

# THÈSE

UNIVERSITE DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR

École doctorale 211 : Sciences Exactes et leurs Applications

Présentée et soutenue le 18 décembre 2015

Par **Eric PERNOT**

pour obtenir le grade de docteur  
de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour

**Spécialité : Energétique**

Modélisation du changement d'état solide-liquide.  
Application au stockage thermique par chaleur latente  
adapté aux centrales solaires thermodynamiques.

## MEMBRES DU JURY

### RAPPORTEURS

- Monsieur Frédéric KUZNIK
- Monsieur Philippe MARTY

Professeur à l'Institut des Sciences Appliquées de Lyon  
Professeur à l'Université Grenoble Alpes

### EXAMINATEURS

- Monsieur Jean-Christophe BATSALE

Professeur à l'ENSAM, Bordeaux

### DIRECTEURS

- Monsieur Erwin FRANQUET
- Monsieur Jean-Pierre BEDECARRATS

Maître de Conférences à l'Université de Pau et des Pays de l'Adour  
Professeur à l'Université de Pau et des Pays de l'Adour





# Table des matières

Table des matières	i
Liste des figures	vi
Liste des tableaux	vii
Remerciements	1
Résumé	3
Abstract	5
Nomenclature	7
Introduction	9
<b>1 Positionnement du problème</b>	<b>17</b>
1.1 Modélisation du changement de phase solide/liquide . . . . .	17
1.1.1 Le problème de Stefan . . . . .	17
1.1.2 Formulation mathématique du problème de changement de phase	18
1.1.2.1 Les méthodes à domaines multiples . . . . .	20
1.1.2.2 Les méthodes à domaine unique . . . . .	21
1.1.2.2.a Problème de Stefan <i>classique</i> en conduction pure	22
1.1.2.2.b Problème de Stefan avec prise en compte de la	
convection thermique . . . . .	26
1.1.3 Résolution numérique des problèmes de changement de phase . .	29
1.1.4 Les méthodes de résolution combinées ( <i>hybrides</i> ) . . . . .	30
1.2 Modélisation et simulation numérique de systèmes de stockage thermique	
par chaleur latente . . . . .	31
<b>2 Modélisation du changement de phase solide/liquide</b>	<b>35</b>
2.1 Avant-propos . . . . .	35
2.2 Équations caractéristiques . . . . .	36
2.2.1 Modélisation de la partie fluide . . . . .	36
2.2.1.1 Prise en compte de l'annulation de la vitesse dans la phase	
solide . . . . .	37
2.2.2 Modélisation de la partie thermique . . . . .	39
2.2.2.1 Formulation enthalpique ou <i>enthalpy method</i> . . . . .	39

2.2.2.2	<i>Source-based method</i>	43
2.3	Résolution numérique	44
<b>3</b>	<b>Benchmark des méthodes sur grille fixe pour la modélisation de la fusion.</b>	<b>49</b>
3.1	Introduction	49
3.2	Étude comparative théorique	51
3.2.1	Solutions analytiques	51
3.2.1.1	Problème de Stefan à une phase [1]	51
3.2.1.2	Problème de Stefan à deux phases ou problème de Neumann [2]	52
3.2.2	Résultats	52
3.2.2.1	Problème de Stefan à une phase	53
3.2.2.2	Problème de Stefan à deux phases	61
3.2.3	Conclusions sur la partie théorique	67
3.3	Étude comparative expérimentale	67
3.3.1	Définition du cas test	67
3.3.2	Résultats	70
3.3.2.1	Cas du gallium [3]	70
3.3.2.1.a	Cas optimisés	74
3.3.2.2	Cas du PEG-900 [4]	80
3.3.2.2.a	Cas optimisés	81
3.3.3	Conclusions sur la partie expérimentale	84
<b>4</b>	<b>Analyse numérique de l'influence de la fonction <math>h(T)</math> sur les processus de charge et de décharge d'un système de stockage thermique par chaleur latente</b>	<b>89</b>
4.1	Avant-propos	89
4.2	Introduction	90
4.3	Résultats	91
4.3.1	Définition du cas test	91
4.3.2	Charge et décharge	96
4.3.3	Cyclage	108
4.4	Conclusion	111
	<b>Conclusion</b>	<b>113</b>
<b>A</b>	<b>Revue d'articles traitant de la résolution numérique de problèmes de changement de phase.</b>	<b>117</b>
	<b>Liste des références bibliographiques</b>	<b>142</b>

# Table des figures

1	Schémas de principe d'une installation solaire à concentration en ligne (source : <i>National Renewable Energy Lab</i> ). . . . .	10
2	Photographie de la centrale solaire de Kramer Junction en Californie [5].	10
3	Schémas de principe d'une installation solaire à concentration en point (source : <i>National Renewable Energy Lab</i> . . . . .	10
4	Présentation des partenaires du projet STARS (source : document interne projet STARS). . . . .	12
5	Schéma de principe du système de stockage thermique à trois étages adapté à la GDV [6]. . . . .	13
6	Évolution de la température du fluide primaire (eau) dans le cas d'un système de stockage trois étages. En violet, la température du fluide de stockage ; en bleu celle de l'eau durant les phases de stockages et de déstockage en vert (source : document interne projet STARS). . . . .	14
2.1	Enthalpie en fonction de la température dans le cas d'un corps pur. . . .	41
2.2	Enthalpie en fonction de la température dans le cas d'un mélange. . . . .	41
2.3	Diagramme de phase d'une solution eutectique [7] . . . . .	42
2.4	Organigramme de l'algorithme PIMPLE. . . . .	47
3.1	Problème à 1-phase : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein), $\Delta x = 0.0001$ m et $\Delta t = 0.01$ s et à $t = 3600$ s. . . . .	54
3.2	Problème à 1-phase : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein), $\Delta x = 0.0001$ m et $\Delta t = 1$ s et à $t = 3600$ s. . . . .	55
3.3	Problème à 1-phase : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein), $\Delta x = 0.001$ m et $\Delta t = 0.01$ s et à $t = 3600$ s. . . . .	55
3.4	Problème à 1-phase : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein), $\Delta x = 0.001$ m et $\Delta t = 1$ s et à $t = 3600$ s. . . . .	56
3.5	Erreur maximale en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 0.01$ s. . . . .	56
3.6	Erreur maximale en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 1$ s. . . . .	57
3.7	Erreur moyenne en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) $\Delta t = 0.01$ s. . . . .	57

3.8	Erreur moyenne en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 1$ s. . . . .	58
3.9	Erreur sur la position de l'interface en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 0.01$ s. . . . .	58
3.10	Erreur sur la position de l'interface en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 1$ s. . . . .	59
3.11	Problème à 2-phases : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein), $\Delta x = 0.0001$ m et $\Delta t = 0.01$ s et à $t = 3600$ s. . . . .	61
3.12	Problème à 2-phases : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein), $\Delta x = 0.0001$ m et $\Delta t = 1$ s et à $t = 3600$ s. . . . .	62
3.13	Problème à 2-phases : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein), $\Delta x = 0.001$ m et $\Delta t = 0.01$ s et à $t = 3600$ s. . . . .	62
3.14	Problème à 2-phases : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein), $\Delta x = 0.001$ m et $\Delta t = 1$ s et à $t = 3600$ s. . . . .	63
3.15	Erreur maximale en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 0.01$ s. . . . .	63
3.16	Erreur maximale en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 1$ s. . . . .	64
3.17	Erreur moyenne en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 0.01$ s. . . . .	64
3.18	Erreur moyenne en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 1$ s. . . . .	65
3.19	Erreur sur la position de l'interface en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 0.01$ s. . . . .	65
3.20	Erreur sur la position de l'interface en fonction de $\Delta x$ pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron), $\Delta t = 1$ s. . . . .	66
3.21	Schéma du domaine simulé dans le cadre du benchmark expérimental. . .	68
3.22	Position de l'interface ( $A=0.714$ ) pour [3] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu $\Delta T = 0,5$ K et vert $\Delta T = 1$ K). . . . .	72
3.23	Position de l'interface ( $A=0.5$ ) pour [3] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu $\Delta T = 0,5$ K et vert $\Delta T = 1$ K). . . . .	72
3.24	Position de l'interface ( $A=0.286$ ) pour [3] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu $\Delta T = 0,5$ K et vert $\Delta T = 1$ K). . . . .	73
3.25	Comparaison des champs de fraction volumique $Y_i$ à $t = 900$ s pour les formulations Hsource et Tsource à $\Delta T = 1$ K et $A = 0,714$ . . . . .	73
3.26	Evolution temporelle de la fraction liquide obtenue avec Hsource et Tsource avec $\Delta x = 10^{-3}$ m et $\Delta t = 10^{-3}$ s. . . . .	75
3.27	Évolution temporelle du champ de température et de vitesse obtenus avec Hsource et Tsource avec $\Delta x = 10^{-3}$ m et $\Delta t = 10^{-3}$ s. . . . .	77
3.28	Évolution temporelle de la vitesse obtenue avec Hsource et Tsource avec $\Delta x = 10^{-3}$ m et $\Delta t = 10^{-3}$ s. . . . .	78

3.29	Position de l'interface (A=0.714) pour [3] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu $\Delta T = 0.1$ K) avec $\Delta x = 10^{-3}$ m et $\Delta t = 10^{-3}$ s à $t = 120$ s (ronds), $t = 360$ s (triangles), $t = 600$ s (pentagones) et $t = 1020$ s (carrés). . . . .	79
3.30	Position de l'interface (A=0.286) pour [3] (noir) et pour la formulation Hsource (rouge) avec $\Delta x = 10^{-3}$ m et $\Delta t = 10^{-3}$ s à $t = 2$ min (ronds), à $t = 6$ min (triangles) et à $t = 11$ min (pentagones). . . . .	79
3.31	Position de l'interface (cas #1) pour [4] et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu $\Delta T = 0.5$ K et vert $\Delta T = 1$ K) à $t = 3$ h (ronds), à $t = 6$ h (diamants) et à $t = 12$ h (étoiles). . . . .	81
3.32	Position de l'interface (case #5) pour [4] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu $\Delta T = 0.5$ K et vert $\Delta T = 1$ K) à $t = 1$ h (carrés), à $t = 2$ h (diamants) et à $t = 3$ h (croix). . . . .	82
3.33	Évolution temporelle de la fraction liquide obtenue avec Hsource et Tsource avec $\Delta x = 10^{-3}$ m et $\Delta t = 10^{-3}$ s. . . . .	83
3.34	Évolution temporelle du champ de température et de vitesse obtenus avec Hsource et Tsource avec $\Delta x = 10^{-3}$ m et $\Delta t = 10^{-3}$ s. . . . .	85
3.35	Évolution temporelle de la vitesse obtenue avec Hsource et Tsource avec $\Delta x = 10^{-3}$ m et $\Delta t = 10^{-3}$ s. . . . .	86
3.36	Position de l'interface (cas #5) pour [4] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu $\Delta T = 0.1$ K) avec $\Delta x = 10^{-3}$ m et $\Delta t = 10^{-3}$ s à $t = 0.5$ hr (ronds), à $t = 1$ hr (triangles), à $t = 1.5$ hr (pentagones) et à $t = 2$ hr (carrés). . . . .	87
4.1	Modèles thermodynamiques utilisés pour l'enthalpie du MCP ECOS [8] .	93
4.2	Modèles thermodynamiques utilisés pour l'enthalpie du $NaNO_3$ pur et des solutions $NaNO_3/NaNO_2$ [9] . . . . .	95
4.3	Schéma de la configuration du cas test dans les cas ECOS [8] et GREEN-STOCK [9]. . . . .	95
4.4	Position de l'interface solide/liquide à $t = [60 - 600 - 780 - 1020]$ s lors de la phase de charge - cas ECOS (la gravité est selon l'axe $\vec{e}_x$ et la paroi chauffée est en $y = 0$ m). . . . .	97
4.5	Position de l'interface solide/liquide à $t = [600 - 780 - 1020 - 3600]$ s lors de la phase de décharge - cas ECOS (la gravité est selon l'axe $\vec{e}_x$ et la paroi chauffée est en $y = 0$ m). . . . .	98
4.6	Évolution du Fill Factor au cours du temps lors des phases de charge (figure du haut) et de décharge (figure du bas) - cas ECOS. . . . .	99
4.7	Evolution temporelle du champ de température lors de la phase de charge - cas ECOS. . . . .	100
4.8	Evolution temporelle du champ de température lors de la phase de charge - cas ECOS. . . . .	101
4.9	Evolution temporelle du champ de vitesse lors de la phase de charge - cas ECOS. . . . .	102
4.10	Evolution temporelle du champ de vitesse lors de la phase de charge - cas ECOS. . . . .	103

4.11	Evolution temporelle du champ de vorticit�e lors de la phase de charge - cas ECOS. . . . .	104
4.12	Evolution temporelle du champ de vorticit�e lors de la phase de charge - cas ECOS. . . . .	105
4.13	�volution de la position du front de fusion � $t = [600 - 900]$ s durant la phase de charge - cas GREENSTOCK (la gravit�e est selon l'axe $e_x$ et la paroi chauff�ee est en $y = 0$ m). . . . .	108
4.14	�volution du Fill Factor au cours du temps lors des phases de charge et de d�echarge - cas GREENSTOCK. . . . .	109
4.15	�volution du Fill Factor au cours du temps pour diff�erents nombres de cycles charges/d�echarges - cas ECOS. . . . .	110
4.16	�volution du Fill Factor au cours du temps un cycle de charge/d�echarge - cas GREENSTOCK. . . . .	111

# Liste des tableaux

2.1	Types de discrétisation retenus dans OpenFOAM. . . . .	46
3.1	Propriétés thermophysiques du PEG-900 [4] . . . . .	53
3.2	Dimensions du système pour chaque cas étudié dans le cadre du benchmark expérimental . . . . .	69
3.3	Propriétés thermophysiques du gallium [10] . . . . .	69
3.4	Conditions aux limites dans le cas du gallium . . . . .	69
3.5	Conditions aux limites dans le cas du PEG-900 . . . . .	70
4.1	Propriétés thermophysiques du matériau corps pur ECOS [8] . . . . .	92
4.2	Propriétés thermophysiques de la solution binaire ECOS [8]. . . . .	93
4.3	Propriétés thermophysiques du $NaNO_3$ grade laboratoire [9] . . . . .	94
4.4	Propriétés thermophysiques de la solution binaire $NaNO_3/NaNO_2$ [9]. . . . .	95
A.1	Revue d'articles traitant de la résolution numérique de problèmes de changement de phase. . . . .	117



# Remerciements

Cette page est bien la seule de ce manuscrit où je peux m'exprimer à la première personne et je compte en faire bon usage. Pourtant il ne s'agit pas ici de je mais de Vous. Vous tous qui m'avez épaulé et supporté durant ces trois années. Vous, sans qui je n'y serai jamais arrivé. Cette thèse c'est à vous que je la dois alors il est bien normal que je vous accorde quelques lignes parmi les milliers que compte ce mémoire. J'avais dit que je serai soûl pour écrire mes remerciements. Je vais me contenter d'être fatigué. Au moment où je tape ces mots, je pense à vous. Beaucoup de noms et de visages me viennent à l'esprit. Je ne veux pas faire une liste ici. Cela ferait beaucoup trop classement et c'est loin d'être ce que je ressens. J'espère que celles et ceux qui liront ces lignes comprendront que c'est d'eux que je parle et que chacun de ces mots s'adresse directement à eux. Dans la vie je n'ai pas pour habitude de partager mes sentiments, mais j'espère qu'ici, en me lisant, vous ressentirez toute la gratitude que j'ai pour vous tous.

Bon je sais que j'avais dit que je ne ferai pas de liste, et ce qui suit n'en est pas une, mais je me dois tout de même de citer quelques personnes.

À commencer par mes directeurs Jean-Pierre et Erwin et j'ajouterai Didier, Stéphane, Sylvain, Pierre, tous ceux qui de par leurs conseils, leurs écoutes et leurs aides ont rendu cette thèse possible. Mais aussi toute l'équipe du LaTEP. Jamais je ne me serai attendu à passer d'aussi bons moments en allant travailler et ça c'est grâce à vous tous.

Je tiens également à vivement remercier l'ensemble des membres du jury pour le temps et l'intérêt qu'ils ont accordé à ce travail.

Une pensée particulière pour le quatrième étage et pour mon bureau. J-C, Théo merci les gars.

Adrien, Alex, ces mots sont pour vous. Vous allez pouvoir arrêter de vous foutre de moi parce que j'avais encore une carte étudiante. L'année 2015 n'aura pas été de tout repos, je suis heureux d'avoir pu compter sur vous pour la traverser. Merci les bros (et voilà comment on place bros dans une thèse scientifique). Cécile, Léa et Marlène je ne vous oublie pas bien sûr, tout comme vos preuves d'amitié et vos encouragements. Merci les filles.

À mon Père et à ma mère sans qui je ne serais pas arriver là. Merci pour votre écoute, vos conseils et votre patience. Je ne le dis presque jamais mais je vous remercie pour tout ce que vous avez fait pour moi pour que je puisse réussir. Je vous aime.

Enfin il est une personne que je me dois de citer avant de conclure et c'est toi Adeline. Tu n'as jamais cessé de m'encourager et ce jusqu'à aujourd'hui. Ça a beaucoup compté pour moi. Merci.



# Résumé

L'un des principaux leviers technologiques permettant le développement industriel de process de production énergétique renouvelable et à haute efficacité, consiste en l'élaboration d'une solution innovante de stockage de l'énergie. Ce système de stockage doit permettre de lisser la période de production et ainsi de suivre au plus près les besoins des consommateurs.

Parmi les solutions existantes, le stockage thermique par chaleur latente présente de nombreux avantages qui font qu'aujourd'hui il fait l'objet de plusieurs travaux de recherche et de développement. Cette technologie est basée sur le principe que certaines classes de matériaux, appelés matériaux à changement de phase (MCP), libèrent (transition liquide/solide) ou accumulent (transition solide/liquide) de l'énergie lorsqu'ils sont soumis à un changement de phase.

En amont du développement d'un design de stockage, il est essentiel de comprendre et de maîtriser les processus thermiques entrant en jeu lors des phases de fusion et de solidification du matériau et cette compréhension passe par le développement de modèles numériques adaptés aux problématiques rencontrées.

Dans le cadre de ce manuscrit, la filière technologique qui nous intéresse est celle des centrales solaires à concentration. Porté par l'ADEME dans le cadre du projet STARS (Stockage Thermique appliqué à l'extension de pRoduction d'énergie Solaire thermodynamique), le travail réalisé au sein du LaTEP consiste à analyser les performances d'une solution de stockage via la modélisation de cette dernière en considérant les phénomènes thermiques et hydrauliques. Le travail de modélisation est effectué à l'aide du logiciel de CFD libre de droit OpenFOAM dans lequel est développé et implémenté, par le laboratoire, un module dédié au problème qui nous concerne, à savoir la résolution eulérienne (maillage fixe) des équations de conservation pour un fluide incompressible, en présence d'un changement de phase solide-liquide dominé par des mouvements convectifs (convection-dominated phase change).

Concernant les problèmes de transition de phase, diverses méthodes mathématiques et numériques ont été développées pour rendre compte finement de la physique de ces phénomènes. Après avoir effectué une revue de ces dernières dans la première partie du manuscrit, nous avons sélectionné deux formulations que nous avons implémenté dans OpenFOAM. Une fois ce travail réalisé nous avons taché de comparer les résultats renvoyés par ces différentes formulations en les confrontant aux résultats expérimentaux disponibles dans la littérature. Cela nous a permis d'une part de nous conforter dans l'utilisation de nos solveurs et sur la pertinence des résultats obtenus avec ces derniers et d'autre part de mettre en évidence les écarts entre les solutions renvoyées par chaque formulation. Fort de ce constat, nous avons souhaité évaluer l'impact de l'équation d'état utilisée pour relier l'enthalpie et la température, indispensable à la fermeture thermo-

dynamique du système d'équations. Cette comparaison s'est faite par la simulation d'un échangeur type stockage thermique (simulations en 2D) et par l'analyse des performances de ce dernier lors des phases de stockage, de déstockage et au cours de plusieurs séries de cycles. Les résultats obtenus nous ont permis de conclure sur l'importance d'une bonne caractérisation des MCP afin de pouvoir modéliser leur comportement au plus juste via la formulation mathématique et la loi d'état la plus adaptée.

# Abstract

A major technological lever to the industrial development of renewable energy production processes with high efficiency, is the development of an innovative solution to store the energy. This storage device should help to smooth the production period and to follow closely the demand.

Among the existing solutions, latent heat thermal storage has many advantages that make today it is the subject of several research and development projects. This technology is based on the principle that certain classes of material, called phase change materials (PCMs), release (during liquid to solid transition) or accumulate (during solid to liquid transition) energy when subjected to a phase change.

Upstream of the development of a new storage design, it is essential to understand and master the thermal processes involved in the melting and solidification phase of the material and this knowledge comes through the development of numerical models adapted to the problems encountered.

In the particular context of this Phdthesis, the technological process that interests us is that of CSP (Concentrated Solar Power). Funded by ADEME under the STARS Project (Thermal Storage Applied to the expansion of pRoduction of thermodynamic Solar energy), the work done by the LaTEP is to analyze the performance of a storage solution by modeling the latter, considering the thermal and hydraulic phenomena. The modeling work is done with the free source OpenFOAM CFD software in which is developed and implemented by the laboratory, a new module dedicated to the problem we are concerned, namely the resolution of Eulerian (fixed grid) conservation equations for an incompressible fluid in the presence of a solid-liquid phase change dominated by convective motions.

