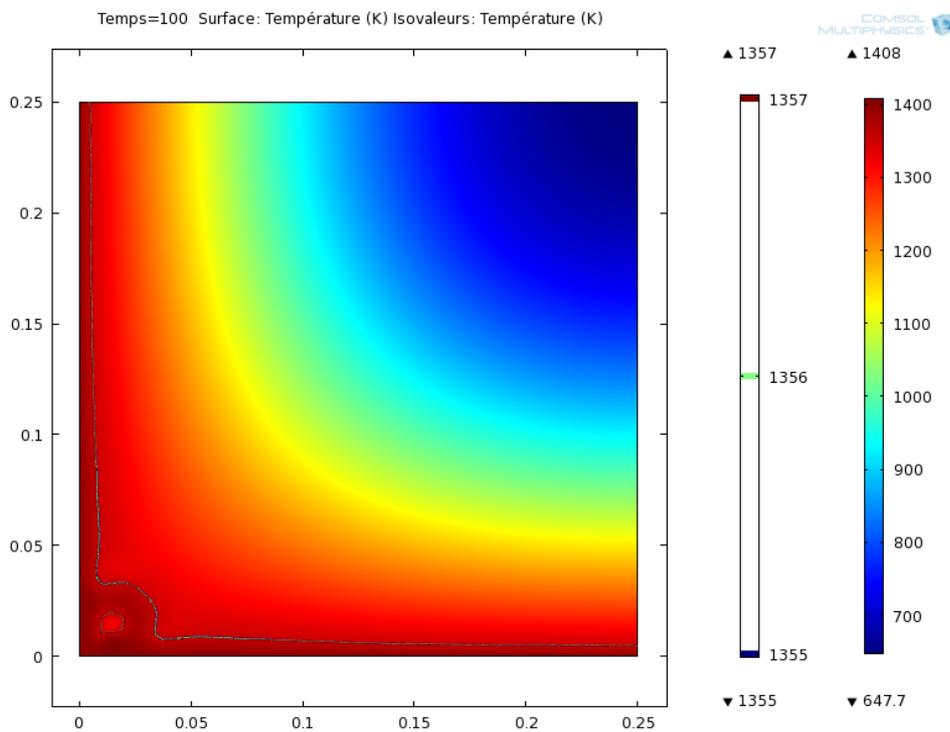


Fig. IV.16 Résultats 2-D de la répartition de la température à l'instant  $t=100s$  et la position de l'interface solide-liquide, avec  $\Delta t=0.01s$ , maillage prédéfinie plus fin (1856 éléments) non structure (fusion).

Aucun résultats n'a pu être atteint, avec un pas de temps  $\Delta t=0.001$ , et le maillage prédéfini plus fin. La même chose pour les paramètres ;  $\Delta t=0.001$  avec maillage prédéfini fin

C'est dû au manque de puissance de mon ordinateur, qui consomme tout ses ressources avant d'attendre la fin de l'analyse, et d'aboutir a un résultat.

## IV.5 Discussion des résultats 2-D

On constate que le raffinement du maillage donne un meilleur résultat compare à l'exacte et à ceux de la méthode par éléments finies obtenu par le programme en fortran.

La diminution du pas de temps fait apparaitre un déplacement anarchique inattendu de l'interface solide-liquide.

On constate que la combinaison du pas de temps 0.1s avec un maillage plus fin donne de meilleurs résultats sur l'aspect phénoménologique.

Les paramètres qui donne les meilleurs résultats sont : le maillage triangulaire libre prédéfini plus fin avec un pas de temps de 0.1s, pour le model bidimensionnelle, on peut dire que c'est les paramètres qui nous assure un coût technico-économique optimal.