Regarding the phase transition problems, various mathematical and numerical methods have been developed to finely consider the physics of these phenomena. After conducting a review of methods in the first part of the Phd thesis, we selected two formulations that we have implemented in OpenFOAM. Once this work done, we have managed to compare the results returned from these formulations by comparing them with experimental results available in the literature and also with analytical cases. This allowed us firstly to strengthen us in the use of our solvers and the accuracy of the obtained results and secondly to highlight the differences between the solutions returned by each formulation. After that, we wanted to assess the impact of the equation of state used to connect the enthalpy to the temperature, essential for closing the thermodynamic equations. This comparison was made by the simulation of a thermal storage exchanger (2D simulation) and by analyzing the performance of this latter during the charge phase, the discharge one and during several series of cycles. The obtained results allowed us to conclude about the importance of a good characterization of PCM in order to model their behavior as accurately via the mathematical formulation and the most suitable state law.



# Nomenclature

## Abréviation

MCP	matériaux à changement de phase
CFD	computational fluid dynamics
CSP	concentrated solar power

## Opérateur

$\vec{\nabla}()$	gradient
$\vec{\nabla}\cdot$	divergence
$\nabla^2$	Laplacien
$\ \cdot\ $	norme

## Lettres latines

$A$	fonction de porosité	$[kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}]$
$c$	capacité thermique massique	$[J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}]$
$e$	épaisseur	$[m]$
$g$	accélération de la pesanteur	$[m \cdot s^{-2}]$
$H$	enthalpie	$[J]$
$h$	enthalpie massique	$[J \cdot kg^{-1}]$
$k$	conductivité thermique	$[W \cdot K^{-1} \cdot m^{-1}]$
$l$	longueur	$[m]$
$L$	chaleur latente de fusion	$[J \cdot kg^{-1}]$
$m$	masse	$[kg]$
$n$	normale à la surface	$[-]$
$P$	pression	$[bar]$
$r$	rayon courant	$[m]$
$T$	température	$[^{\circ}C \text{ ou } K]$
$t$	temps	$[s]$
$u$	composante de la vitesse selon $\vec{e}_x$	$[m \cdot s^{-1}]$
$\vec{V}$	vecteur vitesse	$[m \cdot s^{-1}]$
$v$	composante de la vitesse selon $\vec{e}_y$	$[m \cdot s^{-1}]$
$x$	position	$[m]$
$y$	position	$[m]$
$Y$	fraction massique	$[-]$
$z$	position	$[m]$

## Lettres Grecques

$\alpha$	dilatation thermique	$[kg \cdot s^{-1} \cdot m^{-1}]$
$\beta$	coefficient de dilatation thermique	$[K^{-1}]$
$\mu$	viscosité dynamique	$[kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}]$
$\nu$	viscosité cinématique	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
$\rho$	masse volumique	$[kg \cdot m^{-3}]$

## Indice

<i>bouss</i>	boussinesq
<i>E</i>	eutectique
<i>F</i>	fusion
<i>l</i>	liquide
<i>liq</i>	liquidus
<i>ref</i>	référence
<i>s</i>	solide
<i>sol</i>	solidus
<i>w</i>	solvant

# Introduction

Le constat énergétique mondial actuel est le suivant. Depuis 1950, la consommation totale d'énergie a été multipliée par 7 et les émissions de carbone issues de combustibles fossiles ont également été multipliées par 5 sur cette période. Quand à la concentration de  $CO_2$  dans l'atmosphère, elle dépassait 380 ppm en 2005 (en 2050, les scénarios les plus optimistes prévoient une stabilisation aux alentours de 450 ppm). Le groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat (GIEC) estime le réchauffement climatique à plusieurs degrés d'ici 2100. En France, la température moyenne a augmenté de 1K sur les quinze dernières années [11].

Pour limiter l'élévation moyenne de la température de 2K à 3K, il faudrait diviser par 2 avant 2050 les émissions mondiales. Comme les émissions des pays en développement vont continuer de croître, les émissions des pays industrialisés devront être divisées par 4 avant cette échéance. Il s'agit du fameux facteur 4 en ligne de mire de notre politique énergétique nationale dans la loi Grenelle 2 [11]. Cette succession de chiffres est là pour nous rappeler l'enjeu que représente le développement de nouvelles technologies de production d'énergie.

Ce contexte, bien qu'alarmant, a favorisé le développement de nombreuses technologies de production d'énergie dites renouvelables. Dans le cadre de ce manuscrit, la technologie qui nous intéresse est celle des centrales solaires thermodynamiques ou CSP pour Concentrated Solar Power. Avant de faire un bref historique de la filière technologique en France, attardons-nous sur le principe de fonctionnement de ce type d'installations.

Une centrale solaire thermodynamique est basée sur le concept de concentration du rayonnement solaire afin de produire de la vapeur ou de l'air chaud qui sera ensuite utilisé pour générer de l'électricité via un cycle de production classique. La plupart des systèmes utilisent des miroirs pour concentrer le rayonnement du fait de leur grande réflectivité. On trouve alors deux types de configuration :

- Les centrales à concentration en ligne (miroirs cylindro-paraboliques et réflecteurs de Fresnel) ;
- Les centrales à concentration en point (centrales à tour et à antennes paraboliques).

La figure 1 présente le cas d'une centrale à concentration en ligne. On peut également voir sur la figure 2 [5] une photographie de la centrale de Kramer en Californie fonctionnant avec la technologie des miroirs cylindro-paraboliques.

Le fluide primaire, généralement de l'eau ou une huile de synthèse, circule au niveau du

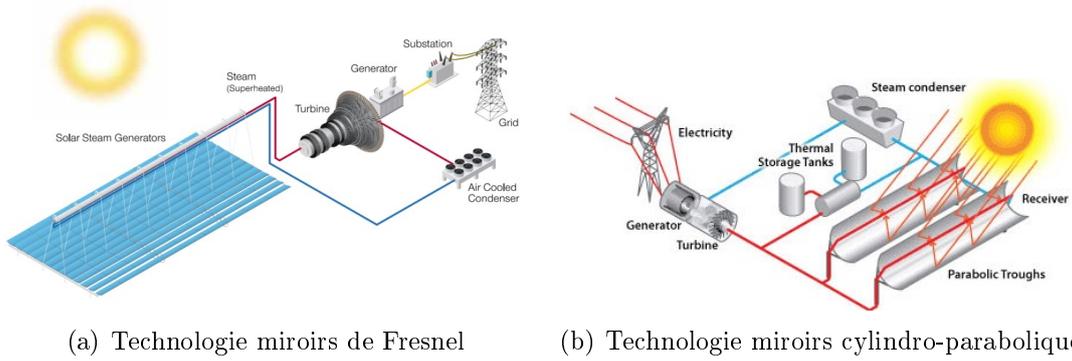


FIGURE 1 – Schémas de principe d’une installation solaire à concentration en ligne (source : *National Renewable Energy Lab*).



FIGURE 2 – Photographie de la centrale solaire de Kramer Junction en Californie [5].

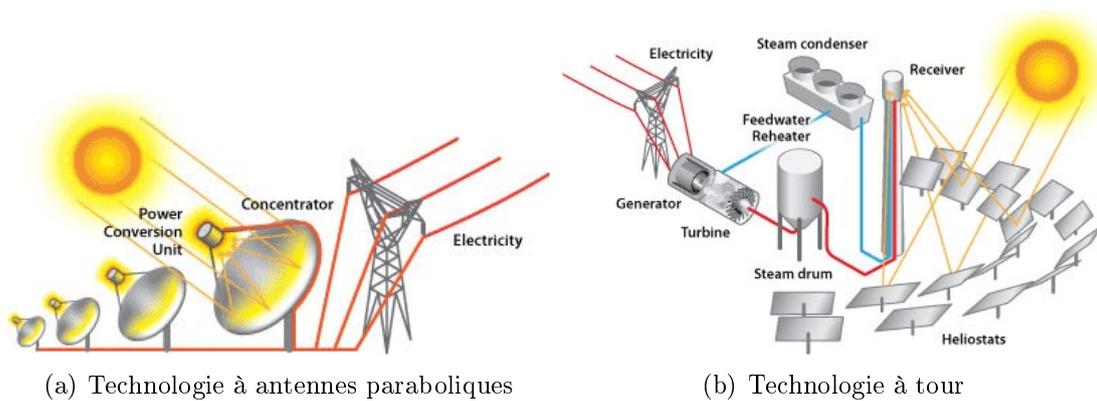


FIGURE 3 – Schémas de principe d’une installation solaire à concentration en point (source : *National Renewable Energy Lab*).

champ de capteurs au travers de l’absorbeur puis transfère la chaleur à un système conventionnel de production électrique par vapeur (turbine). Avec plus de 354 MW de puissance installée dans le sud de la Californie, les centrales solaires cylindro-paraboliques repré-

sentent aujourd'hui la technologie de CSP la plus mûre.

Dans les centrales à antennes paraboliques, une génératrice est placée dans le plan focal du capteur afin de produire de l'électricité directement dispatchée sur le réseau. On trouve deux types de génératrices : des moteurs Stirling ou des turbines à gaz de petites dimensions. Les centrales à tour utilisent quand à elles un champ de miroirs, des héliostats, montés sur traqueurs pour concentrer le rayonnement en haut de la tour où se trouve un absorbeur. La vapeur d'eau qui y est générée sert alors à alimenter une turbine.

La technologie CSP s'est donc développée suite aux crises pétrolières de 1973 et 1979. La France fut même pionnière dans le domaine avec le développement de plusieurs prototypes (ex : centrale solaire THEMIS). Cependant la rechute des prix de l'énergie dans les années 1980 et 1990 n'a pas permis à la filière technologique d'atteindre sa maturité commerciale. Le CSP a pris un nouvel essor dans les années 2000 et ce jusqu'en 2013, période durant laquelle il a connu une accélération significative tant du point de vue des solutions industrielles (offre) que des perspectives de marché (demande). Quelques chiffres illustrant la croissance du marché du CSP :

- 1 GW de capacité installée en 2010 ;
- 1,7 GW de capacité installée en 2011 ;
- 2,8 GW de capacité installée + 2 GW en construction en 2012 ;
- 4 GW de capacité installée en 2013 ;

Et selon les prévisions (source IEA) : 30 GW de capacité installée d'ici à 2020.

Force est de constater que la plupart des marchés se concentrent dans les régions à fort ensoleillement direct : États-Unis, pays du bassin méditerranéen, Moyen-Orient, Inde, Afrique du Sud, Chine et Australie. Il s'agit donc pour les acteurs français de se structurer afin de proposer une offre compétitive à l'export, sur un marché en plein développement.

Cependant, depuis 2013, le développement du CSP s'est fortement ralenti du fait de la diminution des investissements dans les énergies renouvelables en général et des revirements et instabilités politiques dans certains pays clefs (Australie, pays d'Afrique du Nord). Outre ces problématiques, le CSP se heurte à une autre contrainte majeure : son intermittence. L'enjeu est donc de découpler la production d'électricité de la disponibilité de la ressource solaire :

- d'une part, pour suivre au plus près la demande en augmentant la disponibilité de la centrale (extension de la période de production en dehors des heures d'ensoleillement) ;
- d'autre part, afin de diminuer le coût de production du kWh électrique. La capacité de production d'une centrale solaire est limitée par la taille de la turbine tandis que le champs solaire limite lui la quantité d'énergie produite. L'installation d'une solution de stockage thermique dans une centrale solaire permet de diminuer la taille de la turbine pour une même quantité d'énergie produite, sur une période de production plus longue.

Les enjeux du développement du stockage d'énergie sont technico-économiques, environnementaux et sociaux. Ce dernier offre une alternative à l'utilisation de ressources dites fossiles et contribue ainsi à l'essor de la filière CSP en France.

Par ailleurs, le CSP offre l'avantage de pouvoir stocker l'énergie sous forme de chaleur, solution beaucoup moins onéreuse que le stockage électrique.

C'est donc dans ce contexte que l'ADEME, l'Agence de l'Environnement et de la Maîtrise des Energies, aux travers des Investissements d'avenir et de l'Appel à Manifestation d'Interêt solaire 2011 a financé le projet STARS dans lequel s'inscrit les travaux de thèse de ce manuscrit.

STARS, pour Stockage Thermique Appliqué à l'extension de pRoduction d'énergie Solaire thermodynamique, est un projet visant un développement sur trois années d'une solution de stockage thermique innovante pour des centrales solaires à concentration avec génération directe de vapeur (GDV) couplée à la technologie des réflecteurs compacte linéaire de Fresnel (CLFR). Le choix de cette technologie est justifié par sa simplicité, son faible coût (en comparaison des autres types de technologies CSP, le CLFR avec GDV est la technologie la moins chère du marché) et son occupation au sol (encombrement). Cependant, il n'existe pas aujourd'hui de solution viable de stockage de l'énergie adaptée à ce type de systèmes, seulement des prototypes. D'où la nécessité du projet STARS.

Parmi les solutions existantes, le stockage thermique par chaleur latente présente de nombreux avantages qui font qu'aujourd'hui il fait l'objet de plusieurs travaux de recherche et de développement. Cette technologie est basée sur le principe que certaines classes de matériaux, appelés matériaux à changement de phase (MCP), libèrent (transition liquide/solide) ou accumulent (transition solide/liquide) de l'énergie lorsqu'ils sont soumis à un changement de phase. C'est cette technologie qui est au centre des travaux de développement du projet STARS.

Le consortium du projet se compose de six partenaires issus des milieux académique et industriel comme on peut le voir ci-dessous sur la figure 4.



FIGURE 4 – Présentation des partenaires du projet STARS (source : document interne projet STARS).

- AREVA, coordinateur du projet, grand groupe de l'industrie énergétique française ;
- Le CEA qui joue le rôle du partenaire stratégique de recherche et développement ;
- HAMON, partenaire industriel spécialisé dans la fabrication d'échangeurs thermiques ;

- le LaTEP, l'IPNO et le LPCS, trois partenaires académiques caution scientifique indispensable sur les thèmes clefs que sont les échanges thermiques latents, les matériaux à changement de phase (MCP) et la corrosion.

Plus précisément, en ce qui concerne le travail effectué au sein du LaTEP, laboratoire d'accueil de cette thèse, il s'agit d'apporter une expertise sur la caractérisation des MCP et l'étude de leur comportement thermique lors de leur intégration au système de stockage d'énergie par chaleur latente à l'aide de campagnes expérimentales et numériques.

Afin de répondre aux principaux objectifs de performances du projet, une solution de stockage thermique a été sélectionnée dont le schéma de principe est visible sur la figure 5.

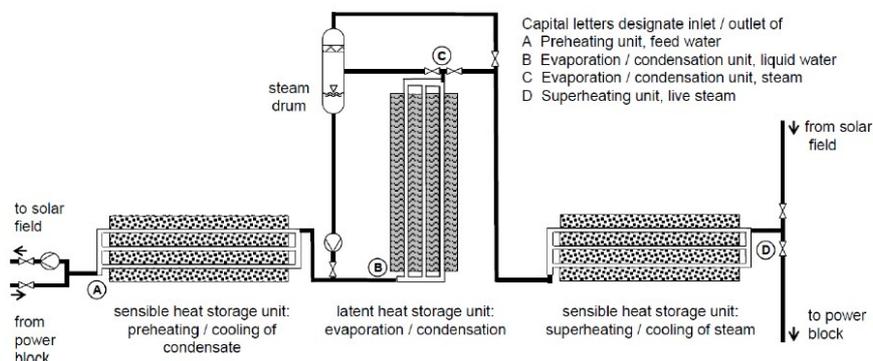


FIGURE 5 – Schéma de principe du système de stockage thermique à trois étages adapté à la GDV [6].

Dans le cas d'une centrale à GDV, le système de stockage le mieux adapté est celui permettant de suivre l'ensemble du cycle de transformation (chauffe, évaporation et surchauffe) réalisé par le fluide primaire. Il est donc nécessaire de développer un module de stockage dédié à chacune de ces étapes comme on peut le voir sur la figure 6.

La combinaison de deux modules de stockage par chaleur sensible, pour les phases de chauffe et de surchauffe, et d'un module de stockage par chaleur latente, pour la phase d'évaporation (lorsque l'on décharge le système, respectivement pour la phase de condensation lorsque l'on charge ce dernier) diminue l'écart de température entre le fluide primaire et le MCP augmentant ainsi l'efficacité du système (voir figure 6).

Une fois la solution de stockage intégrée, le fonctionnement de la centrale se fait en trois temps :

- Fonctionnement sans stockage ; dans un premier temps, la vapeur produite par les champs de capteurs alimente directement la turbine pour produire de l'électricité (la quantité d'énergie envoyée à la turbine est inférieure à la capacité nominale de cette dernière) ;
- Fonctionnement en charge ; la vapeur produite alimente cette fois la turbine ainsi que

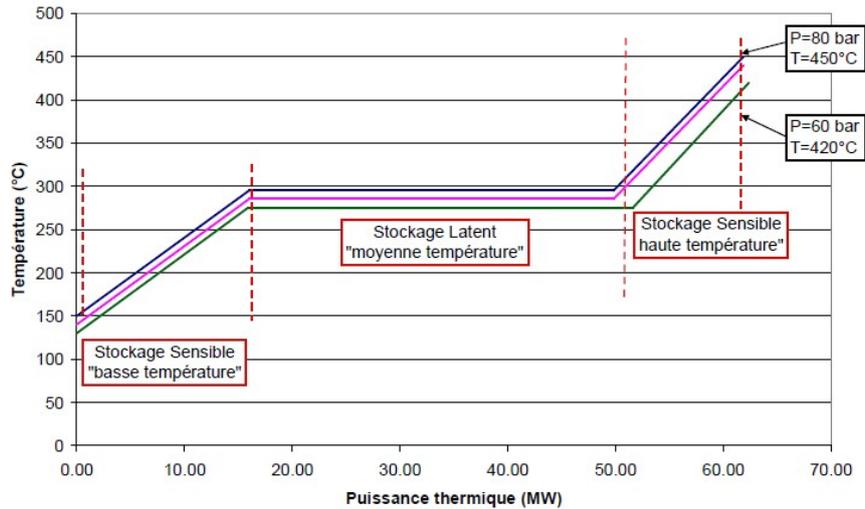


FIGURE 6 – Évolution de la température du fluide primaire (eau) dans le cas d'un système de stockage trois étages. En violet, la température du fluide de stockage ; en bleu celle de l'eau durant les phases de stockages et de déstockage en vert (source : document interne projet STARS).

le système de stockage dans lequel on vient fondre le MCP initialement à l'état solide ;

- Fonctionnement en décharge ; le champ solaire est à l'arrêt ou ne produit pas suffisamment d'énergie pour alimenter la turbine. Le système de stockage prend donc le relais pour produire de la vapeur surchauffée et ainsi assurer le fonctionnement de la turbine à capacité nominale sur une plage de fonctionnement étendue.

L'effort d'innovation consiste en la levée de verrous liés au fonctionnement de l'étage latent du système de stockage thermique : la caractérisation, le choix et la maîtrise des MCP à un niveau industriel d'une part, et la conception d'un échangeur optimisant les transferts thermiques d'autre part. Pour se faire, des informations concernant les phénomènes physiques fins qui ont lieu dans le système de stockage sont indispensables. D'où la nécessité d'une campagne de modélisation numérique portant à la fois sur les aspects thermique et hydraulique du problème.

L'objectif initial de la thèse était la création d'un outil numérique de prévision des performances du système de stockage d'une installation solaire type CSP à GDV et CLFR. Précédé d'un modèle simplifié découplant les différents phénomènes et difficultés associés, une approche globale multi-échelle et multi-physique était envisagée.

L'objectif initial a évolué durant mes trois années de thèse. Ce travail s'est en partie émancipé des différentes considérations du projet STARS, la composante numérique prenant le dessus sur la problématique système propre au design de la solution de stockage développée dans le projet. C'est pour cette raison que dans les chapitres qui vont suivre il sera peu fait mention du projet STARS. L'approche adoptée met l'accent sur les MCP et les méthodes de modélisation fine de leur comportement thermique et hydraulique lorsqu'ils sont soumis aux contraintes de fonctionnement d'un échangeur type stockage thermique,

ces considérations pouvant être étendues à d'autres systèmes que celui sélectionné dans le projet.

Au centre de ce travail on trouve donc un outil de calcul CFD entièrement développé et implémenté dans un logiciel libre de droit, OpenFOAM, sur lequel nous reviendrons par la suite, dans le cadre de cette thèse. Ce dernier permet la simulation des phénomènes thermiques couplés (transfert de chaleur et de masse), en présence de conduction et de convection d'une solution de stockage thermique par chaleur latente.

La conception de cet outil, les modèles physiques utilisés pour représenter le comportement du MCP, l'analyse de ces modèles par comparaison à des cas expérimentaux et analytiques et enfin son utilisation dans l'étude des performances d'un système de stockage thermique par chaleur latente, seront détaillés dans la suite ce manuscrit.

On trouvera donc dans le chapitre 1 le positionnement de notre problématique avec une présentation synthétique des modèles mathématiques et numériques mis en jeu dans la simulation d'un changement de phase liquide-solide.

À la suite de cette étude bibliographique nous ferons le choix de plusieurs formulations qui seront alors implémentées dans l'outil de calcul CFD dédié. Le chapitre 2 contiendra donc l'ensemble des équations modélisant notre problème d'un point de vue thermique mais aussi hydraulique, ainsi qu'une présentation d'OpenFOAM.

Le premier ensemble d'études que nous avons mené sera présenté dans le chapitre 3 où l'on réalisera un comparatif théorique et expérimental des résultats renvoyés par les différentes formulations de notre problème via notre solveur.

Enfin, dans le chapitre 4, nous sélectionnerons une formulation de l'équation de conservation de l'énergie et observerons cette fois quel est l'impact, d'un point de vue système, de la relation reliant l'enthalpie à la température.

Une conclusion regroupant l'ensemble des remarques et réflexions faites jusque là viendra clore ce manuscrit.