## IV.6 Résultats de l'application du model 2-D a la géométrie sphérique

### IV.6.1 Cas d'une répartition uniforme de la température a la surface

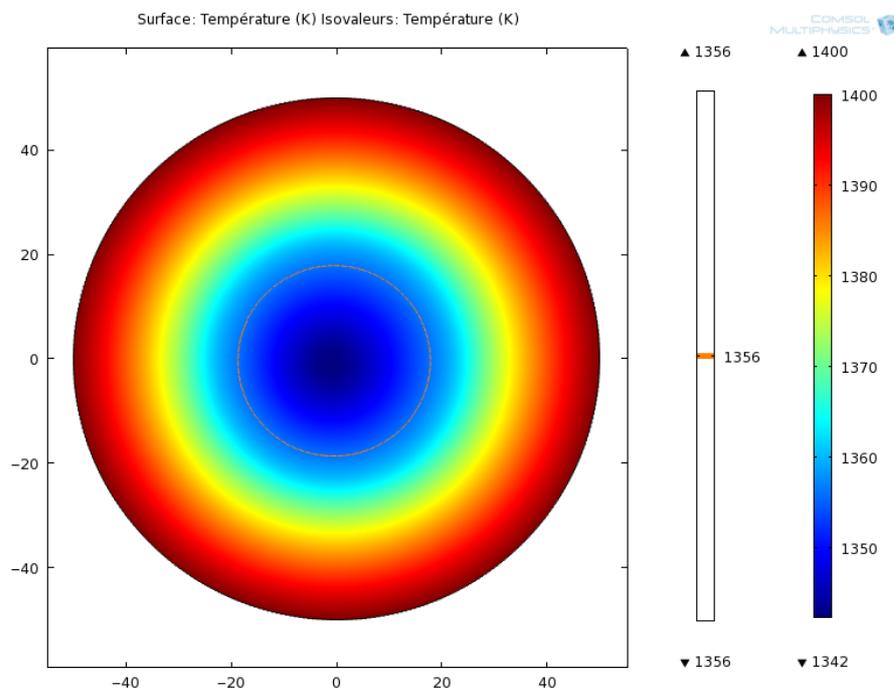


Fig. IV.18 Répartition de la température dans la sphère à l'instant  $t=100\mu s$  et la position de l'interface solide-liquide, avec  $\Delta t=1E-5$  s, maillage prédéfinie fin (932 éléments) non structure (fusion).

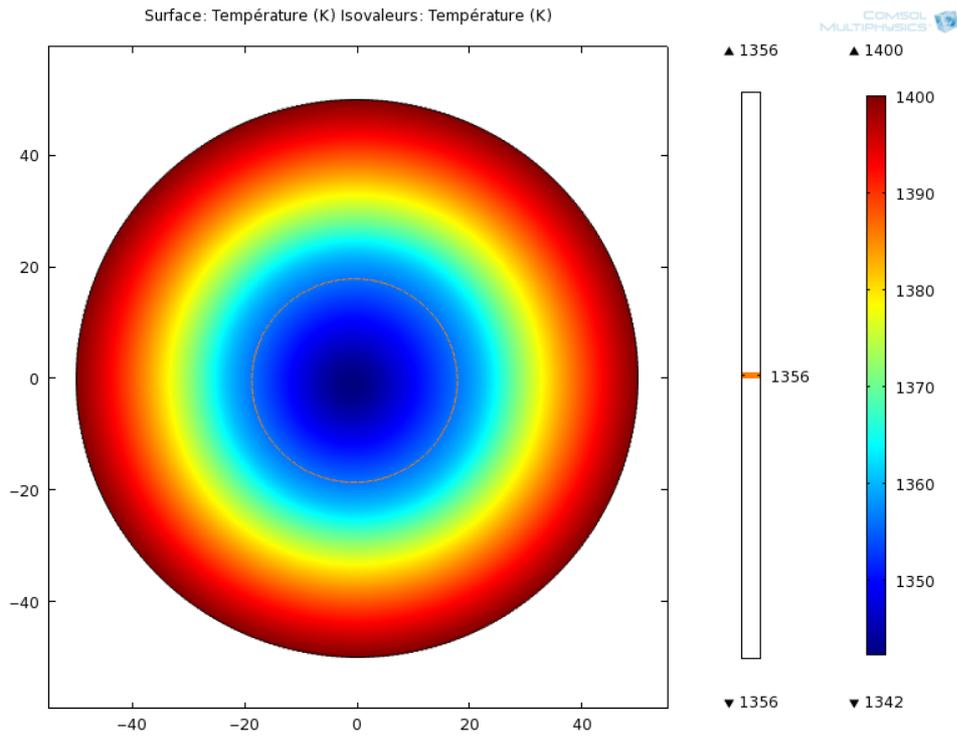


Fig. IV.19 Répartition de la température dans la sphère à l'instant  $t=100\mu\text{s}$  et la position de l'interface solide-liquide, avec  $\Delta t=1\text{E-}6$  s, maillage prédéfinie fin (932 éléments) non structure (fusion).

### IV.6.2 Cas d'une répartition non uniforme de la température à la surface

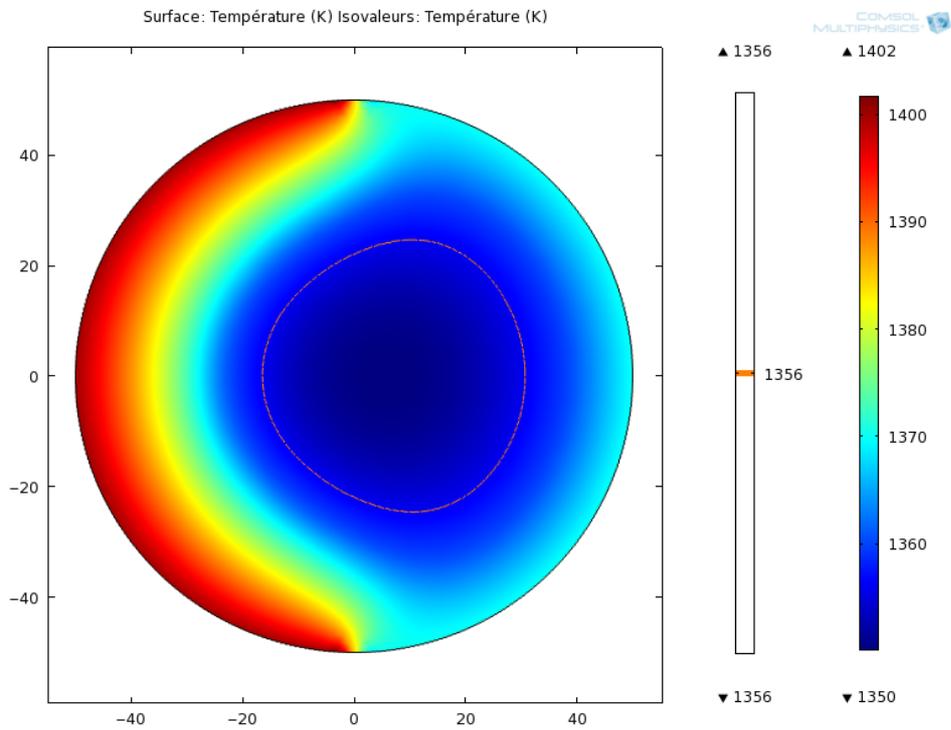


Fig. IV.20 Répartition de la température dans la sphère à l'instant  $t=100\mu\text{s}$  et la position de l'interface solide-liquide, avec  $\Delta t=1\text{E-}6$  s, maillage prédéfinie fin (932 éléments) non structure, condition initiale non uniforme (fusion).

### IV.6.3 Cas d'un flux de chaleur uniforme sur la surface

Les paramètres du flux de chaleur sont calculés à partir des propriétés du fluide entourant la sphère, à savoir le coefficient de transfert de chaleur par convection  $h$  ( $\text{w/m}^2\cdot\text{K}$ ), et la température du fluide  $T_{\text{ext}}$  (K).

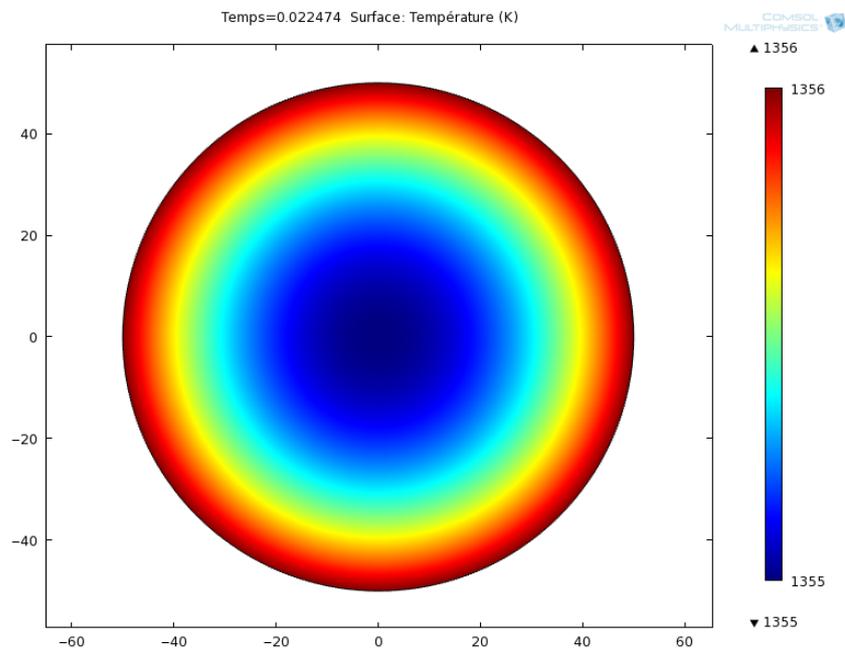


Fig. IV.21 Répartition de la température dans la sphère à l'instant  $t=0.02247\text{s}$ , avec  $\Delta t=1\text{E}-5$  s, maillage prédéfinie plus fin (3896 éléments) non structure, condition initiale flux de chaleur ( $h=500(\text{w/m}^2\cdot\text{K})$ ,  $T_{\text{ext}}=10000\text{K}$ , (fusion).