# Chapitre 1

## Positionnement du problème

Le positionnement de la problématique qui concerne ces travaux de thèse va se faire selon deux grands axes :

- un axe purement numérique et modèles physiques ;
- un axe système, avec la mise en application des différents modèles mathématiques vus dans le précédent axe, pour la simulation de systèmes énergétiques.

Dans un premier temps, nous allons décrire la situation qui nous concerne d'un point de vue numérique et parler du problème de Stefan ce qui nous permettra de justifier la stratégie de modélisation qui a été adoptée pour la construction du solveur projet. Dans un second temps, nous basculerons vers une analyse plus orientée technologie de stockage thermique par chaleur latente afin de croiser le travail de développement numérique avec les considérations très appliquées de ces systèmes.

### 1.1 Modélisation du changement de phase solide/liquide

#### 1.1.1 Le problème de Stefan

La situation qui nous intéresse ici est connue sous la dénomination générique de problème de Stefan. Au départ cette désignation ne concernait que les problèmes de conduction de chaleur avec changement de phase liquide/solide. Aujourd'hui tout problème de diffusion dans un domaine déformable se retrouve englobé par cette désignation. On parle également dans la littérature de problèmes à frontières libres ou mobiles, notions qui seront détaillées dans la suite. Ce problème a fait et fait toujours l'objet de nombreux travaux tant théoriques, qu'expérimentaux ou numériques dans des domaines aussi divers que la métallurgie, la géologie ou bien encore la médecine. Les travaux pionniers sur cette problématique ont notamment été réalisés par Clapeyron et Lamé en 1831 qui ont étudié la formation de la croûte terrestre [12]. La large diffusion des travaux et la renommée de l'auteur ont fait que le problème porte le nom du scientifique Jožef Stefan qui a introduit dans ses études sur la fonte de la calotte polaire la classification générale de ce type de problème [1]. Evans a quant à lui prouvé l'existence d'une solution au problème de Stefan en 1951 [13] tandis que Douglas a démontré son unicité en 1957 [14].

Le problème de Stefan fait partie de la classe de problèmes à interface qui ont énormément focalisé l'attention des chercheurs, que ce soit ceux associés à une brusque variation des

propriétés du milieu (le changement de phase en est un parfait exemple), que l'étude de phénomènes dont la taille caractéristique est très petite (ondes de choc).

L'étude de ce problème trouve son intérêt dans de nombreuses applications. Dans le domaine des énergies renouvelables, et notamment dans le cas d'une solution de stockage thermique couplé à une centrale solaire, un apport de chaleur est utilisé pour faire fondre un corps fusible, le MCP, afin d'y stocker de l'énergie sous forme de chaleur latente. Le processus inverse de solidification permettra la restitution de cette dernière. On peut alors stocker et déstocker de grandes quantités d'énergie sur un intervalle de températures réduit autour de la température de fusion du MCP. Pour justifier ce point, les équations (1.1), (1.2) et (1.3) montrent que pour stocker une même quantité d'énergie pour une même masse d'élément, un matériau qui ne ferait que du stockage sensible devrait subir un élévation de température bien plus importante qu'un MCP qui changerait d'état à une température  $T_F$ .

$$E_{sensible} = \int_{T_1}^{T_2} mcdT \quad (1.1)$$

$$E_{sensible+latent} = \int_{T_3}^{T_F} mc_S dT + mL_F + \int_{T_F}^{T_4} mc_L dT \quad (1.2)$$

$$E_{sensible} = E_{sensible+latent} \quad (=) \quad T_2 - T_1 > T_4 - T_3 \quad (1.3)$$

Avec  $c$ ,  $c_s$ ,  $c_l$  les capacités thermiques massiques du matériau et du MCP solide et liquide en  $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ ,  $L_F$  la chaleur latente du MCP en  $J \cdot kg^{-1}$  et  $m$  la masse d'élément en  $kg$  et  $T$  la température en  $K$ .

En ce qui concerne la modélisation physique et mathématique du problème de Stefan, de nombreuses possibilités sont envisageables, chacune avec leurs avantages et inconvénients. Pour tracer de grandes lignes, le problème se subdivise en deux sous-problèmes :

- Le problème de Stefan à une phase; désigne uniquement la phase liquide du MCP comme étant active dans le processus de changement de phase tandis que la phase solide reste à sa température de fusion. Dans ce cas le taux de fusion/solidification (en faisant l'hypothèse que les propriétés du MCP sont constantes) est proportionnel au nombre de Stefan (1.10).
- Le problème de Stefan à deux phases ou encore problème de Neumann [15]; désigne une approche plus réaliste des phénomènes de changement de phase. Dans ce cas l'état initial du MCP correspond à l'état tout solide (si l'on prend l'exemple d'une fusion) à une température inférieure à celle de fusion.

### 1.1.2 Formulation mathématique du problème de changement de phase

Dans le cas qui nous concerne, la principale difficulté numérique rencontrée réside dans la variation brutale des propriétés thermophysiques du MCP au travers une interface dont la position et la forme varient au cours du temps. Au delà des différences notables qu'il peut

exister pour de nombreux corps entre la phase solide et la phase liquide (masse volumique, capacité calorifique, conductivité thermique), le passage d'un état solide à un état liquide entraîne de facto l'apparition de mouvements fluides qui viennent perturber l'interface (si prise en compte des effets convectifs il y a, bien entendu). Dans le cas inverse (passage d'un état liquide à un état solide) le champ de vitesses doit progressivement s'annuler. On est donc dans la situation où dans un cas le milieu est fluide et est alors régi par les équations de la mécanique des fluides, tandis que dans l'autre cas, le milieu est solide et est principalement régi par l'équation de la chaleur.

Finalement la prise en compte de ce comportement hétérogène d'un point de vue de la modélisation physique, mais aussi dans l'intégration numérique de ce modèle pour la réalisation de simulations représente le véritable challenge à relever. Il existe peu de solutions analytiques et la plupart ne concerne que des cas mono-dimensionnels pour une région infinie ou semi-infinie avec des conditions aux limites et initiales simples sans prise en compte de la variation des propriétés thermophysiques du matériau. Dans ce cas particulier, la solution exacte du problème prend la forme d'une fonction ne dépendant que de la seule variable suivante (1.4) [16, 17] :

$$\frac{x}{\sqrt{t}} \quad (1.4)$$

L'évolution de la position de l'interface solide/liquide, dont le mouvement est contrôlé par la quantité de chaleur latente absorbée (ou perdue) à la frontière, est décrite mathématiquement par l'équation (1.5) aussi connue sous le nom de condition de Stefan :

$$\rho L_F \left( \frac{ds(t)}{dt} \right) = k_s \left( \frac{\partial T_s}{\partial t} \right) - k_l \left( \frac{\partial T_l}{\partial t} \right) \quad (1.5)$$

Avec  $s(t)$  la position de l'interface.

On ne connaît donc pas a priori la position de l'interface ni la vitesse à laquelle cette dernière se déplace. On cherche donc à la localiser à chaque pas de temps. De plus, le fait que chaque phase ait des propriétés thermophysiques différentes peut entraîner des discontinuités dans le modèle physique employé. Nous allons maintenant voir qu'elles sont les méthodes numériques existantes pour gérer ces difficultés.

Les méthodes qui nous intéressent se distinguent en deux grandes classes selon la formulation des équations de conservation :

- Les méthodes à domaines multiples ; ces méthodes sont basées sur la formulation complète de Stefan (nous reviendrons sur cette formulation dans la section consacrée à ces méthodes) et utilisent des méthodes de type maillage variable (*moving grid method*) ou eulerien afin de suivre explicitement ou implicitement le mouvement de l'interface (dans la littérature on les retrouve sous les dénominations suivantes : *multi-domain*, *2-domain*, *variable domain method*) ;
- Les méthodes à domaine unique ; ces méthodes sont basées sur la formulation enthalpique des équations de conservation ainsi que sur la spécification d'une variable : la fraction massique liquide nodale (dans la littérature on les retrouve sous les dénominations suivantes : *one-domain*, *fixed-grid method*).

### 1.1.2.1 Les méthodes à domaines multiples

Cette catégorie de méthodes fait partie de la famille des méthodes à interface nette et se sous divise en deux types de méthodes :

- Les méthodes à maillage variable ou *moving-grid method* ;
- Les méthodes eulériennes.

Le principe de base des méthodes à maillage variable est de continuellement déformer le maillage afin de s'assurer que la position de l'interface solide/liquide corresponde à une ligne de points de ce dernier. Cela revient à augmenter la densité du maillage aux environs de l'interface, assurant ainsi une bonne représentation des processus physiques mis en jeu au niveau du front de fusion. Partout ailleurs dans le domaine simulé, la densité du maillage sera plus faible. On améliore ainsi l'efficacité du calcul. Pour se faire il existe deux approches :

- La première fait en sorte d'adapter le maillage en l'affinant à chaque itération. Le modèle est initialisé avec un certain nombre de mailles, puis, d'itération en itération des mailles sont ajoutées ou alors retirées. Cette approche est désignée par le nom de *h-method* dans la littérature [18–21]. La difficulté principale de ce type de méthodes consiste à maintenir la structures des données puisque la topologie et le nombre de nœuds changent entre chaque pas de temps ;
- La seconde approche quant à elle conserve un nombre de mailles constant tout au long de la simulation mais déplace le maillage pour suivre l'évolution du front de fusion, la vitesse de déplacement du maillage étant celle du fluide (méthode lagrangienne) ou une vitesse sélectionnée arbitrairement (méthode ALE pour *Arbitrary-Lagrangian-Eulerian*). Dans la littérature ce type de méthodes est regroupé sous le nom de *moving mesh method* ou encore *r-method* pour *relocation-method* [22–25].

Avec les méthodes eulériennes, un maillage fixe est utilisé associé à une méthode pour soit suivre l'interface soit la reconstruire. Dans un premier cas l'interface est suivie explicitement et donc les domaines liquide et solide sont clairement identifiés et séparés. Le déplacement de l'interface est régi par l'équation de conservation de l'énergie qui joue alors le rôle d'une condition à la limite pour les deux domaines. Il s'agit ici des méthodes dites de *front tracking*. Le suivi de l'interface peut aussi bien se faire en surface qu'en volume.

Dans un second cas, on parle maintenant de méthodes de *front capturing*, l'interface est suivie implicitement à partir d'une nouvelle équation qui permet de reconstruire sa position. En fonction des méthodes, cette équation peut être soit basée sur des considérations physiques (méthodes dites du champ de phase), soit sur le simple ajout d'un marqueur (méthodes du *level set*, du *ghost-fluid* et du *volume of fluid*).

Il existe également un cas, les méthodes de *mapping* ou de *transforming-grid*, dans lequel une fonction est utilisée pour transformer le domaine incurvé contenant l'interface de changement de phase en un domaine avec une forme simple. On peut ainsi fixer le déplacement sur un maillage uniforme et constant.

Comme précisé plus haut, ce type d'approches se base sur la formulation complète de Stefan (1.6), (1.7) et (1.8) [16] :

$$\rho c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (k_s \vec{\nabla} T_s) \quad (1.6)$$

$$\rho c_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (k_l \vec{\nabla} T_l) \quad (1.7)$$

$$k_s \vec{\nabla} T_s \cdot \vec{n} - k_l \vec{\nabla} T_l \cdot \vec{n} = \rho L_F v \cdot \vec{n} \quad (1.8)$$

Où  $\vec{n}$  est la normale à l'interface pointant vers le liquide et  $v$  la vitesse de cette même interface de changement de phase.

Les équations (1.6) et (1.7) sont les équations de la chaleur dans les phases solide et liquide. L'équation (1.8) représente la conservation de l'énergie au niveau du front de fusion/solidification. Ces équations sont établies dans le cas d'un changement de phase purement conductif. Lorsqu'une variation de masse volumique apparaît entre les deux phases et que donc des mouvements convectifs entrent en jeu, il est nécessaire d'ajouter un terme d'advection thermique aux équations de la chaleur vues plus haut [16].

Nous n'irons pas plus en avant dans la description de ces méthodes car elles sont essentiellement utilisées dans le cas d'analyse numérique type différences finies (ou FDM pour finite difference method) éléments finis (ou FEM pour finite element method). Or l'outil de calcul CFD que nous allons utiliser pour développer notre modèle de changement de phase se base sur une analyse numérique par volumes finis (ou encore FVM pour finite volume method). De plus, de telles méthodes sont conventionnellement employées dans l'étude de la fusion/solidification de matériaux de type corps purs, i.e, ayant un changement de phase caractérisé par une température fixe.

Pour une description plus précise des différentes méthodes présentées dans cette section, nous invitons le lecteur à se référer aux articles [25–51].

Nous allons maintenant voir le cas des méthodes à maillage fixe qui ont focalisé notre attention dans la construction de l'outil de calcul CFD présenté dans ce manuscrit.

### 1.1.2.2 Les méthodes à domaine unique

D'abord introduit par Crank en 1957 [52] puis revu par Murray et Landis en 1959 [53] et plus récemment par Verma et al. en 2004 [54], le principe des méthodes à domaine unique repose sur la discrétisation en temps et en espace du domaine dans lequel le front de fusion/solidification se déplace. Via des formules d'interpolation eulérienne, la zone de changement de phase est mise en équations afin d'en suivre le mouvement entre les noeuds du maillage.

Ces méthodes ont pour but de résoudre un unique système d'équations aux dérivées partielles (EDP) sur l'ensemble du domaine simulé. Ce système d'EDP peut être basé sur une approche multi-phases (modèle *two-fluid*), soumis à un certain nombre d'hypothèses d'équilibre ou de non équilibre, ou bien sur une approche mono-phase (modèle *one-fluid*) correspondant à un fluide homogène équivalent.

Concernant la position de l'interface, il n'est pas nécessaire dans ces méthodes de la suivre

explicitement (ni même implicitement) et aucune modification du maillage n'est requise. Autre avantage de ces méthodes, leur facilité d'implémentation. Nous verrons dans la suite quels sont les inconvénients intrinsèques à chacune des méthodes présentées dans cette section.

Nous verrons également que ces méthodes peuvent être divisées en deux grandes classes selon la formulation employée pour exprimer l'équation de conservation de l'énergie, à savoir :

- La formulation basée sur l'enthalpie ou *enthalpy-based formulation* ; cette formulation regroupe la méthode enthalpique, qui correspond à l'équation de conservation d'énergie classique, la méthode du terme source (*source based method*) dans laquelle on développe l'équation de conservation d'énergie de telle sorte à y faire apparaître la chaleur latente au travers d'un terme source et enfin la méthode enthalpique totale, où l'on réalise une transformation afin d'exprimer la loi de Fourier en fonction de l'enthalpie ;
- La formulation basée sur la température ou *temperature-based formulation* ; cette dernière regroupe quand à elle la méthode de capacité thermique apparente (*apparent heat capacity method*) ainsi que la méthode de capacité thermique spécifique (*specific heat capacity*).

Le problème de Stefan fait historiquement référence à un problème de changement de phase purement conductif. C'est pour cela que dans cette section nous présenterons d'abord une collection des principales formulations dédiées à ce cas de figure puis nous verrons alors comment ces modèles ont été adaptés aux problématiques d'un changement de phase dominé par des mouvements convectifs.

### 1.1.2.2.a Problème de Stefan *classique* en conduction pure

Dans un premier temps nous allons nous intéresser aux méthodes basées sur la formulation enthalpique.

Première d'entre elles, la méthode enthalpique [55, 56] correspondant à l'équation de conservation de l'énergie dans sa forme classique (1.9) :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (k \nabla T) \quad (1.9)$$

Où  $h$ , l'enthalpie massique totale est la somme des enthalpies massiques sensible et latente.

L'utilisation de la formulation enthalpique simplifie grandement le système d'équation aux dérivées partielles étant donnée qu'une seule équation est nécessaire pour caractériser le transfert de chaleur dans les phases solide et liquide (au lieu de (1.6) et (1.7)) ainsi qu'à l'interface ((1.8)). C'est pour cela qu'il n'est pas nécessaire de connaître explicitement la position de l'interface et que l'on peut ainsi employer un maillage fixe. Autre avantage à l'utilisation de ce type de formulation, la possibilité de résoudre le système d'équations aux dérivées partielles par des méthodes numériques conventionnelles. Cependant une attention particulière se doit d'être apportée au schéma numérique de résolution du fait de la structure complexe de l'interface de changement de phase [57, 58].

Cette formulation apparait comme étant robuste et semble ne présenter aucun problème du point de vue de la conservation de l'énergie comme on peut le constater dans les travaux [59–64].

Enfin la formulation enthalpique permet de modéliser aussi bien un changement de phase ayant lieu à une température fixe que sur une plage de températures.

Il est tout de même à noter que la valeur de la température nodale peut osciller dans le temps [29, 59, 60, 64–68]. Voller [64] a analysé les performances d’un schéma explicite d’intégration en temps (méthode eulérienne) appliqué à un problème de solidification mono-dimensionnel pour différents nombres de Stefan (1.10) et donc différentes valeurs de chaleur latente.

$$Ste = \frac{c(T_F - T)}{L_F} \quad (1.10)$$

Avec  $T$  qui représente ici la température du système.

Le constat fait à partir de cette étude est que plus le nombre de Stefan est petit (et donc plus la chaleur latente est importante) plus la valeur de la température en un point du maillage aura tendance à osciller. Plus précisément, ces oscillations se caractérisent par des plateaux suivis d’une forte baisse de la valeur de la température. Ce comportement a été observé par Bell [69] et il apparaît être une caractéristique des méthodes enthalpiques. Il est cependant intéressant de remarquer que ces oscillations ne s’amplifient pas au cours du temps. À noter ici que des travaux ont été menés par Voller et Cross, entre autres, [59, 60, 65, 70, 71], pour appliquer un schéma correctif à la méthode enthalpique.

Ayant constaté ce problème d’oscillations de la température, Voller et al [72] et Brent et al [73] ont développé une formulation alternative de l’équation de conservation (1.9). Formalisée par Cao et Faghri [74], cette dernière est connue dans la littérature sous le nom de *source-based method* ou encore *latent heat source term*. Cette méthode modifie l’équation de conservation de l’énergie comme suit (1.11) :

$$\frac{\partial \rho c T}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} \cdot T) + S \quad (1.11)$$

Avec  $S$  un terme source dépendant de la température. Toujours dans le cas d’un changement de phase purement conductif, l’expression de  $S$  est la suivante (1.12) :

$$S = \rho L_F \frac{\partial Y}{\partial t} \quad (1.12)$$

Ici la transformation employée nécessite d’explicitier la forme de la fonction  $Y_l(T)$  qui représente la fraction massique liquide. De nombreux auteurs ont utilisé les études réalisées sur la solidification dendritique et ainsi proposé les formulations basées sur les modèles de Scheil [75, pp. 160-163], Brody-Fleming [76] ou encore Clyne-Kurz [77] :

$$Y_l = \left( \frac{T_{F,pur} - T}{T_{F,pur} - T_{liq}} \right)^{-1/(1-a)} \quad (1.13)$$

$$Y_l = \frac{1}{1 - 2X_b a} \left( \frac{T_{F,pur} - T}{T_{F,pur} - T_{liq}} \right)^{-(1-2X_b a)/(1-a)} \quad (1.14)$$

$$Y_l = \frac{1}{1 - 2X_c a} \left( \frac{T_{F,pur} - T}{T_{F,pur} - T_{liq}} \right)^{-(1-2X_c a)/(1-a)} \quad (1.15)$$

Avec  $T_{liq}$  la température à laquelle le MCP est totalement fondu.

Avec  $a = \frac{c_l}{c_s}$  le coefficient de partition, et  $X_b$  et  $X_c$  respectivement les paramètres de diffusion arrière et de diffusion arrière modifié.

D'autres exemples sont disponibles dans [62, 67, 72, 73, 78–81].

En faisant le choix d'une fonction continue pour  $Y_l$ , on peut alors substituer directement cette dernière dans l'expression de l'enthalpie. C'est pour cela que des auteurs ont proposé une expression sous la forme d'une sigmoïde ou encore d'une fonction erreur, comme par exemple [82] :

$$Y_l = \frac{1}{2} \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( 4 \frac{T - \frac{T_{liq} + T_{sol}}{2}}{T_{liq} - T_{sol}} \right) \right] \quad (1.16)$$

Avec  $T_{sol}$  la température à laquelle la fusion débute.

Ce type de formulations parait tout à fait intéressant mais n'a aucune justification théorique. Par ailleurs, il convient alors de bien caler les valeurs des paramètres intervenant dans l'équation correspondante, ces derniers étant liés au cas mis à l'étude. Malgré tout, elles ont démontré leur efficacité dans la résolution de problème de changement de phase et ont une justification pratique [82].

D'autres auteurs ont proposé une corrélation permettant la variation de 0 à 1 entre  $T_{sol}$  et  $T_{liq}$ . Ainsi, [72] suppose une variation linéaire :

$$Y_l = \begin{cases} 0 & \text{si } T \leq T_{sol} \\ \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} & \text{si } T_{sol} \leq T \leq T_{liq} \\ 1 & \text{si } T > T_{liq} \end{cases} \quad (1.17)$$

La méthode du terme source a démontré son efficacité [74] dans le cas d'une intégration implicite en temps pour des problèmes de changement de phase variés [72] aussi bien dans

le cas d'une transition liquide/solide isotherme [35, 38, 66, 67, 72, 73, 78–81, 83–98] que pour une transition étalée sur une plage de températures [48, 50, 67, 72, 73, 78–83, 99–115]. Cependant les performances de ce type de modèles ont un coup numérique non négligeable dû notamment au nombre d'itérations nécessaires au calcul de la fraction massique liquide. Des efforts ont été réalisés afin d'améliorer l'algorithme de résolution [62, 73, 79–81, 84, 85, 106].

Nous allons maintenant nous intéresser à la classe de méthodes basée sur la formulation en température.

Parmi cette formulation, les méthodes les plus usitées impliquent la reformulation de l'équation de conservation de l'énergie afin d'y faire apparaître la capacité thermique apparente ou spécifique (*apparent heat capacity method* ou *specific heat capacity method* dans la littérature) (1.18) :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial h}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = C^A \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.18)$$

$C^A$  étant la capacité thermique apparente.

Dans le cas d'un changement de phase non isotherme (qui intervient donc sur une plage de température), l'expression de  $C^A$  est la suivante [62] :

$$C^A = \frac{\int_{T_{sol}}^{T_{liq}} (c(T) + L_F(T)) dT}{T_{liq} - T_{sol}} \quad (1.19)$$

En revanche, dans le cas où la transition de phase est isotherme, pour éviter les difficultés mathématiques que génèrent ce genre de situation, on est obligé d'étaler la transition sur une plage réduite autour du point de fusion [116] :

$$C^A = \frac{L_F}{2(T_{liq} - T_{sol})} + \frac{c_s + c_l}{2} \quad (1.20)$$

On reformule alors l'équation de conservation d'énergie (1.9) pour obtenir l'équation suivante (1.21) comme proposé par [117]<sup>1</sup> et [120] :

$$\rho C^A \frac{\partial T}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} \cdot T) \quad (1.21)$$

Avec ce type d'approche, la définition du terme  $C^A$  est essentielle puisque c'est au travers de ce paramètre que l'interface de changement de phase est prise en compte dans le modèle. La discrétisation de ce terme et son approximation revêt donc un caractère essentiel. On citera ici le travail de Pham [121] et de Comini et al [122] qui ont tous deux proposé un schéma de résolution correctif ainsi que les études [61, 123–131] menées par différents auteurs. Le plus gros avantage apporté par cette reformulation est la possibilité de résoudre le problème de Stefan à l'aide de code standard de transfert de chaleur du fait de la forme de l'équation (1.21) proche de l'équation de la conduction de la chaleur de Fourier. Cependant ce type de formulation permet uniquement la résolution de problèmes

---

1. basé sur les idées développées dans [118, 119]

de fusion/solidification étalés sur un intervalle de températures. De plus si cet intervalle est trop petit cette méthode devient inefficace. Autre inconvénient de cette méthode, sa difficulté à prédire le champ de températures ou encore sa tendance à générer des oscillations [74, 116, 123, 125, 129, 132, 133].

Bien que très semblables, il est plus rigoureux ici de faire une distinction entre les méthodes à capacités thermiques apparentes et effectives. Dans le premier cas, on cherche à définir une fonction nous permettant d'étendre le concept de la chaleur spécifique (qui correspond à la dérivée de l'enthalpie par rapport à la température) à notre problème de changement de phase. Dans le second cas, l'idée est d'intégrer la capacité thermique apparente, sur un volume de contrôle, pour obtenir la capacité effective de cet élément. Ceci est généralement réalisé en se basant sur des moyennes spatiales ou temporelles et repose principalement sur le profil de températures entre les nœuds. Citons par exemples les expressions suivantes pour le capacité spécifique [123, 124, 126, 134, 135] :

$$C^E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\vec{\nabla}h \cdot \vec{e}_i}{\vec{\nabla}T \cdot \vec{e}_i} \quad (1.22)$$

$$C^E = \frac{\sum_{i=1}^N \vec{\nabla}h \cdot \vec{\nabla}T}{\sum_{i=1}^N (\vec{\nabla}T)^2} \quad (1.23)$$

$$C^E = \frac{\vec{\nabla}h \cdot \vec{\nabla}T}{\vec{\nabla}T \cdot \vec{\nabla}T} \quad (1.24)$$

$$C^E = \frac{h^n - h^{n-1}}{T^n - T^{n-1}} \quad (1.25)$$

$$C^E = \sqrt{\frac{\vec{\nabla}h \cdot \vec{\nabla}h}{\vec{\nabla}T \cdot \vec{\nabla}T}} \quad (1.26)$$

Bien que cette dernière technique améliore la précision et l'efficacité de la méthode à capacité apparente, cette dernière n'en reste pas moins difficile d'implémentation et coûteuse numériquement.

Les trois formulations de l'équation de conservation de l'énergie que nous venons de voir sont les principales citées dans la littérature concernant les méthodes à maillage fixe pour la prédiction des phénomènes de fusion/solidification en l'absence de convection. Nous allons maintenant voir quelles sont les équations qui gouvernent un changement de phase dominé par des mouvements convectifs.

### 1.1.2.2.b Problème de Stefan avec prise en compte de la convection thermique

Bien que très largement étudié d'un point de vue purement conductif dans la littérature [136–138], plusieurs auteurs ont démontré l'importance que revêt la prise en compte de la convection dans la modélisation du changement de phase solide/liquide. Les premiers

sont Sparrow et al. qui déjà en 1977 [27] concluait que la convection thermique ne pouvait pas être négligée dans l'étude des problèmes de changement de phase. Depuis plusieurs travaux sont venus appuyer ce constat. La publication de Velraj [139] allant même plus loin en expliquant que la convection thermique naturelle était le mode de transfert dominant le processus de fusion augmentant le taux de transfert en comparaison du processus de solidification.

Notre modèle se voulant le plus complet possible, la prise en compte des effets de la convection thermique est donc indispensable.

Ce type de problèmes est essentiellement non linéaire du fait de l'ajout du terme convectif dans les équations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, de la variation des propriétés du MCP en fonction de la température et bien entendu de l'existence d'une interface de changement de phase qui contrairement au cas purement conducteur ne présente pas un profil linéaire.

Tout d'abord, la prise en compte de la convection thermique entraîne l'ajout d'un terme à l'équation de conservation de l'énergie. Donc si l'on reprend les différentes méthodes vues dans la section consacrée aux problèmes en conduction pure on obtient les équations suivantes :

– Formulation enthalpique - Méthode enthalpique ; l'équation (1.9) devient :

$$\rho \left( \frac{\partial h}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} h \right) = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) \quad (1.27)$$

– Formulation enthalpique - *Source-based method* ; l'équation (1.11) devient<sup>2</sup> :

$$\rho c \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T \right) = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) + S \quad (1.28)$$

Et le terme source  $S$  (1.12) s'écrit maintenant :

$$S = -\rho L_F \left( \frac{\partial Y_l}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} Y_l \right) \quad (1.29)$$

– Formulation en température - *Apparent heat capacity method* ; l'équation (1.21) devient :

$$\rho C^A \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T \right) = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) \quad (1.30)$$

Outre ces modèles déjà présentés dans la section consacrée au problème de Stefan purement conducteur, des méthodes propres à la prise en compte de la convection thermique ont été développées. Citons ici celles à frontière fixe [140] ou encore celle des éléments finis non-structurés [141]. Il est une méthode plus connue que les autres que nous allons prendre le temps de détailler ici. Il s'agit de l'approche développée par Voller et al. [72, 73] connue dans la littérature sous le nom de *enthalpy-porosity method*. On retrouve cette méthode implémentée dans la plupart des codes de CFD commerciaux (par exemple FLUENT).

---

2. Malgré le fait que l'équation d'énergie soit exprimée en température, cette méthode est classée dans la littérature parmi les formulations enthalpiques.

Dans cette méthode l'équation de conservation de l'énergie se formule comme suit (1.31) pour un fluide Newtonien et incompressible :

$$\rho \left( \frac{\partial h_s}{\partial t} \right) + \rho V \cdot \nabla (h_s) - \nabla (\alpha \nabla \cdot h_s) + S = 0 \quad (1.31)$$

Avec  $h_s$  l'enthalpie sensible :  $h_s = cT$ .

Et  $\alpha$  la diffusivité thermique :  $\alpha = \frac{k}{\rho c}$ .

Une attention particulière doit être apportée à la définition du terme source  $S$  et c'est en cela que réside la plus grande contribution de Voller et al. Partant de l'expression classique de l'enthalpie totale  $h$  (1.32) :

$$h = h_s + L_F \quad (1.32)$$

La chaleur latente  $L_F$  étant une fonction de la température  $F(T)$ , les auteurs donnent l'expression de cette dernière dans le cas d'un corps pur (1.33) :

$$F(T) = \begin{cases} L_F & \text{si } T > T_F \\ 0 & \text{si } T < T_F \end{cases} \quad (1.33)$$

Et aussi dans le cas d'un mélange binaire (1.34) :

$$F(T) = \begin{cases} L_F & \text{si } T > T_{liq} \\ L_F(1 - Y_s) & \text{si } T_{sol} < T < T_{liq} \\ 0 & \text{si } T < T_{sol} \end{cases} \quad (1.34)$$

Avec  $Y_s$  la fraction massique solide,  $T_{sol}$  et  $T_{liq}$  les températures de solidus et liquidus respectivement. On peut alors donner l'expression du terme source  $S$  dans l'équation (1.31) :

$$S = \rho \frac{\partial F(T)}{\partial t} \quad (1.35)$$

Pour une résolution efficace, il est nécessaire qu'à chaque itération de chaque pas de temps, la chaleur latente de chaque cellule du maillage soit calculée en fonction de la valeur de la température prédite par l'équation de conservation d'énergie. Physiquement cela permet d'éviter des écarts de valeurs entre la température prédite par l'équation de conservation et celle dictée par les considérations liées au changement de phase. En résumé le schéma numérique de résolution de l'équation de conservation d'énergie joue un rôle essentiel dans ce type de méthodes.

La résolution des équations que nous venons de présenter soulève deux difficultés :

- Le traitement de l'évolution de la chaleur latente ;
- L'annulation progressive de la vitesse dans l'équation de quantité de mouvement lorsque l'on passe de la phase liquide à la phase solide. Nous reviendrons plus en détail sur ce point dans la section consacrée au système complet d'équations aux dérivées partielles résolu dans notre solveur.

En complément des diverses approches numériques vues jusqu'ici, le tableau A.1 présente une compilation, non exhaustive, des différentes méthodes employées dans la littérature pour la modélisation et la simulation des problèmes de fusion/solidification.

Les méthodes mathématiques compilées dans cette section offrent une vue d'ensemble complète sur l'état de l'art de la discipline au moment de la construction de notre solveur. Chaque méthode présentant ses avantages et ses inconvénients intrinsèques, le choix d'implémenter telle ou telle formulation dans notre programme s'est fait vis à vis des connaissances et des compétences des acteurs du projet mais aussi en ayant pour volonté de s'éloigner des méthodes déjà implémentées dans les codes de CFD commerciaux. Nous verrons dans la section consacrée à l'outil de CFD OpenFOAM que ce dernier offre une grande liberté dans l'implémentation de nouveaux modèles et que les futurs utilisateurs pourront, en suivant la démarche réalisée dans ce manuscrit, y ajouter les approches mathématiques de changement de phase qu'ils souhaitent.

Maintenant que la problématique a été posée d'un point de vue mathématique, nous allons voir qu'elles sont les méthodes numériques couramment employées dans cette situation.

### 1.1.3 Résolution numérique des problèmes de changement de phase

Les premières approches à avoir été utilisées dans la résolution de problème de changement de phase sont les techniques des éléments finis et des différences finies. Les travaux précurseurs, cités dans le paragraphe traitant du problème de Stefan d'un point de vue historique, ont tous été menés à partir des différences finies. Ces dernières sont d'ailleurs employées par de nombreux auteurs [29, 47, 56, 59, 60, 66, 69, 70, 121, 131, 142–153]. Bien que largement employées, les travaux de Voller [59] et Bell [69] ont observé des oscillations sur la position du front de fusion/solidification ainsi que sur la valeur de la température. Ceci est dû à un mauvais équilibre thermique lorsque l'interface de changement de phase se trouve entre deux mailles de la grille d'espace.

Depuis leur introduction, les méthodes aux éléments finis [154–162] et aux volumes finis [65, 78, 81, 159, 163–167], sont largement préférées par la communauté scientifique notamment car ces techniques permettent la prise en compte des mécanismes thermiques couplés associés à des conditions aux limites complexes. Front de fusion [127, 168] et évolution de températures sont ainsi mieux évalués [122, 169]. Ces approches sont bien souvent employées en combinaison avec la formulation enthalpique (1.27) (1.28) des équations de conservation d'énergie ou bien celle à capacité apparente (1.18). Bonacina et al. [170] ont employé les méthodes des volumes finis pour traiter un problème de changement de phase.

La discrétisation numérique de l'équation (1.9) par une méthode d'intégration en temps explicite prend la forme générale de l'équation (1.36) suivante (s'adapte en fonction de l'approche utilisée pour exprimer l'équation de conservation de l'énergie) :

$$\rho a_p^0 h_p = \rho a_p^0 h_p^0 + \sum n b a_{nb} T_{nb}^0 - a_p T_p^0 \quad (1.36)$$

Tandis qu'avec une méthode d'intégration en temps implicite la même équation prendra

la forme de l'équation (1.37) suivante :

$$\rho a_p^0 h_p = \rho a_p^0 h_p^0 + \sum n b a_{nb} T_n b - a_p T_p \quad (1.37)$$

Après sélection par l'utilisateur d'un pas de temps et d'espace appropriés et le traitement des conditions aux limites, la solution numérique est obtenue très simplement. À chaque pas de temps, l'équation (1.36) est résolue explicitement pour obtenir la valeur de l'enthalpie nodale  $h_p$ . On peut alors évaluer la température nodale  $T_p$  et la valeur de la fraction massique liquide nodale  $Y_p$ .

Les remarques suivantes, aussi bien valables dans le cas d'un schéma d'intégration en temps explicite qu'implicite, peuvent être faites :

- Lorsque le changement de phase se produit dans un volume de contrôle, la température de ce dernier reste égale à la température de fusion (dans le cas d'un MCP type corps pur ; nous verrons plus tard ce qu'il advient dans un cas plus général) ;
- Bien que la fraction massique liquide  $Y$  soit une fonction par intervalle, sa valeur varie en 0 et 1 au nœud où se produit le changement de phase.

#### 1.1.4 Les méthodes de résolution combinées (*hybrides*)

Les deux méthodes, à maillage fixe et variable, que nous venons de présenter forment la majeure partie des méthodes de résolution numérique utilisées par la communauté scientifique du domaine qui nous concerne à l'heure actuelle. Le choix d'employer l'une plutôt que l'autre est essentiellement dicté par des contraintes liées à la ressource matériel disponible. En effet, bien qu'il soit admis que les méthodes à maillage variable soient les plus précises, elles nécessitent cependant un coût numérique important (temps de calcul). Dès lors un certain nombre de méthodes ont vu le jour, tâchant d'allier les approches à maillage fixe et variable dans ce que chacune a de meilleur. Parmi ces méthodes *hybrides* on trouve :

- *Deforming Enthalpy Method* ; Voller et Peng [171], partant du constat qu'aucune raison, aussi bien numérique que mathématique, impose la discrétisation de l'équation (1.9) sur un maillage fixe, ont proposé une méthode d'approximation de la position de l'interface (*approximate front tracking scheme*) qui ne nécessite de connaître la position de l'interface que dans des volumes spécifiés (contrairement aux méthodes à maillages variables classiques qui elles traquent la position de l'interface sur des noeuds du maillage). On diminue ainsi le coût numérique d'une méthode à maillage variable classique tout en gardant sa précision.
- *Node Jumping* ; Applicable seulement dans le cas d'un problème à une dimension, cette approche combine un maillage fixe (pas d'espace constant) à un pas de temps variable afin qu'entre chaque pas de temps consécutif l'interface solide/liquide se déplace d'un nœud à l'autre. Les premiers travaux concernant cette approche sont ceux de Gallie [14]. Puis Voller [72, 172] a appliqué cette méthode dans ses travaux sur la formulation enthalpique du problème de Stefan général ainsi que dans le cas d'une solidification binaire.

- *Local Tracking*; Le but est ici de localiser l'utilisation d'un maillage variable à la seule zone contenant le front de fusion/solidification. Des travaux ont été menés dans le cas de problèmes mono et multi-dimensionnel [60, 173].

Bien qu'existantes, ces méthodes restent cependant marginales par rapport aux approches à maillage fixe et variable. Elles le sont d'autant plus lorsque l'on considère le cas général des problèmes de changement de phase et non plus le cas particulier d'un échange thermique uniquement conductif mono ou bi-dimensionnel.

Maintenant que nous avons vu les différentes méthodes mathématiques et numériques disponibles dans la littérature, qu'en est-il de leur utilisation dans la prédiction de performances des installations de stockages de l'énergie. C'est ce que nous allons voir dans la section suivante.

## 1.2 Modélisation et simulation numérique de systèmes de stockage thermique par chaleur latente

Les diverses approches numériques vues jusqu'ici ont permis à la communauté scientifique de dépasser les contraintes liées à une analyse purement expérimentale (taille du banc d'essai, difficultés liées à l'observation de certains phénomènes physiques. . .) dans l'étude de systèmes impliquant le changement de phase solide/liquide de matériaux. Le spectre d'utilisation des MCP étant large, les études paramétriques menées dans la littérature sont dès lors tout aussi variées, en lien étroit avec le système dans lequel vient s'intégrer le MCP. Cœur de nos travaux, les systèmes de stockages thermiques par chaleur latente font l'objet de l'attention de nombreux auteurs et ce particulièrement ces dernières années du fait du regain d'intérêt porté aux systèmes de production d'électricité solaires.

Al-Abidi et al [174] ont mené une étude numérique portant sur la solidification d'un MCP (*RT82* commercialisé par Rubitherm) dans un échangeur de type triplex (trois tubes concentriques contenant dans l'ordre le fluide caloporteur, le MCP et de nouveau le fluide caloporteur) sans et avec différentes configurations d'ailettes plates. L'influence des paramètres des ailettes que sont leurs longueurs, leurs épaisseurs, leur nombre sur le processus de solidification a été analysée. Les conclusions observées par les auteurs sont que ces paramètres dimensionnels jouent un rôle significatif en influençant le temps nécessaire à la solidification totale du volume de MCP contenu dans le système. Il est d'ailleurs précisé que la longueur des ailettes est la grandeur influençant le plus le temps de solidification. Dans le cadre de ce système de stockage thermique, une configuration a alors été jugée plus performante que les autres donnant ainsi une idée de design préliminaire de l'échangeur et prouvant l'intérêt d'une analyse numérique en amont de la phase de construction. Cette étude a d'ailleurs été suivie par la construction d'un banc d'essai [175]. Dans le même ordre d'idée, Ismail et al. [176, 177] ont mené une analyse identique dans le cadre d'un tube avec des ailettes circulaires, plongé dans un MCP. Ils en ont également déduit que les caractéristiques dimensionnelles des ailettes avaient un rôle important dans le processus de solidification. De plus les auteurs ont établi des équations corrélant les différents paramètres étudiés au temps de solidification. Toujours dans l'op-

tique de l'optimisation des performances d'un stockage thermique, Lacroix [178] a souligné dans son étude l'interdépendance qui existe entre le choix du MCP et la configuration de l'échangeur, préconisant que le choix de l'un et l'autre se fasse de manière combinée. Les paramètres de contrôle commande du système tels que la température d'injection du fluide caloporteur ainsi que son débit massique sont aussi à prendre en compte dans l'optimisation du fonctionnement du stockage thermique. Autre design de stockage, même conclusions faites par Esen et al [179]. Dans cette étude, le système de stockage consiste en un tube lisse immergé dans un réservoir cylindrique. Deux modes de fonctionnement sont analysés. Dans le premier, le MCP est contenu dans le tube tandis que le fluide de transfert de chaleur circule parallèlement à ce dernier dans le réservoir. Dans le second mode, c'est l'inverse. Le fluide caloporteur circule dans le tube et le MCP est contenu dans le réservoir. Esen fait alors les mêmes observations que Lacroix sur l'influence des propriétés thermophysiques du matériau sur le temps nécessaire à la fusion complète du volume de MCP simulé. S'attendant à l'analyse des paramètres de fonctionnement, Longeon et al [180], dans le cadre d'un tube lisse (dans lequel circule le fluide caloporteur) immergé dans un MCP, a observé l'influence en charge et en décharge de l'injection du fluide caloporteur par le haut ou par le bas. Il en conclut qu'une injection par le haut est favorable en phase de charge. Tandis qu'en phase de décharge l'injection devra se faire par le bas. L'étude menée par Ismail [181] sur un tube immergé (de rayon  $r_i$ ) dans un MCP, lui-même contenu dans un réservoir cylindrique (de rayon  $r_e$ ), qui va subir un processus de solidification, démontre l'influence du rapport  $R = \frac{r_i}{r_e}$  sur l'évolution de la fraction massique solide  $Y_s$  et sur l'efficacité du système  $\epsilon$  (rapport du flux thermique sur le flux thermique maximal). En effet lorsque  $R$  augmente,  $Y_s$  et  $\epsilon$  diminuent. Il constate également que le taux de transfert thermique va augmenter avec la valeur de  $R$  jusqu'à atteindre un maximum pour  $R = 4$ . Ensuite, sa valeur va rapidement chuter. Autre géométrie d'échangeur classiquement rencontrée dans le cadre des solutions de stockage thermique appliquées aux centrales solaires, la technologie dite *shell and tubes* a fait l'objet de nombreuses études dont les travaux de Nithyanandam et Pitchumani [182] et de Morisson et al [183]. Ces derniers ont livré un travail très complet, développant un modèle numérique simplifié pour analyser rapidement l'influence des paramètres dimensionnels de ce type d'installations au travers de l'optimisation de la capacité de stockage maximale et la puissance moyenne du système. Wang et al [184] dans leur travail sur cette même technologie, ont étudié l'influence de la différence de températures entre le fluide caloporteur et le MCP et du débit masse injecté sur le processus de charge et de décharge. Ils en ont déduit un schéma d'évolution de ces deux processus (rapide au début puis de plus en plus lent). Les analyses de Xiao et Zhang [185] insistent sur l'influence de la température d'injection du fluide caloporteur, du débit massique et du type de MCP sur la performance d'un échangeur type tubes calandre.