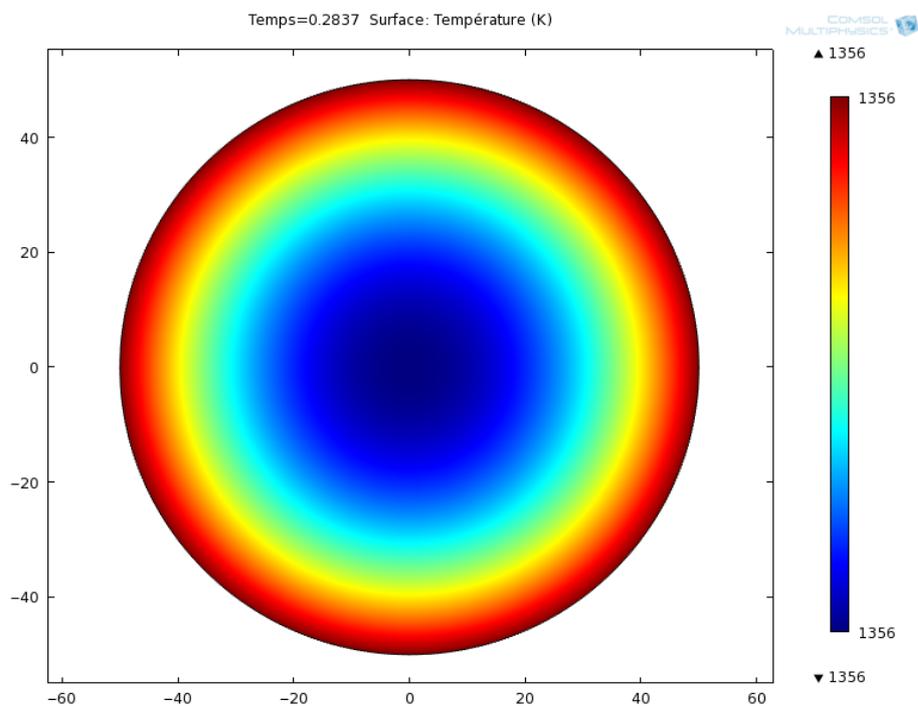


Fig. IV.22 Répartition de la température dans la sphère à l'instant  $t=0.28270\text{s}$ , avec  $\Delta t=1\text{E}-5$  s, maillage prédéfinie plus fin (3896 éléments) non structure, condition initiale flux de chaleur ( $h=170(\text{w/m}^2\cdot\text{K})$ ,  $T_{\text{ext}}=3000\text{K}$ , (fusion).

## IV.7 Discussion des résultats 2-D appliqué à la géométrie sphérique

Avec un pas de temps variable, pour le maillage prédéfini optimal fin nous notons que l'interface reste fixe, c'est-à-dire que le raffinement du pas de temps n'a pas d'effet sur la position de l'interface solide-liquide.

Une distribution non uniforme de la température sur la paroi engendre un déplacement du centre de l'interface vers la face dont la température est moindre. (Voir la répartition des fractions liquides, (Fig. IV 20).

L'effet du flux de chaleur uniforme sur la surface agit instantanément sur la particule vu sa dimension (de l'ordre du micromètre) sur l'évolution de ses propriétés thermiques. La capture du front de fusion est impossible avec COMSOL vu sa grande vitesse de déplacement, mais il est important de savoir et de pouvoir prévoir le temps qu'il faut pour que la particule atteigne sa température de fusion.

Ainsi nous pouvons donner une estimation de la vitesse avec laquelle doit être injectée la particule dans le fluide selon la nécessité pratique.

## IV.8 Les limite de COMSOL

L'exactitude des résultats obtenus en COMSOL est limitée par les caractéristiques d'ordinateur, l'exactitude exige un long temps de traitement et une grande mémoire d'enregistrement dû au raffinement de maillage, et aussi au pas de temps choisi. Dans COMSOL le pas maximal est de  $10^{E-6}$ s.

## IV.9 Conclusion

Dans ce chapitre ont été présentés les résultats des simulations numérique par COMSOL, ceux du programme en déférences finies ainsi que les résultats de la solution exacte de Newman, pour une géométrie monodimensionnelle. La comparaison de ces différentes solutions entre elle nous montre une concordance entre les résultats exacte et les deux résultats numériques. Ce qui nous amen a dire que le model monodimensionnelle relativement acceptable.

Pour le model bidimensionnelle, le rapprochement est fait sur la base d'une comparaison découplé, entre les deux axe x et y et la solution exacte ainsi que la solution unidimensionnelle obtenue par COMSOL. Les résultats obtenus restent concret dans l'ensemble, mais on ne peut se prononcer sur leurs exactitudes.

De même pour l'application à la géométrie sphérique, les résultats restent concret du point de vu phénoménologique, mais on ne peut ce prononcer sur leur exactitude et validité.

# Conclusion générale

La modélisation des effets de transfert de chaleur est devenue de plus en plus importante dans la conception des produits comprenant des endroits tels que les industries de l'électronique, automobiles, et médicales. La simulation sur ordinateur permet aux ingénieurs et aux chercheurs d'optimiser le rendement de processus et d'explorer de nouveaux modèles, leur permettant de réduire les expériences pratiques qui sont très coûteuses.