Archibold et al [186] a effectué une analyse numérique de la fusion d'un corps pur, le nitrate de sodium, encapsulé dans un réservoir sphérique. Dans cette étude, les auteurs se sont penchés sur l'influence que peut avoir le matériau constituant le réservoir ainsi que sur la température initiale du système sur les performances du système de stockage. Plus intéressant encore, l'adimensionnalisation de la problématique de changement de phase et l'observation de l'influence des nombres de Prandtl, Stefan et Grashof sur la dynamique de fusion ont permis de conclure que plus les nombres de Grashof et de Ste-

fan étaient grands, plus le temps de fusion (comprendre le temps nécessaire à la fusion totale du MCP contenu dans le réservoir) était court. De plus il a été démontré que la position de la cellule convective apparaissant dans le réservoir était en partie dictée par le nombre de Grashof. L'adimensionnalisation de cette étude permet d'extrapoler ces résultats à d'autres systèmes que celui étudié dans cet article. Autre étude menée sur un nombre adimensionnel, celle de Ismail et al [181]. Ici c'est le nombre de Biot qui est pris en considération. L'auteur conclut que l'augmentation du nombre de Biot augmente la valeur de la fraction massique solide (à un instant donné) jusqu'à la valeur plafond de 10 au-delà de laquelle l'augmentation de ce nombre n'a plus d'effet.

Toujours concernant les systèmes de stockage thermique par chaleur latente appliqués aux centrales solaires, Elmozughi et al [187], dans leur étude d'un MCP encapsulé dans un réservoir à géométrie sphérique et cylindrique, se sont intéressés à l'influence de la présence d'air dans le réservoir. Les auteurs en ont conclu que cet air diminuait le transfert thermique avec la partie de MCP avec lequel il est en contact et donc, modifiait la forme de l'interface solide/liquide qui est directement liée au flux thermique reçu par le matériau.

Autre domaine dans lequel les modèles numériques de changement de phase s'avèrent particulièrement utiles, l'étude des techniques d'augmentation de la conductivité des MCP. En effet il est depuis longtemps connu qu'une des caractéristiques limitantes dans l'utilisation de matériaux à changement de phase dans un processus de stockage d'énergie, est leur faible conductivité. Sans entrer dans le détail, les techniques d'augmentation de la conductivité des MCP n'étant pas notre sujet premier, on citera tout de même les travaux de Morisson et al [183] qui ont pu démontrer, via l'application de la méthode numérique mise en place par Crank [188], les avantages d'un matériau composite contenant de la mousse métallique comme MCP pour une solution de stockage thermique appliquée aux centrales solaires thermodynamiques.

On a donc pu voir que, dans l'optique d'une approche système des procédés de stockage de l'énergie, dans lesquels sont impliqués des matériaux à changement de phase, des études avaient été menées concernant l'amélioration des performances de l'échangeur de chaleur. L'augmentation des transferts thermiques étant l'un des principaux leviers technologiques auxquels les ingénieurs et chercheurs font face, nombre de travaux traitent de la mise en place d'ailettes et de l'influence que peut avoir la variation de leur géométrie (forme, longueur, épaisseur et nombre) sur les performances du système. Le but étant d'arriver, au travers l'utilisation des méthodes numériques présentées dans la section précédente, à un design préliminaire de la solution de stockage de l'énergie la plus pertinente, en accord avec la finalité du processus bien évidemment.

Cependant une question s'est peu ou pas vue posée concernant le fonctionnement optimal de tels systèmes. On a pu voir précédemment que certains auteurs avaient mis en évidence l'importance des propriétés thermophysiques du MCP sur les performances de la solution de stockage. Ces observations ont été faites en comparant les résultats obtenus pour différents matériaux dont les propriétés intrinsèques étaient considérées comme constantes vis à vis de la température mais aussi dans le temps. Or, l'étude de ces matériaux a révélé que les cycles de sollicitations thermiques qu'ils subissaient pouvaient entraîner une dégradation de leur caractéristiques thermophysiques [189] (par exemple un phénomène

de corrosion entre le MCP et le matériau constituant la paroi de l'échangeur peut altérer les propriétés de ce MCP). La question que nous nous sommes alors posée était d'évaluer dans quelle mesure l'altération du MCP modifiait les performances du stockage. On allie ainsi une réflexion matériau à une réflexion système. Le but étant toujours de prédire au plus juste, i.e, au plus réaliste, les performances d'une solution de stockage. Ce travail est présenté dans le chapitre concernant l'analyse numérique de l'influence de la fonction enthalpique sur les processus de charge et de décharge.

# Chapitre 2

## Modélisation du changement de phase solide/liquide

### 2.1 Avant-propos

Dans ce chapitre, nous allons voir au travers de quels systèmes d'équations aux dérivées partielles nous modélisons le changement de phase solide/liquide en fusion et en solidification. Pour ce faire, la classe des méthodes de résolution eulérienne sur grille fixe (*Fixed Grid Method*) a été retenue car plus facilement intégrable dans le programme de CFD OpenFOAM dont nous parlerons suite à ce chapitre. Mais avant d'entrer dans le vif du sujet, rappelons les différentes hypothèses qui sont faites ici :

- On utilise un modèle de *mushy region* pour représenter le changement de phase que ce dernier soit isotherme ou étalé sur une plage de températures ; Si l'on considère un changement de phase, trois zones distinctes sont alors présentes : une région totalement solide, une totalement liquide et enfin une constituée de liquide dispersé parmi des dendrites de solide que l'on appelle *mushy region* ;
- La convection thermique est gouvernée par les équations de Navier-Stokes associées à l'approximation de Boussinesq pour un écoulement laminaire et incompressible ;
- On néglige la variation de la masse volumique due au changement de phase ;
- Les phénomènes d'écoulement dans la *mushy region* sont pris en compte au travers du terme source de type Darcy (*Darcy source term method*) pour un milieu poreux.

Ainsi que les problématiques que soulèvent ce genre de modélisation :

- Le suivi de la position de l'interface de changement de phase solide/liquide ;
- L'annulation progressive de la vitesse dans l'équation de quantité de mouvement lorsque l'on passe de la phase liquide à la phase solide.

Notons enfin dans cet avant-propos que la chaleur latente de fusion (respectivement de solidification)  $L_F$ , est l'une des propriétés thermodynamiques qui se trouvent au centre de la résolution de ce type de problèmes. Pour rappel, il s'agit de l'énergie absorbée sous forme de chaleur par un corps lorsqu'il passe de l'état solide à l'état liquide à température et pression constante.

Regardons maintenant comment la prise en compte de ces différentes considérations se traduit d'un point de vue mathématique.

## 2.2 Équations caractéristiques

La stratégie adoptée ici s'appuie donc sur une résolution eulérienne (maillage fixe) des équations de conservation pour un fluide newtonien, dont les propriétés sont assumées comme constantes (bien que pouvant être différentes entre la phase solide et liquide), incompressible, en présence d'un changement de phase dominé par des mouvements convectifs (*convection-dominated phase change*). Concrètement, on repart donc de la formulation des équations de conservation qui se présentent sous la forme du système d'équations aux dérivées partielles.

### 2.2.1 Modélisation de la partie fluide

Les équations gouvernant les mouvements du fluide sont les suivantes :

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{V}) = 0 \quad (2.1)$$

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \otimes \vec{V} + P \vec{I}) = \vec{\nabla} \cdot (\mu \vec{\nabla} \vec{V}) - A \vec{V} + \rho \vec{F} \quad (2.2)$$

Avec (2.1) l'équation de continuité de la masse et (2.2) celle de la conservation de la quantité de mouvement.

Si l'on reprend l'équation (2.2) et qu'on la développe pour chaque composante de la vitesse (on suppose pour cette explication un écoulement bi-dimensionnel) on obtient les équations suivantes :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \otimes u) = \vec{\nabla} \cdot (\mu \vec{\nabla} u) - \frac{\partial P}{\partial x} + Au \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \otimes v) = \vec{\nabla} \cdot (\mu \vec{\nabla} v) - \frac{\partial P}{\partial y} + Av + S_b \quad (2.4)$$

On se place dans le cadre de l'approximation de Boussinesq, qui suppose que la masse volumique est constante hormis pour le terme de poussée hydrostatique dans l'équation de quantité de mouvement (2.4). Les effets de la convection naturelle sont alors pris en compte au travers du terme source de flottabilité  $S_b$  :

$$S_b = -\rho_{\text{ref,Bouss}} \vec{g} \beta (T - T_{\text{ref,Bouss}}) \quad (2.5)$$

Où  $\rho_{\text{ref,Bouss}}$  est la masse volumique évaluée à  $T_{\text{ref,Bouss}}$ . La valeur de  $T_{\text{ref,Bouss}}$  est prise égale à  $T_F$  et  $\beta$  le coefficient d'expansion thermique.

### 2.2.1.1 Prise en compte de l'annulation de la vitesse dans la phase solide

À l'interface solide/liquide, la vitesse s'annule progressivement lorsque l'on passe de la phase liquide à la phase solide. L'équation (2.2) s'appliquant dans les deux domaines, il est donc indispensable de prendre en compte ce comportement. Il existe plusieurs méthodes permettant de réaliser cette condition aux environs du front de fusion/solidification. Parmi celles-ci on trouve :

- Les techniques dites de **switch-off** [100, 190] ; l'une des méthodes les plus directes et simples pour modéliser l'évolution de la vitesse est de forcer la valeur de cette dernière à être égale à zéro dans la phase solide. La difficulté réside ici à identifier la phase solide de la phase liquide. On utilise dans le cadre de ces techniques la valeur de la contribution de la chaleur latente à l'enthalpie du système. Soit  $L_{F_p}$  la chaleur latente nodale d'un élément  $P$  du maillage. La condition pour annuler la vitesse dans cet élément est la suivante :

$$L_{F_p} \leq L_{F_0} \quad (2.6)$$

Avec  $0 < L_{F_0} < L_F$ . Donc logiquement lorsque  $L_{F_0} = L_F$  cela signifie que le changement de phase se termine dans l'élément  $P$  et que la vitesse doit être annulée (*switch-off*). Au contraire si  $L_{F_0} = 0$  dans ce cas la vitesse n'est pas modifiée tant que le changement de phase n'est pas complet dans l'élément. Une version moins brutale de cette technique appelée *ramped switch-off* a été développée [190, 191].

- La technique de **viscosité variable** [192] ; comme son nom le laisse entendre, le principe de base de cette technique est d'avoir une viscosité variable. Dans ses travaux sur cette technique, Gartling définit la viscosité comme étant fonction de la température de telle sorte qu'au niveau du changement de phase sa valeur augmente fortement quand la température diminue. Cela a pour effet de rendre négligeable la valeur de la vitesse prédite dans la phase solide. Cependant cette technique présente l'inconvénient de n'être applicable que dans le cas d'un changement de phase type *mushy region* du fait de la viscosité dépendante de la température. Une variante de cette technique consiste à exprimer la viscosité comme suit :

$$\mu = \mu_l + B(L_F - L_{F_p}) \quad (2.7)$$

Où  $\mu_l$  est la viscosité du liquide et  $B$  une constante prise à une valeur élevée. Lorsqu'un élément  $P$  du maillage est totalement liquide, i.e,  $L_{F_p} = L_F$ ,  $\mu = \mu_l$ . La valeur de  $\mu$  va ensuite augmenter en parallèle de la diminution de la valeur de  $L_{F_p}$  pour finalement atteindre la valeur maximale de  $\mu_l + BL_F$  lorsque  $L_{F_p} = 0$ .

- La technique du **terme source de Darcy**, appelée aussi *enthalpy porosity method* par les auteurs Voller et Prakash dans leur article [72, 73, 100, 193, 194] ; considérons un élément du maillage qui subit le changement de phase. Dans ce cas,  $L_{F_p}$  va prendre une valeur telle que  $0 < L_{F_p} < L_F$ . La valeur prise par  $L_{F_p}$  caractérise la quantité de solide dans cet élément. La technique du terme source de Darcy considère que cet élément est en fait un milieu poreux dans lequel la part liquide du MCP se déplace autour de

la partie solide<sup>1</sup>. Donc le front de fusion se comporte comme un milieu poreux, ce qui implique d'ajouter un terme source de type Darcy dans les équations de quantité de mouvement, pour lequel la porosité évolue avec la fraction solide de manière à s'annuler lorsque celle-ci est égale à un. Ainsi, on arrive à annuler progressivement la vitesse lorsqu'on passe de la phase liquide à la phase solide. En pratique, ce terme source est directement proportionnel à la vitesse et fait intervenir la fonction de porosité  $A$ , que nous détaillerons dans la suite.

Ma et Zhang [195] ont employé ces méthodes et ont confronté les résultats obtenus aux résultats expérimentaux de Okada [196]. Au vu de leurs analyses, les techniques de *ramped switch-off* et de Darcy semblent être les plus performantes pour un coup numérique raisonnable et c'est cette dernière que nous avons choisi de mettre en application ici.

La condition d'annulation de la vitesse dans la phase solide est réalisée au travers de la définition de la fonction de porosité  $A$  dans l'équation (2.2).

Dans la maille où se produit le changement de phase,  $A$  est définie de telle sorte que l'équation de conservation de la quantité de mouvement se rapproche de celle de Carman-Kozeny pour un écoulement dans un milieu poreux :

$$\vec{\nabla}P = -C \vec{V} \frac{(1 - Y_l)^2}{Y_l^3} \quad (2.8)$$

Avec  $C$  une constante déterminée expérimentalement pour rendre compte de la morphologie du poreux et  $\vec{V}$  la vitesse apparente. Une définition appropriée de  $A$ , proposée par Voller & Prakash [72] dans leur papier original, est la suivante :

$$A = -C \frac{(1 - Y_l)^2}{Y_l^3 + q} \quad (2.9)$$

$q$  une constante introduite pour éviter une erreur numérique de division par zéro.

Lorsque un élément est totalement liquide,  $A$  a pour valeur 0 et n'a donc aucune influence. L'élément subissant un changement de phase, la valeur de  $A$  supplante les composantes convective et diffusive ainsi que transitoire de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, forçant le comportement type loi de Carman-Kozeny. Enfin, lorsque l'élément est totalement solide,  $A$  prend sa plus grande valeur et rend négligeable tous les autres termes dans ((2.3)-(2.4)) et force toute prédiction de la vitesse à valoir 0.

Poirier [197] a démontré la validité de l'utilisation de l'équation de Carman-Kozeny prouvant ainsi que l'équation (2.9) a un sens physique. La constante  $C$  a une influence non négligeable sur la morphologie du front de fusion et donc la valeur qui lui est assignée doit faire l'objet d'une attention particulière. La part des effets convectif intervenant dans la *mushy region* est contrôlé par cette grandeur. Il est à noter ici une faiblesse concernant les connaissances scientifiques sur la détermination des constantes  $C$  et  $q$ .

---

1. Dans le cas d'un changement de phase non isotherme cette technique a une signification physique tandis que dans le cas contraire il s'agit d'un résultat de la discrétisation numérique.

Dans le cas d'un changement de phase isotherme, l'interface solide/liquide prend la forme d'un ligne parfaitement définie. Cependant, du point de vue de la discrétisation numérique, on associe à cette interface une épaisseur (qui n'a donc pas de sens physique réel) correspondant généralement à l'épaisseur d'un élément du maillage. Ainsi la méthode que nous avons vue dans le cadre d'un changement de phase non isotherme peut s'appliquer à cette situation. Une possible alternative à l'application de la loi de Carman-Kozeny est de définir  $A$  comme une fonction linéaire :

$$A = -C (1 - Y_l) \quad (2.10)$$

L'avantage de cette formulation par rapport à celle précédemment vue est qu'elle est moins coûteuse numériquement. Le rôle de  $A$  est exactement le même que pour un changement de phase type *mushy region* à savoir progressivement inhiber les autres termes dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans le volume de contrôle qui se solidifie et ainsi forcer la valeur de la vitesse à être égale à 0. Une analyse quantitative de l'influence de différentes techniques pour annuler la vitesse dans la phase solide a été menée par Voller et al [72]. Ils ont observé que l'utilisation d'une fonction par intervalles pour la définition de  $A$  avait pour effet de retarder la convergence et dans le pire des cas d'entraîner des oscillations pouvant conduire à faire diverger le calcul.

## 2.2.2 Modélisation de la partie thermique

Cette section est cruciale pour l'ensemble des études numériques qui seront menées dans ce manuscrit. Dans la suite nous allons présenter les deux formulations sur lesquelles nous nous sommes basés afin de construire notre solveur projet. Avant de voir en détails les équations qui gouvernent notre problème, rappelons que ces dernières doivent être comprises dans le sens distributif, en particulier pour le terme de Dirac associé à la dérivée temporelle de l'enthalpie ou ses variantes. Cette singularité est considérée pour la forme faible du système d'EDP, et sa norme est supposée être proportionnelle à la chaleur latente (pour une analyse plus poussée, se référer au livre de Crank [16]).

L'hypothèse classique est de considérer que la dissipation thermique par effets visqueux peut être négligée dans l'équation de la chaleur.

### 2.2.2.1 Formulation enthalpique ou *enthalpy method*

Initialement proposée par Eyres [55] et Rose [56], cette méthode consiste à résoudre numériquement l'équation de conservation de l'énergie sous la forme suivante :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \vec{\nabla} \cdot (h \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) \quad (2.11)$$

La résolution l'équation (2.11) implique d'explicitier la relation  $h(T)$  entre l'enthalpie et la température.

Dans le cas d'un corps pur, la fonction  $h(T)$  est discontinue comme on peut le voir sur la figure 2.1.

Mathématiquement, la formulation de l'enthalpie pour un corps pur est la suivante :

$$h = \begin{cases} h_{\text{ref}} + c_s (T - T_{\text{ref}}) & \text{si } T < T_F \\ h_{\text{ref}} + c_s (T_F - T_{\text{ref}}) + Y_l L_F & \text{si } T = T_F \\ h_{\text{ref}} + c_s (T_F - T_{\text{ref}}) + L_F + c_l (T - T_F) & \text{si } T > T_F \end{cases} \quad (2.12)$$

Cette méthode a été utilisée par de nombreux auteurs pour la simulation de problèmes de changement de phase dans le cas d'un corps pur [29, 56, 59, 60, 65, 66, 69, 70, 78, 121, 131, 142–147, 149–151, 153–156, 158, 160–162, 165–167].

Dans le cas où le MCP utilisé n'est pas un corps pur, la fusion se caractérise par une fusion progressive sur l'intervalle  $[T_{\text{sol}} - T_{\text{liq}}]$  associée à une chaleur latente  $L_F$ , éventuellement fonction de la température, autour du point de fusion  $T_F$ . Comme on peut le voir sur la figure 2.2, cela signifie que la fonction  $h(T)$  est continue.

Pour un mélange, la formulation de l'enthalpie a l'expression suivante :

$$h = \begin{cases} h_{\text{ref}} + c_s (T - T_{\text{ref}}) & \text{si } T < T_{\text{sol}} \\ h_{\text{ref}} + c_s (T_{\text{sol}} - T_{\text{ref}}) + Y_l L_F & \text{si } T_{\text{sol}} \leq T \leq T_{\text{liq}} \\ h_{\text{ref}} + c_s (T_{\text{sol}} - T_{\text{ref}}) + L_F + c_l (T - T_{\text{liq}}) & \text{si } T > T_{\text{liq}} \end{cases} \quad (2.13)$$

D'un point de vue thermodynamique, on trouve des formulations plus consistantes physiquement dans les articles suivants [47, 49, 62, 79, 80, 106, 149, 166, 198–200].

La formulation (4.3) a été utilisée pour résoudre des problèmes de changement de phase dans le cas d'un mélange dans les articles suivants [47, 81, 148, 149, 152, 157, 159, 163, 164].

Plus particulièrement dans notre étude nous allons nous intéresser au cas d'une solution binaire présentant un eutectique sur son diagramme de phase. Ici le changement de phase est caractérisé par une fusion étalée sur l'intervalle  $[T_E - T_F]$ . Le diagramme de phase 2.3 présente un solidus vertical et un liquidus rectiligne caractéristique du cas limite d'une solution faiblement concentrée.

Le point eutectique  $(x_E, T_E)$  correspond à l'équilibre entre les trois phases que sont le solide pur, le liquide pur également et une phase mixte. L'équilibre est monovariant ainsi un seul paramètre intensif est libre d'évoluer sans rompre l'équilibre thermodynamique.  $T_{F,w}$  est la température de fusion du solvant. Le solidus est compris entre  $T_E$  et  $T_{F,w}$  sur l'axe des ordonnées. La courbe du liquidus définit l'instant où disparaît le dernier cristal lors de la fusion. Le point  $(x_0, T_F)$  est quand à lui le point d'équilibre de la solution étudiée.

L'élévation de température de la solution de fraction massique en soluté  $x_0$ , inférieure à  $x_E$ , se fait dans un premier temps par une fusion du soluté ainsi que d'une partie du solvant au moment où la température atteint la valeur du plateau eutectique  $T_E$ . S'en suit la fusion graduelle du reste du solvant achevée lorsque  $T_F$ , la température du solidus est atteinte. Par contre, si la solution est à la concentration de l'eutectique  $x_E$ , alors l'ensemble du solvant aura fondu au plateau eutectique. Dans ce cas, tout comme un corps

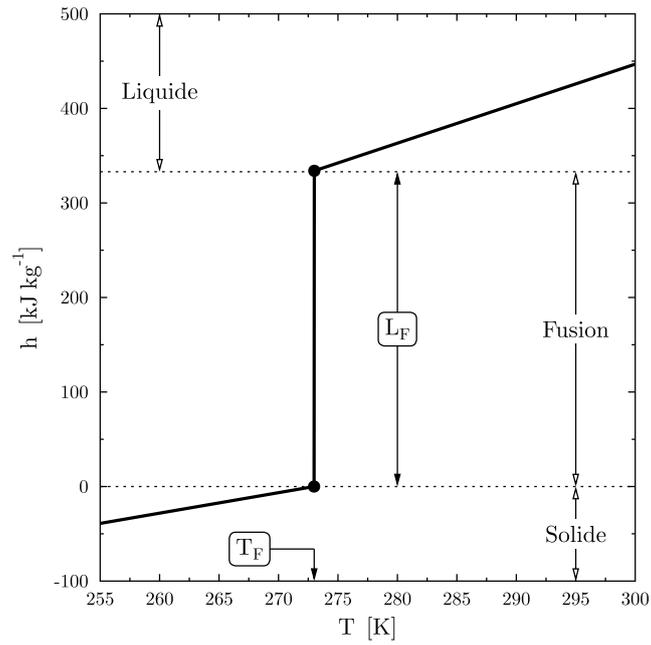


FIGURE 2.1 – Enthalpie en fonction de la température dans le cas d'un corps pur.

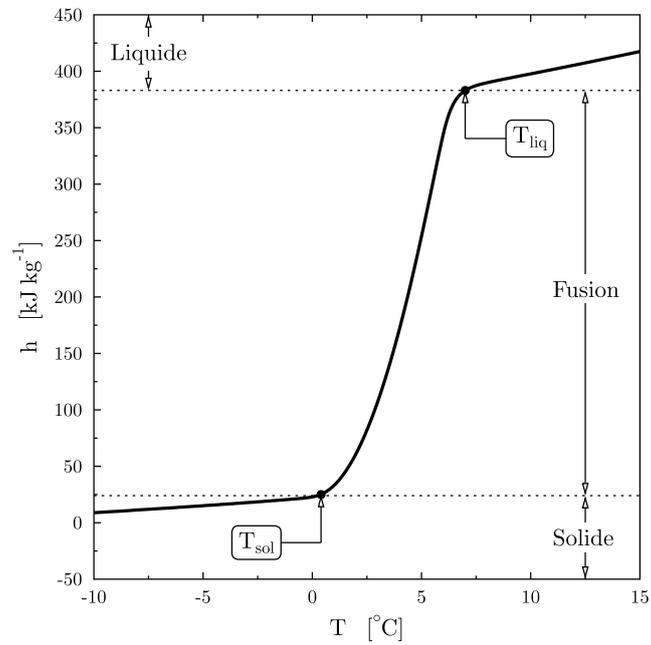


FIGURE 2.2 – Enthalpie en fonction de la température dans le cas d'un mélange.

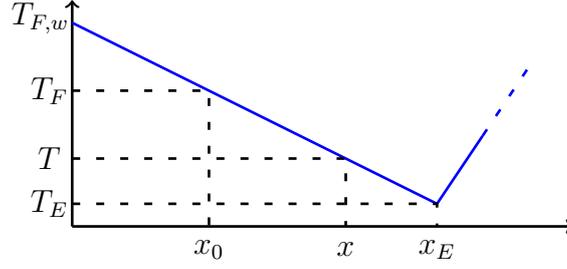


FIGURE 2.3 – Diagramme de phase d'une solution eutectique [7]

pur, la fusion se fait à température et pression constante.

Pour une solution binaire présentant un eutectique, nous utilisons l'expression de l'enthalpie suivante [201] :

$$h = \begin{cases} h_{\text{ref}} + c_s (T - T_E) & \text{si } T \leq T_E \\ h_{\text{ref}} + \text{const1} + (T_{F,w} - T_F) \left( \frac{L_{F,w}}{T_{F,w} - T} \right) & \text{si } T_E \leq T \leq T_F \\ +c_s (T + (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T)) - c_l (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T) & \text{si } T > T_F \\ h_{\text{ref}} + c_l (T - T_F) + \text{const2} & \end{cases} \quad (2.14)$$

Où :

$$\begin{aligned} \text{const1} = & L_E - \left( (T_{F,w} - T_F) \left( \frac{L_{F,w}}{T_{F,w} - T_E} \right) + c_s (T_E + (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_E)) \right. \\ & \left. - c_l (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_E) \right) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Et :

$$\begin{aligned} \text{const2} = & c_s (T_F + (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_F)) \\ & - c_l (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_F) + \text{const1} \end{aligned} \quad (2.16)$$

En ce qui concerne l'expression de la fraction massique liquide  $Y_l$ , plusieurs possibilités sont envisagées.

Dans notre modèle nous avons choisi de nous appuyer sur la formulation (2.17) pour le calcul de la fraction massique liquide lors d'un changement de phase isotherme. Dans ce cas on assume une variation linéaire de la forme :

$$Y_l = \begin{cases} 0 & \text{si } h < c_s T_F \\ \frac{h - c_s T_F}{L_F} & \text{si } c_s T_F \leq h < c_s T_F + L_F \\ 1 & \text{si } h \geq c_s T_F + L_F \end{cases} \quad (2.17)$$

Dans le cas d'une solution binaire eutectique, on définit la fraction massique liquide comme suit dans notre modèle :

$$Y_l = \begin{cases} 0 & \text{si } h < 0 \\ \frac{h}{const2} & \text{si } 0 \leq h < const2 \\ 1 & \text{si } h \geq const2 \end{cases} \quad (2.18)$$

### 2.2.2.2 Source-based method

Cette formulation est très fréquente notamment dans les codes commerciaux proposant un module dédié aux problématiques de changement de phase liquide/solide. Elle permet d'envisager une résolution dégradée de l'équation d'énergie faisant intervenir la température.

Pour se faire, on va considérer les parts sensible et latente de l'enthalpie de manière découplée via deux termes distincts :

$$h = h_{sen} + h_{lat} = \int_{T_{ref}}^T \rho c \, dT + \rho Y_l(T) L_F \quad (2.19)$$

Ainsi nous pouvons réécrire l'équation (2.11) sous la forme suivante :

$$\rho c \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T \right) = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) - \rho L_M \left( \frac{\partial Y_l}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} Y_l \right) \quad (2.20)$$

Le terme  $\vec{V} \cdot \vec{\nabla} Y_l$  peut être négligé si le solide est supposé comme étant stationnaire ou si le changement de phase est isotherme et que le schéma numérique est suffisamment performant pour ne pas étaler l'interface.

En ce qui concerne l'expression de la fraction massique liquide, nous allons utiliser dans ce cas une expression sous la forme d'une fonction erreur [79, 82] :

$$Y_l = \frac{1}{2} \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( 4 \frac{T - \frac{T_{liq} + T_{sol}}{2}}{T_{liq} - T_{sol}} \right) \right] \quad (2.21)$$

Pour aller plus loin, si l'on substitue la fraction massique liquide  $Y_l$  par son expression (2.21) dans l'équation (2.20) on obtient la formulation développée suivante pour l'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial \rho c T}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho c T \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) + S_{h,ref} \quad (2.22)$$

Avec :

$$S_{h,\text{ref}} = -\rho L_F \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T \right) \frac{4 \cdot \exp\left(\left(\frac{4(T - T_F)}{T_l - T_s}\right)^2\right)}{(T_l - T_s)\sqrt{\pi}} \quad (2.23)$$

Naturellement, en pratique, sa résolution nécessitera l'explicitation des conditions aux limites et initiales ; celles-ci seront fournies lors de la présentation des différentes situations simulées.

## 2.3 Résolution numérique

Ayant défini les systèmes d'EDP caractérisant notre problème d'un changement de phase liquide/solide en présence d'effets convectifs, nous nous intéressons désormais à la méthode numérique utilisée pour son intégration.

La résolution envisagée se fait donc avec le logiciel de CFD libre OpenFOAM<sup>2</sup> (*Open Field Operation and Manipulation*), qui est un code volume fini centré aux mailles développé en C++. Son utilisation est répandue dans divers secteurs d'activités de l'ingénierie et de la recherche aussi bien dans le domaine privé qu'académique. Son spectre d'applications s'étend de la résolution d'écoulements complexes incluant des réactions chimiques, de la turbulence et des transferts thermiques, à l'électromagnétisme et à la mécanique du solide. L'outil inclut un utilitaire de génération de maillage ainsi que de pré et post-traitement. Ces derniers sont également utilisables pour des calculs en parallèles permettant l'étude de cas onéreux en terme de coût numérique.

Étant libre de source, OpenFOAM permet aux utilisateurs de modifier et d'étendre en fonction de leurs besoins les fonctionnalités existantes. Dans la version 2.2.1 que nous utilisons, le modèle de transition de phase qui nous intéresse n'est pas disponible, nous l'avons donc redéveloppé afin qu'il soit implémenté dans la librairie de modèles physiques d'OpenFOAM. La structure du code source se veut la plus modulable possible. Chaque collection de fonctionnalités (méthodes numériques, maillage, modèles physiques) est compilé dans une librairie qui lui est propre. Une fois compilées, des exécutable sont alors générés liés aux libraires concernées. Au moment de la rédaction de ce paragraphe, OpenFOAM en était à sa version 2.4.0 qui inclue plus de 80 solveurs permettant la simulation de problèmes pointus en mécanique de l'ingénieur ainsi que plus de 170 utilitaires pour les tâches de pré et de post-traitement, de maillage ou encore de visualisation de données.

OpenFOAM possède une suite d'outils numériques permettant de résoudre une large gamme de problèmes et possédant les caractéristiques suivantes :

---

2. <http://www.openfoam.com>

- **Solution itérative séparée** ; Le système d'équations gouvernant le problème qui nous concerne est géré au travers de la création de matrices pour chacune des équations, puis résolues par une procédure itérative (à opposer avec le fait de créer une seule et unique matrice pour l'ensemble du système d'EDP) ;
- **Méthode aux volumes finis** ; Les matrices d'équations sont construites en utilisant la méthode des volumes finis ; cette méthode est basée sur la discrétisation spatiale des équations aux dérivées partielles via le théorème de Gauss, dans le but de les transcrire en équations algébriques ( $Ax = b$ ) pouvant être résolues par un ordinateur. Cette méthode est conservative et fonctionne avec des maillages structurés comme non structurés ;
- **Variables co-localisées** ; Les variables solutions de chaque matrice équation sont centrées aux cellules à l'exception de la vitesse ;
- **Couplage des équations** ; Le couplage des équations, en particulier le couple pression-vitesse, est réalisé à l'aide d'algorithmes tels que PISO, SIMPLE ou encore PIMPLE dont nous allons maintenant parler.

En pratique, nous utilisons une méthode de résolution découplée des EDP basée sur l'algorithme PIMPLE. Celui-ci est une combinaison des algorithmes SIMPLE (Semi-Implicit method for Pressure-Linked Equations) et PISO (Pressure-Implicit Split-Operator) et résout donc les équations en grille décalée. L'algorithme SIMPLE [202] est utilisé pour résoudre les problèmes stationnaires où le traitement de la non linéarité de la vitesse durant la résolution est plus crucial que la détermination précise de la pression. Chaque itération étant équivalente à un pseudo pas de temps, les propriétés sont sous relaxées dans le but d'accroître la stabilité de la méthode et d'en améliorer la convergence. D'un autre côté, l'algorithme PISO s'applique au cas des simulations transitoires pour lesquelles il est nécessaire de complètement résoudre le couplage entre la vitesse et la pression à chaque pas de temps. Les effets non linéaires de la vitesse sont diminués par l'utilisation de petits pas de temps, caractérisés par un nombre de Courant,  $Co$ , inférieur à 1 :

$$Co = \frac{\Delta t \|\vec{V}\|}{\Delta x} \quad (2.24)$$

Avec  $\Delta t$  le pas de temps et  $\Delta x$  le pas d'espace.

Si l'on se trouve dans un cas compressible, l'erreur due aux effets de la non linéarité de la vitesse est plus importante. Il est donc nécessaire de résoudre l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans une boucle à part des autres équations qui peut être ainsi recalculée autant de fois que l'exige l'algorithme PIMPLE. L'équation de conservation de l'énergie peut être incluse soit dans la boucle PIMPLE soit dans celle de l'algorithme PISO. Lorsqu'une variation rapide d'une propriété thermophysique (température, pression ou masse volumique) dans le temps est constatée, l'équation d'énergie devrait être incluse dans la boucle PISO afin d'améliorer le couplage entre la pression et la température.

L'organigramme présenté sur la figure 2.4 explicite le fonctionnement de l'algorithme PIMPLE. Le bloc qui est dessiné en pointillés indique où devrait se trouver la résolution

de l'équation de conservation de l'énergie lorsque celle-ci est intégrée dans la boucle PISO.

La méthode des volumes finis implémentée dans OpenFOAM utilise des méthodologies co-localisées sur une grille de polyèdres non structurée. Les grandeurs sont centrées aux mailles. Plusieurs schémas d'interpolation, de discrétisation et de résolution de matrices sont disponibles. Leur sélection se fait via les fichiers fvSchemes et fvsolutions. En ce qui concerne la discrétisation des flux convectifs et diffusifs, et des gradients, les choix retenus pour l'ensemble des simulations présentées dans ce manuscrit sont fournis dans le tableau 2.1.

Désignation	Terme concerné	Méthode
ddtSchemes	$\frac{\partial \rho \vec{V}}{\partial t}, \frac{\partial \rho c T}{\partial t}, \frac{\partial \rho h}{\partial t}$	Euler implicite 1 <sup>er</sup> ordre
divSchemes	$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \otimes \vec{V}), \vec{\nabla} \cdot (\rho c T \vec{V}), \vec{\nabla} \cdot (\rho h \vec{V})$	UPWIND 1 <sup>er</sup> ordre
gradSchemes	$\vec{\nabla} P$	intégration de Gauss et interpolation linéaire
laplacianSchemes	$\vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T)$	Différences centrées 1 <sup>er</sup> ordre

TABLE 2.1 – Types de discrétisation retenus dans OpenFOAM.

L'intégration en temps se fait quant à elle via un schéma d'Euler implicite du premier ordre comme noté dans le tableau 2.1 méthode classiquement employée dans ce genre de problème [64, 72, 73, 202].

Nous avons donc présenté dans ce chapitre les deux formulations de l'équation de conservation de l'énergie que nous avons implémenté dans OpenFOAM, ainsi que les deux types de fermetures thermodynamiques que nous considérons. Dans la section qui va suivre nous allons maintenant comparer les performances de chaque formulation en confrontant les résultats obtenus avec ces dernières à des résultats analytiques et expérimentaux.

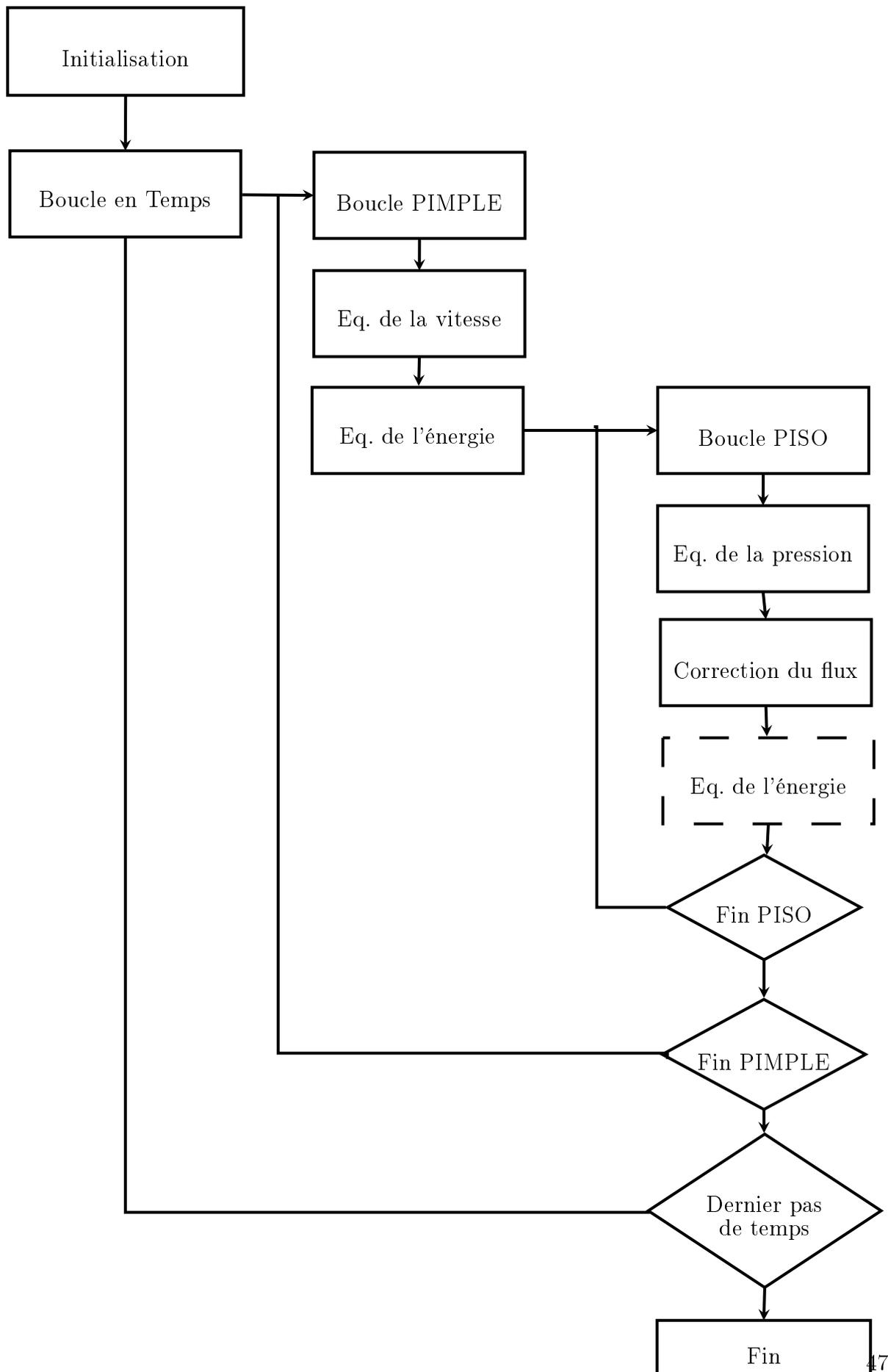


FIGURE 2.4 – Organigramme de l’algorithme PIMPLE.



# Chapitre 3

## Benchmark des méthodes sur grille fixe pour la modélisation de la fusion.

### 3.1 Introduction

Comme nous avons déjà pu le mentionner dans le chapitre 1, le changement de phase solide/liquide soulève des nombreuses problématiques. D'un point de vue mathématique, le processus de fusion équivaut à un problème de frontière mobile, et du fait de ce déplacement, il est non linéaire. Donc la position et la vitesse de l'interface de changement de phase ne peuvent être calculées analytiquement car ces dernières sont dépendantes du temps mais aussi car il existe une étroite relation entre la vitesse et la température.

Pour répondre à ces difficultés, nous utilisons donc des modèles physiques et numériques afin de décrire le phénomène de fusion d'un MCP. Comme dit et justifié dans les chapitres 1 et 2, nous allons employer des méthodes à domaine unique sur maillage fixe (ou encore *fixed-grid method*, FGM) et réaliser dans ce chapitre une comparaison qualifiée d'analytique, dans un premier temps, en utilisant les résultats théoriques d'un problème de Stefan et de Neumann sur la position de l'interface et sur l'évolution du champ de température au cours du temps. Dans une seconde partie, nous réaliserons une étude comparative qualifiée d'expérimentale à l'aide de résultats expérimentaux sur la fusion de deux matériaux type corps pur disponibles dans la littérature.

Il a été remarqué que peu de données concernant une telle étude portant sur les méthodes à maillages fixes étaient disponibles. Ettouney [28] a testé quatre méthodes aux éléments finis de Galerkin pour résoudre un problème de solidification en régime stationnaire et en négligeant la convection thermique. Furzeland [29] a mené une étude comparative sur la position de l'interface renvoyée par différentes méthodes de *front tracking* et par la méthode enthalpique, dans le cas d'un changement de phase purement conductif. Lacroix [38] a réalisé un benchmark entre des méthodes de type *transformed-grid* et *physical-grid* en comparant cette fois encore la position de l'interface, lors de la fusion du gallium, déterminée via chacune de ces techniques. Viswanath [85] a réalisé des travaux similaires à ceux de Lacroix.

En extension de ces divers travaux, on trouve les benchmarks de Bertand [203] et de Gobin [204] qui ont tous deux simulé la fusion de MCP type corps purs en prenant en

compte la convection naturelle dans un domaine en deux dimensions. L'intérêt majeur de ces travaux réside dans la mise à l'essai de deux matériaux, différenciés par leur nombre de Prandtl (l'un est un métal tandis que l'autre est un matériau organique), ainsi que pour les résultats numériques qui y sont présentés, notamment la position du front de fusion en divers instants de la simulation, du grand nombre de contributeurs au benchmark (13 contributeurs dans [204]) et de la diversité des méthodes employées pour résoudre le problème de Neumann. Toutefois, Gobin fait la remarque que les comparaisons réalisées ne sont faites que d'un point de vue qualitatif, puisque qu'aucun critère quantitatif objectif n'est calculé. Il remarque également le besoin de mener une étude paramétrique sur les pas de temps et d'espace sélectionnés.

Différentes formulations pour des méthodes sur grille fixe exprimées en enthalpie sont testées dans [158] et Basu, Dantzig et Pham [63, 131, 198] ont comparé plusieurs méthodes du  $c_p$  apparent. À chaque fois, seule la conduction est modélisée et l'influence de l'écart de température entre les phases solide et liquide n'est pas étudié. Poirier [61] a quand à lui étendu le travail de comparaisons précédent aux méthodes aux différences finies et aux éléments finis.