Dans le travail présenté, nous avons élaboré un modèle numérique de simulation, pour étudier le comportement thermique d'une poudre purement métallique dans un jet à haute température.

La transformation (fusion, solidification), s'accompagne par une libération ou absorption d'une grande quantité de chaleur modifiant ainsi l'état du corps. Toute la difficulté du problème est le suivi de l'interface solide-liquide. Dans la littérature on distingue deux principales méthodes de résolutions :

- Les méthodes à maillage mobile.
- Les méthodes à maillage fixe.

La méthode à capacité effective, appartient aux méthodes à maillage fixe. Le choix de cette méthode est régi par sa facilité de programmation, et sa possibilité d'extension au cas des matériaux composites d'une part, et l'extension aux problèmes plus compliqués tridimensionnels.

Nos résultats numériques ont été comparés aux solutions analytiques et numériques (les méthodes des différences finies), et on a démontré une assez bonne concordance pour le cas monodimensionnel.

Dans le cas bidimensionnel, il faut les comparer soit avec les résultats d'expérience, ou avec des résultats de méthodes numériques validées au préalable.

Ce présent travail nous a permis de juger de l'importance du changement de phase dans le domaine aéronautique (revêtement de matériaux), et dans bien d'autres secteurs, l'automobile et médical.

# REFERENCES

- [1] Livre. Transfert Thermique. Ana-Maria BIANCHI, Yves FAUTRELLE, Jacqueline ETAY. Presse polytechnique et universitaire ramande, édition 2004.
- [2] Thèse doctoral. Université de Limoge. Modélisation des transferts de chaleur et de masse dans les poudres composites métal/céramique en projection thermique: Application à la projection par plasma d'arc soufflé argon hydrogène. Mohamed BOUNEDER. Soutenue en 2006.
- [3] Thèse doctoral. Université de Limoge. Modélisation rapide du traitement de poudres en projection par plasma d'arc. Fadhel BEN ETTOUIL. Soutenue en 2008.
- [4] Support de cours. Transfert Thermique. Yves JANNOT.2003.
- [5] Manuelle de référence de COMSOL version 4.0a.2010.
- [6] Thèse d'ingénieur. Université de Blida. Simulation numérique du problème de Stefan d'un matériau pur dans les géométries unidimensionnelles. Hichem ABOU-SHIGHIBA. Soutenue en 2003.

# Annexe 1

## Rappels sur l'analyse dimensionnelle

### 1. Dimensions fondamentales

On peut exprimer les grandeurs physiques en fonction d'un nombre limité de dimensions fondamentales.

Exemples : Vitesse :  $L \cdot T^{-1}$  ; viscosité dynamique :  $M \cdot L^{-1} \cdot T^{-1}$  ; force :  $M \cdot L \cdot T^{-2}$

Sur ces exemples on voit que le nombre de dimensions fondamentales est de 3 : Masse M, Longueur L, Temps T.

Ces trois dimensions fondamentales ne sont pas toujours suffisantes. Pour les problèmes de transfert de chaleur, il est nécessaire d'ajouter une 4<sup>ème</sup> dimension : la température  $\theta$  et, lorsque l'échange d'énergie entre grandeurs mécaniques et grandeurs thermiques ne sera pas mesurable, on ajoutera la quantité de chaleur Q qui sera considérée comme une 5<sup>ème</sup> dimension.

*Remarque* : Q, homogène à un travail qui s'exprime en fonction des dimensions fondamentales M, L et T par  $Q = M \cdot L \cdot T^{-2}$  n'est pas une vraie dimension fondamentale.

La méthode d'analyse dimensionnelle, qui repose sur le principe de l'homogénéité dimensionnelle des termes d'une équation est connue sous le nom de Théorème de Vaschy-Buckingham ou théorème des groupements  $\pi$ .

### 2. Principe de la méthode

Si l'on peut représenter mathématiquement une loi physique en exprimant une variable physique  $G_1$  en fonction d'un certain nombre d'autres variables physiques indépendantes  $G_2, \dots, G_n$ , c'est à dire si  $G_1 = f(G_2, G_3, \dots, G_n)$  ou

encore  $f(G_1, G_2, \dots, G_n) = 0$ , le problème peut être simplifié de la manière suivante :

- On écrit pour chaque variable  $G_i$ , l'équation dimension en fonction des dimensions fondamentales. On dispose alors de n équations qui ont nécessité p dimensions fondamentales pour caractériser toutes les grandeurs physiques.

- On prélève p de ces n équations que l'on considère comme équations de base. Bien que le choix des équations prélevées soit arbitraire, il faut toutefois que chaque dimension fondamentale apparaisse au moins une fois sur l'ensemble des p équations.

- Les (n-p) équations restantes se présentent alors sous forme de (n-p) rapports sans dimensions appelés groupements  $\pi$  qui sont des "grandeurs réduites". On obtient alors une équation réduite :  $g(\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_{n-p}) = 0$

Un groupement  $\pi$  est le rapport d'une équation dimension d'une grandeur physique n'appartenant pas à l'ensemble des équations de base au produit des équations de base, chacune d'elle étant portée à une certaine puissance :

$$\pi_i = \frac{[G_i]}{[G_1]^{a_i} [G_2]^{b_i} \dots [G_p]^{c_i}}$$

Pour chaque dimension fondamentale M, L, T,  $\theta$ , Q figurant au dénominateur, on fait la somme des exposants que l'on identifie avec l'exposant de la même dimension figurant dans l'équation dimension de la grandeur physique du numérateur. On obtient ainsi un système linéaire de p équations dont la résolution permet de déterminer les p exposants des équations de base du dénominateur.

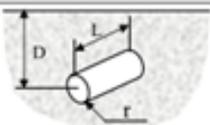
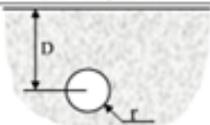
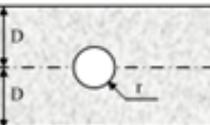
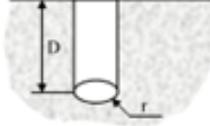
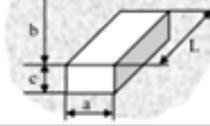
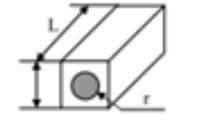
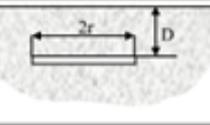
Il suffit alors d'écrire le rapport  $\pi$  en fonction des grandeurs physiques attachées aux équations dimensions de départ.

### Quelques groupements sans dimensions

| Groupement   |                     |
|--|---------------------|
| $Re = \frac{\rho u D}{\mu}$                                | Nombre de Reynolds  |
| $Pr = \frac{c_p \mu}{\lambda}$                             | Nombre de Prandtl   |
| $Nu = \frac{h D}{\lambda}$                                 | Nombre de Nusselt   |
| $Pe = \frac{\rho u D c_p}{\lambda}$                        | Nombre de Peclet    |
| $Ma = \frac{h}{\rho u c_p}$                                | Nombre de Margoulis |
| $Gr = \frac{\beta g \Delta T \rho^2 L^3}{\mu^2}$           | Nombre de Grashof   |
| $Ra = \frac{c_p \beta g \Delta T \rho^2 L^3}{\lambda \mu}$ | Nombre de Rayleigh  |

## Annexe 2

### Valeur du coefficient de forme de conduction

| Système  | Schéma  | Coefficient de forme  | Domaine d'application  |
|--|---|---|------------------------|
| Cylindre isotherme de rayon $r$ enterré dans un milieu semi-infini à surface isotherme     |    | $\frac{2 \pi L}{\cosh^{-1}\left(\frac{D}{r}\right)}$  | $L \gg r$              |
| Sphère isotherme de rayon $r$ enterrée dans un milieu infini                               |    | $4 \pi r$   |                        |
| Sphère isotherme enterrée dans un milieu semi-infini à surface isotherme                   |    | $\frac{4 \pi r}{1 - \frac{r}{2D}}$  |                        |
| Conduction entre 2 cylindres isothermes enterrés dans un milieu infini                     |    | $\frac{2 \pi L}{\cosh^{-1}\left(\frac{D^2 - r_1^2 - r_2^2}{2 r_1 r_2}\right)}$                      | $L \gg r$<br>$L \gg D$ |
| Cylindre horizontal au centre dans une plaque infinie                                      |   | $\frac{2 \pi L}{\ln\left(\frac{4D}{r}\right)}$  |                        |
| Cylindre isotherme de rayon $r$ placé dans un milieu semi-infini                           |  | $\frac{2 \pi L}{\ln\left(\frac{2L}{r}\right)}$  | $L \gg 2r$             |
| Parallélépipède rectangle isotherme enterré dans un milieu semi-infini à surface isotherme |  | $1.685 L \left[ \log\left(1 + \frac{b}{a}\right) \right]^{-0.59} \left(\frac{b}{c}\right)^{-0.078}$ |                        |
| Cylindre au centre d'un parallélépipède de section carrée                                  |  | $\frac{2 \pi L}{\ln\left(0.54 \frac{h}{r}\right)}$  | $L \gg W$              |
| Plaque rectangulaire mince enterrée dans milieu semi-infini à surface isotherme            |  | $4r$<br>$8r$  | $D = 0$<br>$D \gg 2r$  |
| Sphère creuse  |  | $\frac{4 \pi r_0 r_1}{r_0 - r_1}$   |                        |