En ce qui concerne la méthode enthalpique avec porosité artificielle [72, 73, 100] que nous utilisons dans nos travaux de modélisation, Ahmad [159] a comparé les résultats numériques obtenus avec des méthodes aux volumes et aux différences finies, à des résultats expérimentaux. Thomas [128] et Voller [84] ont comparé différentes méthodes à maillages fixes et dans [79] on peut trouver une analyse des méthodes enthalpiques à porosité artificielle couplées à différentes relations liant la fraction massique liquide à la température ( $Y_l(T)$ ). L'étude la plus complète concernant les méthodes à maillages fixes utilisées avec différentes formulations volumes et éléments finis, a été menée par Voller [78]. Cependant seule la conduction y est prise en compte et aucune analyse comparative, qualitativement et quantitativement parlant, n'a été réalisée.

Nous allons donc proposer dans ce chapitre une vue d'ensemble de l'utilisation des méthodes à maillages fixes que nous avons identifiées dans le chapitre 2, dans l'objectif d'obtenir une analyse quantitative de ces méthodes qui se révélera utile dans l'étude et le design d'une solution de stockage thermique par chaleur latente. Chaque méthode sera alors comparée à des résultats analytiques et expérimentaux.

Nous présenterons dans un premier temps le cas d'étude (géométrie, MCP, conditions initiales et aux limites et les différents paramètres numériques). Comme on le verra, notre attention s'est essentiellement focalisée sur des MCP de type corps pur afin de s'affranchir de toute considération concernant la dépendance de l'enthalpie à la concentration dans le cas d'un mélange ou d'une solution. Il est cependant possible de lisser la transition solide/liquide (isotherme dans le cas d'un corps pur) avec certaines méthodes à maillages fixes, afin de modéliser un mélange. Dans ce cas les valeurs supérieure et inférieure fixées représentent, respectivement, la température de liquidus et de solidus. Nous testerons plusieurs plages de températures dans la suite.

Dans un second temps nous effectuerons une comparaison des nos résultats avec les solutions analytiques correspondantes. Une analyse de l'influence du pas de temps et du pas d'espace ainsi que de la plage de températures sur laquelle le changement de phase intervient sera réalisée.

Enfin dans la dernière section nos résultats seront comparés à des résultats expérimentaux

disponibles dans la littérature.

## 3.2 Étude comparative théorique

### 3.2.1 Solutions analytiques

Il existe peu de solutions analytiques et la plupart ne concernent que des cas mono-dimensionnels pour une région infinie ou semi-infinie avec des conditions aux limites et initiales simples sans prise en compte de la variation des propriétés thermophysiques du matériau.

Nous allons tout d'abord expliquer en détails les deux cas de figures qui vont être mis à l'étude dans cette section.

#### 3.2.1.1 Problème de Stefan à une phase [1]

On parle dans ce cas de problème à une phase car seule la phase liquide est active dans la transformation tandis que la phase solide reste à la température de fusion. Dans le cas où les propriétés thermodynamiques du matériau sont supposées constantes, le taux de fusion (ou de solidification), dans une région semi-infinie, est gouverné par le nombre adimensionnel de Stefan :

$$\text{St} = \frac{c_l(T_l - T_F)}{L_F} \quad (3.1)$$

Les seuls résultats analytiques disponibles correspondent au cas d'un domaine uni-dimensionnel, infini ou semi-infini, avec des conditions aux limites et initiales simples. C'est sur ces derniers que nous allons nous baser pour notre étude comparative.

Considérons un MCP, initialement à l'état solide à une température  $T = T_F$  qui est chauffé par un de ses côtés à une température  $T_C > T_F$ . Si l'on suppose que le transfert thermique se fait uniquement par conduction et que l'on considère un domaine semi-infini (correspondant à une condition adiabatique sur le côté opposé à celui où l'on impose la température  $T_C$ ), alors la position de l'interface solide/liquide au cours du temps est régie par [16] :

$$s(t) = 2\xi\sqrt{\alpha_l t} \quad (3.2)$$

Le champ de température est quand à lui calculé via l'expression suivante :

$$T(x, t) = T_L - (T_L - T_F) \frac{\text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_l t}}\right)}{\text{erf}(\xi)} \quad (3.3)$$

Où la variable  $\xi$  est la solution de l'équation suivante :

$$\xi e^{\xi^2} \text{erf}(\xi) = \frac{\text{St}_l}{\sqrt{\pi}} \quad (3.4)$$

### 3.2.1.2 Problème de Stefan à deux phases ou problème de Neumann [2]

Le problème de Stefan à une phase a été étendu aux problèmes à deux phases (aussi connu sous le nom de problème de Neumann) qui est plus réaliste physiquement parlant [15]. Dans ce cas, le MCP est initialement à l'état solide, sa température initiale est différente de celle de fusion et cette dernière n'est pas maintenue à une valeur constante.

Si la fusion se fait dans un domaine semi-infini ( $0 < x < \infty$ ), que le MCP solide est initialement à une température uniforme  $T_0 < T_M$ , et qu'une température  $T_C > T_F$  constante est imposée en  $x = 0$  et si l'on considère toujours les propriétés du matériau comme étant constantes, alors le problème de Neumann peut s'exprimer mathématiquement comme suit :

- La conduction thermique dans la phase solide ou liquide est donnée par l'équation suivante :

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3.5)$$

- L'évolution de la position de l'interface solide/liquide, dont le mouvement est contrôlé par la quantité de chaleur latente absorbée (ou perdue) à la frontière, est décrite mathématiquement par l'équation (3.6) aussi connue sous le nom de condition de Stefan :

$$\rho L_F \left( \frac{ds(t)}{dt} \right) = k_s \left( \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) - k_l \left( \frac{\partial T_l}{\partial x} \right) \quad (3.6)$$

Avec  $s(t)$  la position de l'interface.

Dans ces conditions, les champs de températures solide et liquide sont donnés par les équations suivantes :

$$T(x, t) = \begin{cases} T_L - (T_L - T_F) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_l t}}\right)}{\operatorname{erf}(\xi)} & \text{dans la phase liquide} \\ T_0 + (T_F - T_0) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\xi \sqrt{\frac{\alpha_l}{\alpha_s}}\right)} & \text{dans la phase solide} \end{cases} \quad (3.7)$$

Avec  $\xi$  la solution de l'équation transcendentale suivante :

$$\frac{St_l}{e^{\xi^2} \operatorname{erf}(\xi)} - \frac{St_s}{\sqrt{\frac{\alpha_l}{\alpha_s}} e^{\frac{\alpha_l}{\alpha_s} \xi^2} \operatorname{erfc}\left(\xi \sqrt{\frac{\alpha_l}{\alpha_s}}\right)} = \xi \sqrt{\pi} \quad (3.8)$$

## 3.2.2 Résultats

Les résultats numériques présentés dans cette section ont été obtenus avec les formulations (2.11) et (2.22) de l'équation de conservation de l'énergie.

Le matériau que nous avons sélectionné pour mener nos études est le polyéthylène glycol, PEG-900, dont les propriétés sont visibles dans le tableau 3.1.

$\rho(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	$c_s(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$c_l(\text{J} \cdot \text{kg} \cdot \text{K}^{-1})$	$k(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$
1100	2260	2260	0.188
$L_F(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	$T_F(^{\circ}\text{C})$	$\beta(\text{K}^{-1})$	$\nu(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$
150 500	32	$7.6 \cdot 10^{-4}$	$9 \cdot 10^{-5}$

TABLE 3.1 – Propriétés thermophysiques du PEG-900 [4]

Les simulations se font en 1D sur un domaine de longueur  $L = 4 \cdot 10^{-2}$  m. Concernant le pas d'espace, quatre cas sont simulés :

$$\Delta x = [10^{-4}, 2 \cdot 10^{-4}, 5 \cdot 10^{-4}, 10^{-3}] \text{ m}$$

Et pour chacun de ces pas d'espaces, trois pas de temps sont considérés :

$$\Delta t = [10^{-2}, 10^{-1}, 1] \text{ s}$$

Nous allons, en plus du pas d'espace et du pas temps, faire varier l'écart de températures  $\Delta T = T_{liq} - T_{sol}$  :

$$\Delta T = [0, 10^{-2}, 10^{-1}, 2 \cdot 10^{-1}, 5 \cdot 10^{-1}, 2] \text{ K}$$

Il importe de garder à l'esprit que dans le cas de la modélisation de la fusion d'un corps pur, ce  $\Delta T$  n'a pas de signification physique mais est le fruit de considérations sur les modèles numériques employés.

Pour chacune des simulations, nous comparerons le champ de températures ainsi que la position de l'interface à différents instants physiques :

$$t = [60, 600, 3600, 7200, 10800, 14400] \text{ s}$$

Ce qui représente un total de 144 simulations réalisées et post-traitées.

Dans la suite, et ce pour faciliter la compréhension du lecteur, la formulation en enthalpie (4.1) sera désignée par  $H_{source}$  et la formulation terme source (2.22) sera désignée par  $T_{source}$ .

### 3.2.2.1 Problème de Stefan à une phase

Concernant la condition à la limite en  $x = 0$  m, on impose à l'instant initial une température égale à  $52^{\circ}\text{C}$ .

Dans cette section nous présenterons pour nos analyses des champs de températures, uniquement les résultats obtenus pour :

- $\Delta x = 10^{-4}$  et  $10^{-3}$  m ;
- $\Delta t = 10^{-2}$  et 1 s.

À  $t = 3600$  s. L'ensemble de ces résultats sont visibles sur les figures 3.1 à 3.4.

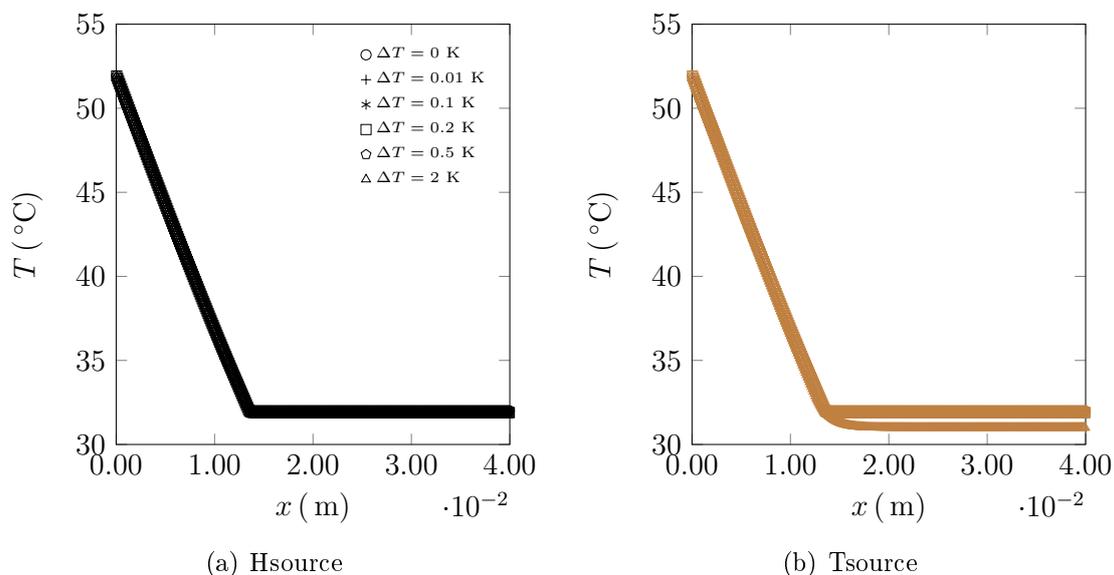


FIGURE 3.1 – Problème à 1-phase : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein),  $\Delta x = 0.0001$  m et  $\Delta t = 0.01$  s et à  $t = 3600$  s.

En complément de ces résultats, ainsi que pour appuyer notre réflexion, nous présentons sur les figures 3.5-3.6 les erreurs maximales ( $\text{MAX}\left(\frac{T_{\text{analytique}}(x,t) - T_{\text{numérique}}(x,t)}{T_{\text{analytique}}(x,t)}\right)$ ), sur les figures 3.7-3.8 les erreurs moyennes ( $\text{MEAN}\left(\frac{T_{\text{analytique}}(x,t) - T_{\text{numérique}}(x,t)}{T_{\text{analytique}}(x,t)}\right)$ ) ainsi que sur les figures 3.9-3.10 l'erreur sur la position de l'interface ( $\left(\frac{\text{Position}_{\text{analytique}}(x,t) - \text{Position}_{\text{numérique}}(x,t)}{\text{Position}_{\text{analytique}}(x,t)}\right)$ ), par rapport à la solution analytique pour chacune des deux formulations correspondant aux instants et aux pas d'espace et de temps des figures 3.1 à 3.4.

Les résultats sur les erreurs sont présentés pour l'ensemble des  $\Delta x$  et pour :

- $\Delta t = 10^{-2}$  et 1 s.
- À  $t = 3600$  s.

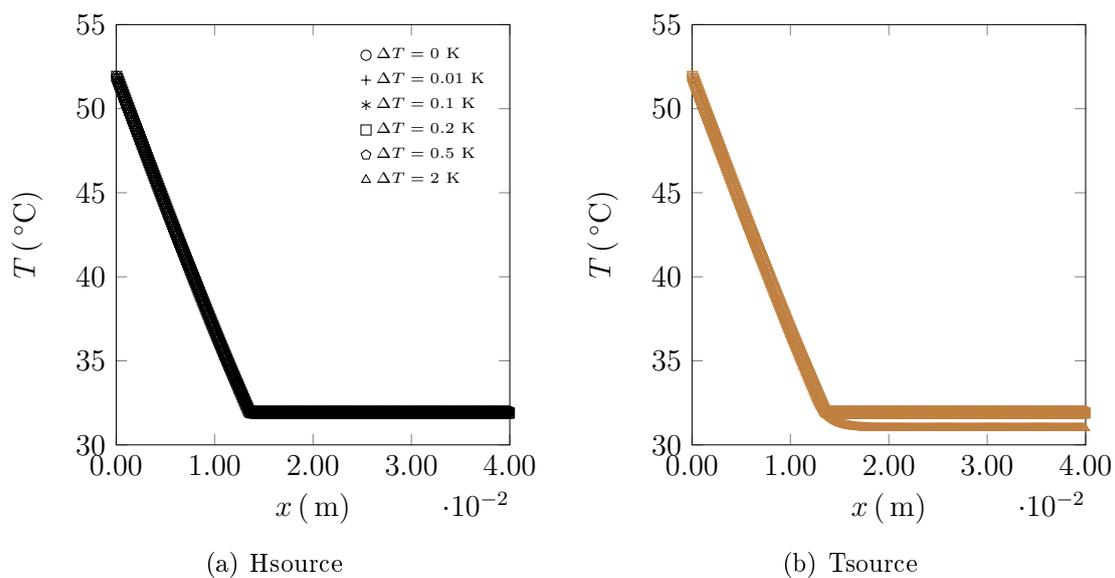


FIGURE 3.2 – Problème à 1-phase : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein),  $\Delta x = 0.0001$  m et  $\Delta t = 1$  s et à  $t = 3600$  s.

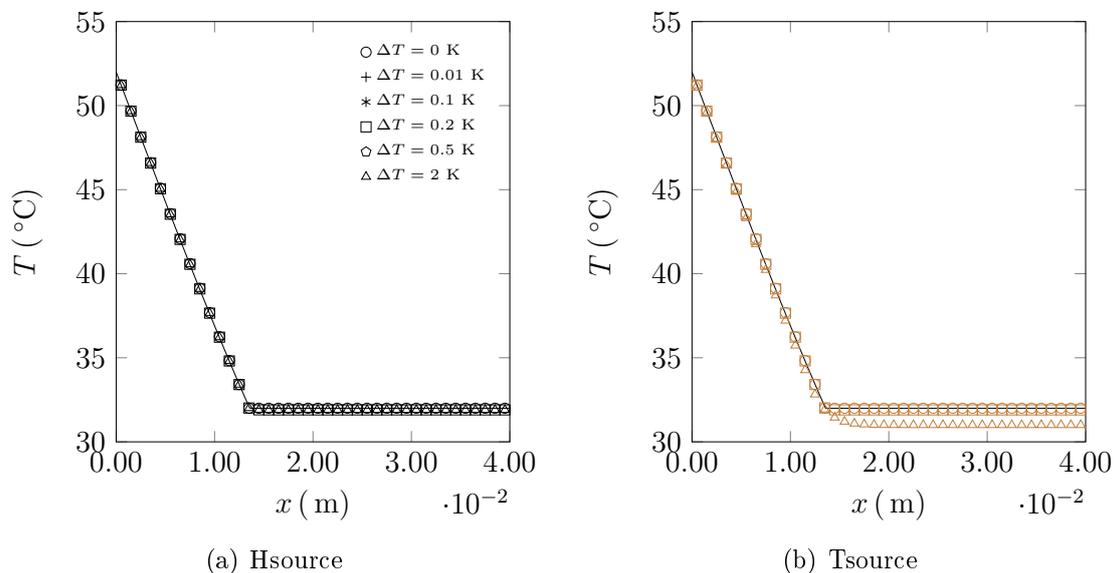


FIGURE 3.3 – Problème à 1-phase : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein),  $\Delta x = 0.001$  m et  $\Delta t = 0.01$  s et à  $t = 3600$  s.

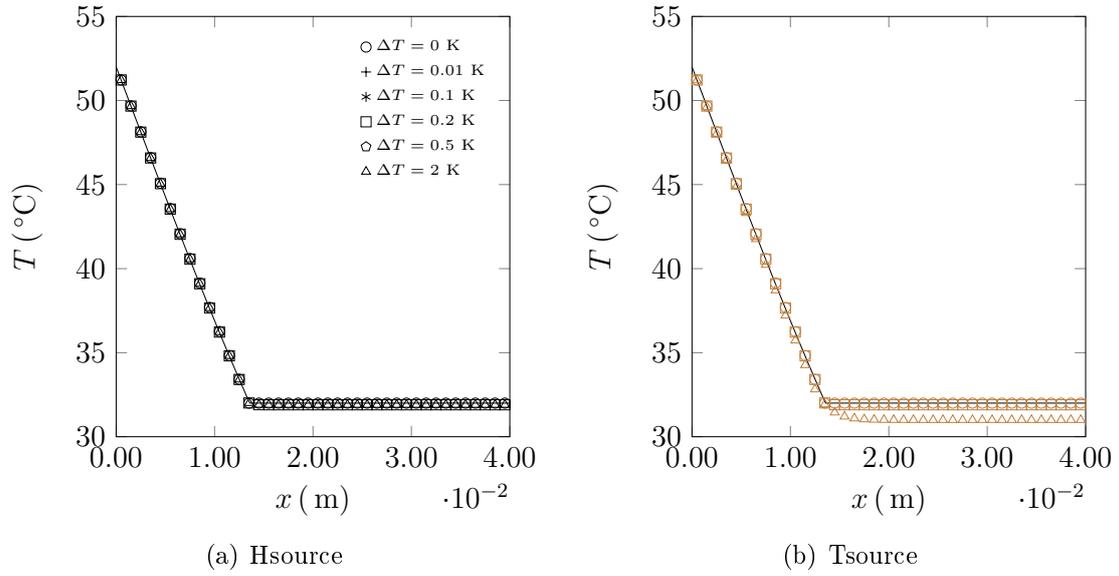


FIGURE 3.4 – Problème à 1-phase : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein),  $\Delta x = 0.001$  m et  $\Delta t = 1$  s et à  $t = 3600$  s.

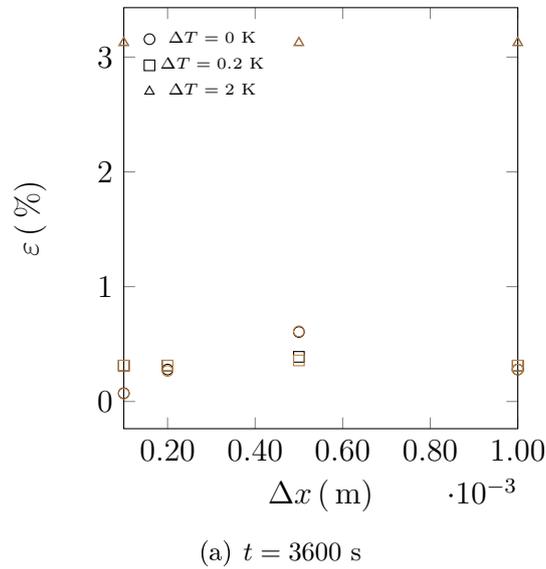
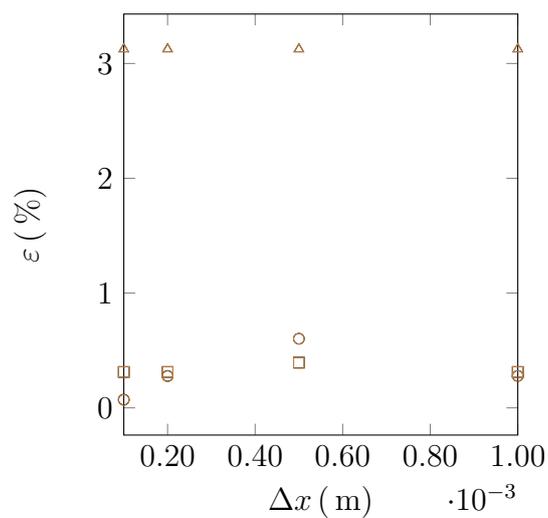
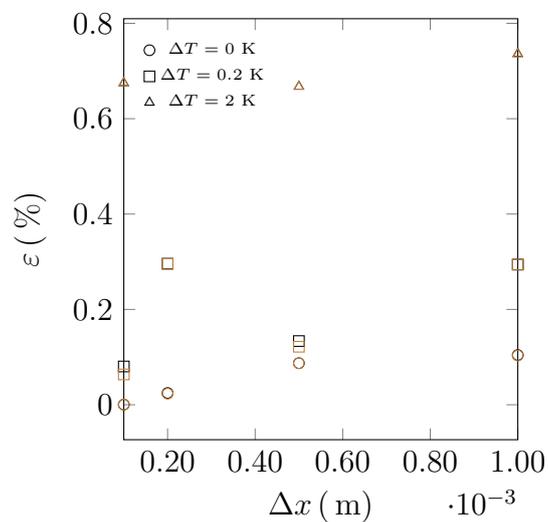


FIGURE 3.5 – Erreur maximale en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 0.01$  s.