## Annexe 3

### Programme en fortran, méthode des défiances finies

```
C Finite Difference Explicit Method for the 1D Heat Equation
C with Freezing - Enthalpy Method
C Material: Copper
C
C Find u(x,t) such that
C
C  $dH/dt = d(k du/dx)/dx$ 
C x in [0,L] ; t > 0
C
C IC at t=0, x in [0,L]
C u = ui
C BC at x =0, t>0
C  $du/dx = dH/dx = 0$ 
C BC at x=L, t>0
C Dirichlet: u = uw OR
C Newman:  $-k du/dx = qs$  OR
C Robin:  $-k du/dx = hconv*(u-uw)$ 
C
C parameter(nx=101) ! Use nx = odd
C
C dimension u(nx),uo(nx),H(nx),Ho(nx)
C real L,ks,kl,k(nx),kp,km,Ny
C
C System size, maximum time and initial temperature
C L = 0.25
C tmax = 30.0
C ui = 1400.0
C ur = 298.0
C uw = 400.0
C hconv = 3e3
C
C Thermophysical properties
C ks = 365.0
C kl = 174.0
C rhos = 8920.0
C rhol = 8920.0
C Cps = 435.0
C Cpl = 494.5
C Hf = 205000.0*rhos
C ufs = 1350.0
C ufl = 1360.0
C ufsl = 0.5*(ufs+ufl)
C PI = 4.0*ATAN(1.0)
C
C Preliminaries
C dt = 0.1 ! Trial; program checks fulfillment of CFL condition
C dx = L/float(nx-1)
C alphas = ks/(rhos*Cps)
C alphasl = kl/(rhol*Cpl)
C alpha = AMAX1(alphas,alphasl)
C dtmax = (dx**2)/(4.0*alpha)
C if(dt.gt.dtmax) dt=dtmax
```

```

C      nt = int(tmax/dt) + 1
C      Hs = rhos*Cps*(ufs-ur)
C      HI = Hs + Hf
C      ipick1 = 1
C      ipick2 = nx/2+1
C      ipick3 = nx
C      Exact Solution
C      DALAMB=0.00001
C      ALAMB=0.0
C      DO I=1,100000
C      ALAMB=ALAMB+DALAMB
C      FLHS=EXP(-ALAMB**2)/ERF1(ALAMB)
C      COEF1=kl*SQRT(alphas)/(ks*SQRT(alphas))
C      COEF2=(ui-ufsl)/(ufsl-uw)
C      COEF3=EXP(-alphas*(ALAMB**2)/alphas)
C      COEF4=1.0-ERF1(ALAMB*SQRT(alphas/alphas))
C      SLHS=-COEF1*COEF2*COEF3/COEF4
C      RHS=ALAMB*(Hf/rhos)*SQRT(PI)/(Cps*(ufsl-uw))
C      DIF=FLHS+SLHS-RHS
C      IF(DIF.LE.0.0001) GO TO 2
c      write(6,*) FLHS,SLHS,RHS,DIF,ALAMB
C      ENDDO
C      2      CONTINUE
C      write(6,*) 'alamb =',ALAMB
C      Initial Condition
C      x = 0
C      do i=1,nx
C      uo(i) = ui
C      if(uo(i).gt.ufsl) then
C      k(i)=kl
C      Ho(i) = HI + rho1*Cpl*(uo(i)-ufsl)
C      endif
C      if(uo(i).le.ufsl.and.uo(i).gt.ufs) then
C      k(i)=0.5*(kl+ks)
C      Ho(i) = Hs + Hf*(uo(i)-ufs)/(ufsl-ufs)
C      endif
C      if(uo(i).le.ufs) then
C      k(i)=ks
C      Ho(i) = rhos*Cps*(uo(i)-ur)
C      endif
C      x = x + dx
C      enddo
C      March forwards in time
C      t = 0.0
C      write(71,*) t,uo(ipick1)
C      write(72,*) t,uo(ipick2)
C      write(73,*) t,uo(ipick3)
C      do j=1,nt

```

```

t = t+dt
    do i=2,nx-1
        kp = 0.5*(k(i+1)+k(i))
        km = 0.5*(k(i)+k(i-1))
        dqdxp = -kp*(uo(i+1)- uo(i))/dx
        dqdxm = -km*(uo(i)- uo(i-1))/dx
        H(i) = Ho(i) - dt*(dqdxp-dqdxm)/dx
    enddo
C
C BC at x = 0
    H(1) = H(2)
C BC at x = L (Choose one; comment the other two)
C Dirichlet Condition
    uo(nx) = uw
    if(uo(nx).gt.ufl) then
        H(nx) = Hl + rho1*Cpl*(uo(nx)-ufl)
    endif
    if(uo(nx).lt.ufs) then
        Ho(nx) = rhos*Cps*(uo(nx)-ur)
    endif
    if(uo(nx).le.ufl.and.uo(nx).ge.ufs) then
        Ho(nx) = Hs + Hf*(uo(nx)-ufs)/(ufl-ufs)
    endif
C Newman condition
c    qout = qs(t)
c    qin = - k(nx)*(uo(nx)-uo(nx-1))/dx
c    H(nx) = Ho(nx)-(2.0*dt/dx)*(qout - qin)
C Robin Condition
c    qout = hconv*(uo(nx) - uw)
c    qin = - k(nx)*(uo(nx)-uo(nx-1))/dx
c    H(nx) = Ho(nx)-(2.0*dt/dx)*(qout - qin)
C
C Compute new temperature
C
    do i=1,nx
        if(H(i).gt.Hl) then
            u(i) = ufl + (H(i)-Hl)/(rho1*Cpl)
            k(i) = kl
        endif
        if(H(i).le.Hl.and.H(i).gt.Hs) then
            u(i) = ufs+(ufl-ufs)*((H(i)-Hs)/Hf)
            k(i) = 0.5*(kl+ks)
        endif
        if(H(i).le.Hs) then
            u(i) = ur + Ho(i)/(rhos*Cps)
            k(i) = ks
        endif
    enddo
C
    if(uo(ipick2).gt.ufl.and.u(ipick2).le.ufl) then
        write(6,*) 'Liquidus Crossed at x=L/2 at time =', t
    endif
    if(uo(ipick2).gt.ufs.and.u(ipick2).le.ufs) then
        write(6,*) 'Solidus Crossed at x=L/2 at time =', t
    endif
C
    do i=1,nx-1

```

34

```
dudx=(u(i+1)-u(i))/dx
dudt=(u(i)-uo(i))/dt
Ny=dudx/sqrt(dudt)
write(77,*) t,float(i)*dx/2,Ny
enddo
```

C

```
do i=1,nx
write(76,*) t,float(i-1)*dx,u(i)
uo(i) = u(i)
Ho(i) = H(i)
enddo
```

C

C Track Interface

C

```
do i=nx,2,-1
if(i.eq.nx.and.u(nx).gt.ufl) then
write(90,*) t,0.0
endif
if(i.lt.nx.and.u(i).le.ufl.and.u(i-1).gt.ufl) then
xliq = L-0.5*(float(i)+float(i-1))*dx
write(90,*) t,xliq
endif
```

c

```
if(i.eq.nx.and.u(nx).gt.ufsl) then
write(91,*) t,0.0
endif
if(i.lt.nx.and.u(i).le.ufsl.and.u(i-1).gt.ufsl) then
xsl = L-0.5*(float(i)+float(i-1))*dx
write(91,*) t,xsl
endif
```

c

```
if(i.eq.nx.and.u(nx).gt.ufs) then
write(92,*) t,0.0
endif
if(i.lt.nx.and.u(i).le.ufs.and.u(i-1).gt.ufs) then
xsol = L-0.5*(float(i)+float(i-1))*dx
write(92,*) t,xsol
endif
```

c

```
enddo
if(u(1).lt.ufl.and.u(2).lt.ufl) write(90,*) t,L
if(u(1).lt.ufsl.and.u(2).lt.ufsl) write(91,*) t,L
if(u(1).lt.ufs.and.u(2).lt.ufs) write(92,*) t,L
```

C

```
xslex = 2.0*ALAMB*sqrt(alphas*t)
write(80,*) t,xslex
```

C

```
write(71,*) t,u(ipick1)
write(72,*) t,u(ipick2)
write(73,*) t,u(ipick3)
if(u(nx).lt.ur.or.u(nx).gt.ui) go to 100
enddo
```

100 continue

C

```
write(6,*) 'Temperatures at x=0, x=L/2 and x=L at t=',tmax
write(6,*) u(ipick1),u(ipick2),u(ipick3)
```

C

```

write(6,*) 'Interface Location (exact and FDM) at t=',tmax
write(6,*) xslex,xsl
C
stop
end

FUNCTION qs(t)
if(t.ge.0.0) qs = 3e6
RETURN
END

FUNCTION ERF1(ARG)

A1=0.0705230784
A2=0.0422820123
A3=0.0092705272
A4=0.0001520143
A5=0.0002765672
A6=0.0000430638
C
ATX=A1*ARG
ATX=ATX+A2*ARG**2
ATX=ATX+A3*ARG**3
ATX=ATX+A4*ARG**4
ATX=ATX+A5*ARG**5
ATX=ATX+A6*ARG**6
C
ERF1=1.0-1.0/(1.0+ATX)**16
C
RETURN
END

```