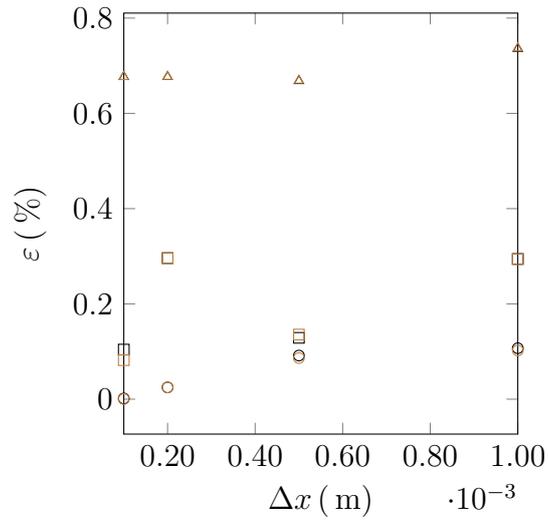
(a)  $t = 3600$  s

FIGURE 3.6 – Erreur maximale en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 1$  s.



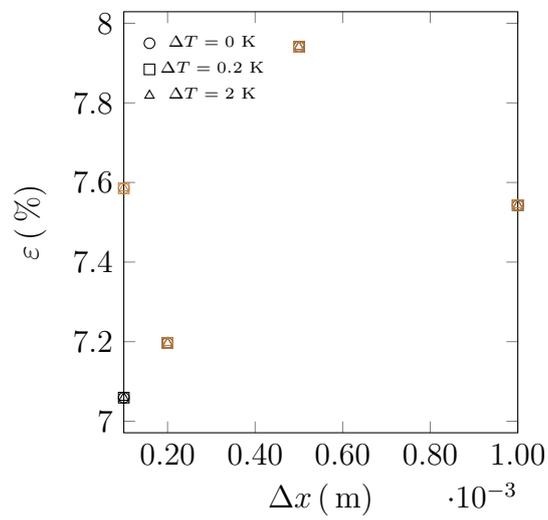
(a)  $t = 3600$  s

FIGURE 3.7 – Erreur moyenne en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron)  $\Delta t = 0.01$  s.



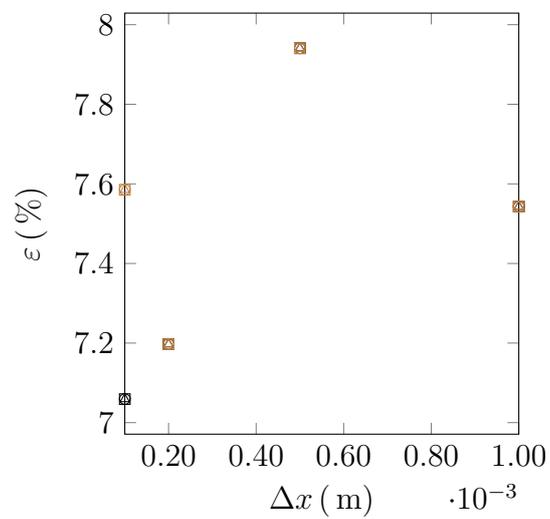
(a)  $t = 3600$  s

FIGURE 3.8 – Erreur moyenne en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 1$  s.



(a)  $t = 3600$  s

FIGURE 3.9 – Erreur sur la position de l'interface en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 0.01$  s.



(a)  $t = 3600$  s

FIGURE 3.10 – Erreur sur la position de l'interface en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 1$  s.

Premier constat, sur l'ensemble des figures comparant le champ de températures obtenu avec les diverses formulations à la solution analytique de Stefan, les courbes ne peuvent être clairement identifiées car se recouvrant. Pour la formulation Hsource il n'est pas possible de faire la distinction entre les résultats correspondant à chaque  $\Delta T$ . Cela signifie donc que l'influence de ce paramètre dans la formulation Hsource est très faible. Ce n'est plus le cas si l'on observe cette fois les résultats obtenus avec la formulation Tsource. En effet, la formulation Tsource avec  $\Delta T = 2\text{ K}$  présente un écart par rapport à la solution analytique dès lors que l'on se trouve dans la phase solide du MCP. La température de fusion du matériau étant de  $32^\circ\text{C}$ , nous devrions normalement nous trouver à cette température lorsque nous sommes dans la phase solide. Hors dans ce cas précis nous observons une température de  $31^\circ\text{C}$  ce qui correspond à la température de solidus dans le cas  $\Delta T = 2\text{ K}$ , et c'est donc pour cette raison que la phase solide se trouve à cette température. Le même raisonnement peut être fait pour les autres valeurs de  $\Delta T$ , le phénomène étant simplement moins visible pour des écarts de températures plus petits.

Autre constat, il ne semble pas, à ce stade, que le pas de temps et le pas d'espace aient une influence significative sur les résultats obtenus, la seule observation du champ de températures ne permettant pas de conclure à des différences. L'analyse des erreurs va nous permettre d'affiner notre réflexion.

Les résultats concernant les erreurs maximales et moyennes ainsi que l'écart sur la position de l'interface nous permettent donc de réaliser une analyse quantitative des différentes formulations.

Si l'on regarde les résultats sur l'erreur maximale calculée, celle-ci est d'environ 3% dans le cas des formulations Tsource et Hsource avec  $\Delta T = 2\text{ K}$  et ce quel que soit le pas d'espace et le pas de temps. On remarque également que les erreurs maximales calculées pour les deux formulations se superposent dans la quasi totalité des cas à l'exception du cas où  $\Delta x = 5 \cdot 10^{-4}\text{ m}$ ,  $\Delta t = 10^{-2}\text{ s}$  et  $\Delta T = 0.2\text{ K}$ . L'écart constaté reste cependant très faible et peut être imputé à une erreur de précision numérique. À l'exception de ce cas donc, l'erreur maximale la plus faible est obtenue pour  $\Delta T = 0\text{ K}$ , avec une valeur oscillant entre 0% et 0.5%, ce qui est logique s'agissant du cas se rapprochant le plus de la modélisation mathématique du comportement d'un corps pur en fusion.

En ce qui concerne les résultats obtenus sur l'erreur moyenne, globalement, nous pouvons appliquer les mêmes constats que ceux fait sur l'erreur maximale, à ceci près que la distinction entre les formulations Hsource et Tsource se fait plus nette dans le cas où  $\Delta T = 0.2\text{ K}$  à la faveur de Tsource. L'erreur moyenne la plus élevée est toujours calculée dans le cas  $\Delta T = 2\text{ K}$  ( $\approx 0.7\%$ ) et la plus faible dans le cas  $\Delta T = 0\text{ K}$  ( $\approx 0.1\%$ ).

Enfin, concernant l'erreur sur la position de l'interface, on ne note pas d'influence particulière du pas de temps. En revanche, même si aucune distinction n'est observable entre les deux formulations pour  $\Delta x = [2 \cdot 10^{-4}, 5 \cdot 10^{-4}, 10^{-3}]\text{ m}$ , ce n'est pas le cas à  $\Delta x = 10^{-4}\text{ m}$ . Notons tout de même que cette différence est de l'ordre de 0.5%. On remarque également que l'erreur la plus élevée est d'environ 8% et est obtenue à  $\Delta x = 5 \cdot 10^{-4}\text{ m}$  qui n'est pas le pas d'espace le plus grand comme on aurait pu s'y attendre.

### 3.2.2.2 Problème de Stefan à deux phases

En ce qui concerne la condition à la limite en  $x = 0$  m, à l'instant initial on impose une température de  $52^\circ\text{C}$ . La température initiale du MCP est quant à elle fixée à  $12^\circ\text{C}$ .

De la même façon, dans cette section nous présenterons pour nos analyses du champ de températures, uniquement les résultats obtenus pour :

- $\Delta x = 10^{-4}$  et  $10^{-3}$  m ;
- $\Delta t = 10^{-2}$  et 1 s.

À  $t = 3600$  s. Ces résultats sont visibles sur les figures 3.11 à 3.14.

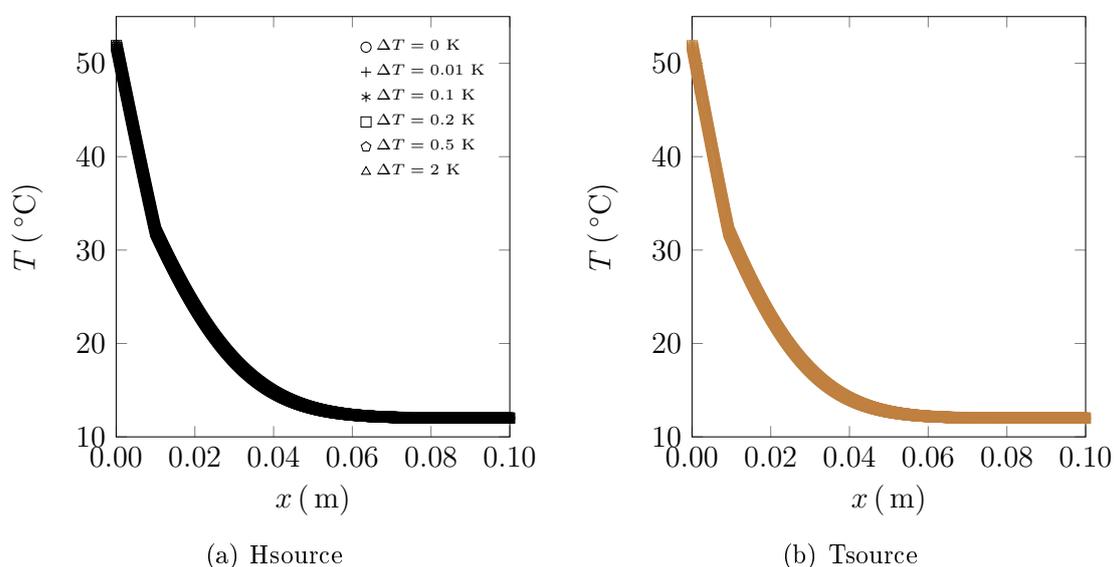


FIGURE 3.11 – Problème à 2-phases : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein),  $\Delta x = 0.0001$  m et  $\Delta t = 0.01$  s et à  $t = 3600$  s.

En complément de ces résultats, ainsi que pour appuyer notre analyse, nous présentons sur les figures 3.15-3.16 les erreurs maximales, sur les figures 3.17-3.18 les erreurs moyennes ainsi que sur les figures 3.19-3.20 l'erreur sur la position de l'interface, par rapport à la solution analytique pour chacune des deux formulations correspondant aux instants et aux pas de temps des figures 3.11 à 3.14. L'ensemble des pas d'espace sont cette fois présentés.

Nous passerons rapidement sur l'analyse des courbes du champ de températures qui comme dans le cas précédent, semblent recouvrir la solution analytique de Neumann (on remarquera tout de même que dans le cas de la formulation Tsource, les résultats paraissent être légèrement inférieurs à ceux de la théorie et en particulier dans la zone

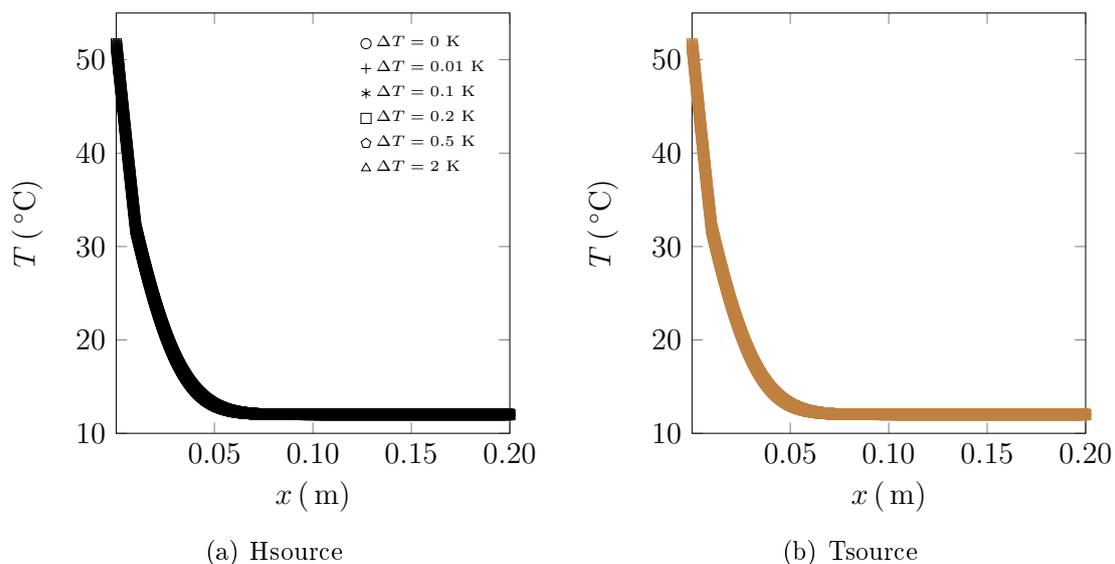


FIGURE 3.12 – Problème à 2-phases : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein),  $\Delta x = 0.0001$  m et  $\Delta t = 1$  s et à  $t = 3600$  s.

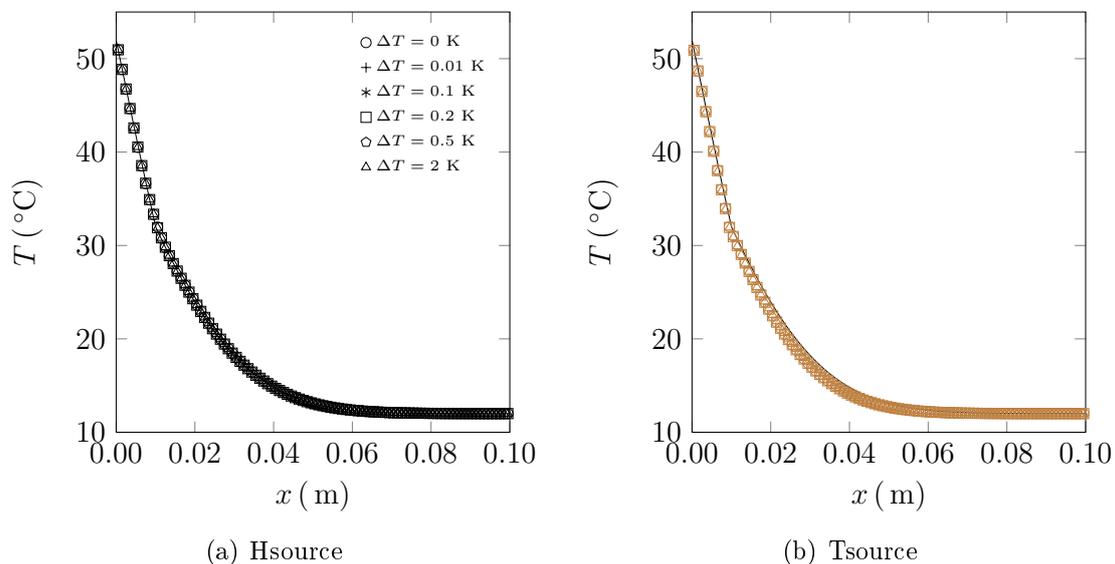


FIGURE 3.13 – Problème à 2-phases : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein),  $\Delta x = 0.001$  m et  $\Delta t = 0.01$  s et à  $t = 3600$  s.

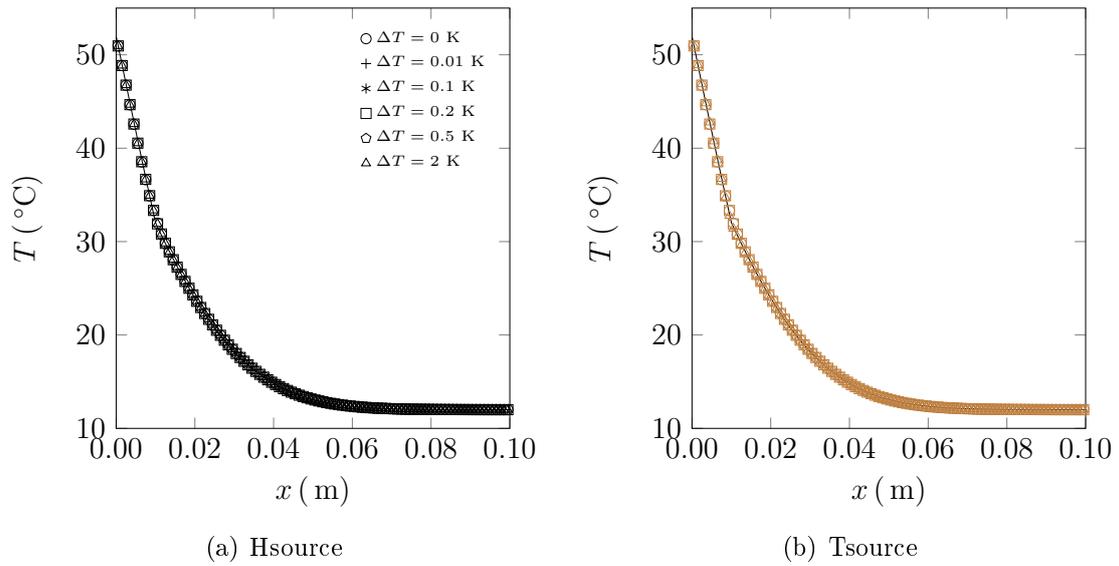


FIGURE 3.14 – Problème à 2-phases : comparaison du champ de températures pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron) avec la solution analytique (trait plein),  $\Delta x = 0.001$  m et  $\Delta t = 1$  s et à  $t = 3600$  s.

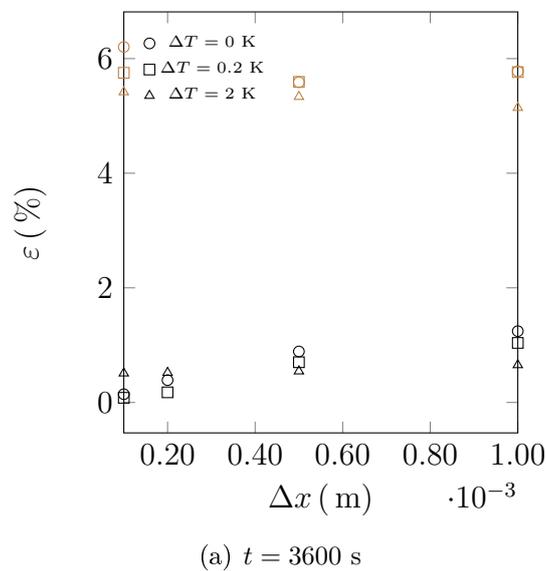
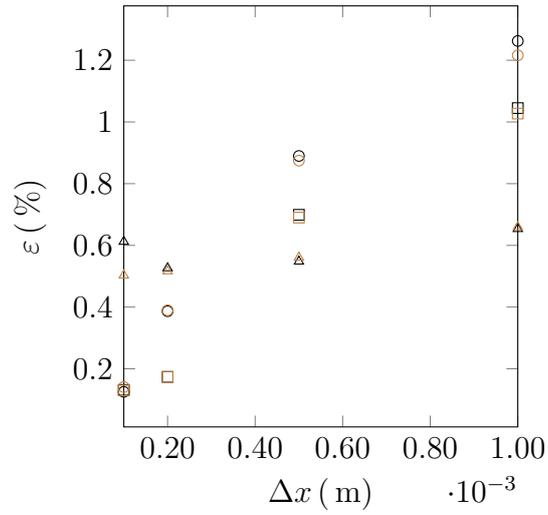
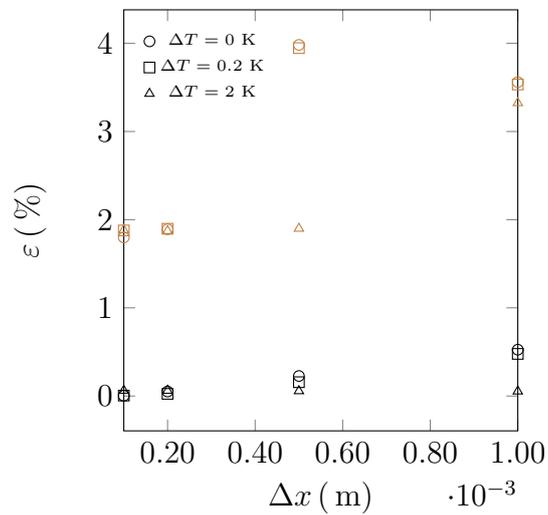


FIGURE 3.15 – Erreur maximale en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 0.01$  s.



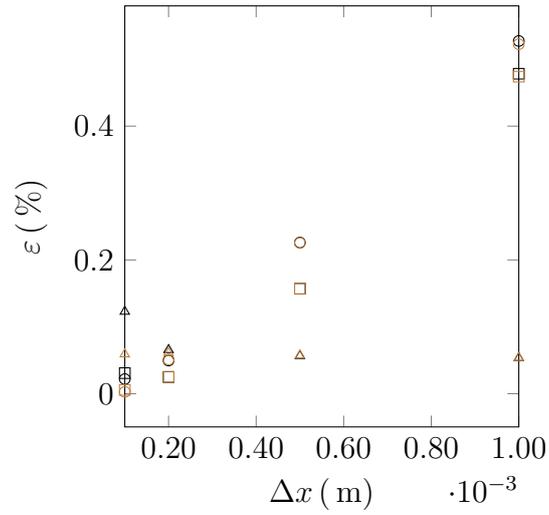
(a)  $t = 3600$  s

FIGURE 3.16 – Erreur maximale en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 1$  s.



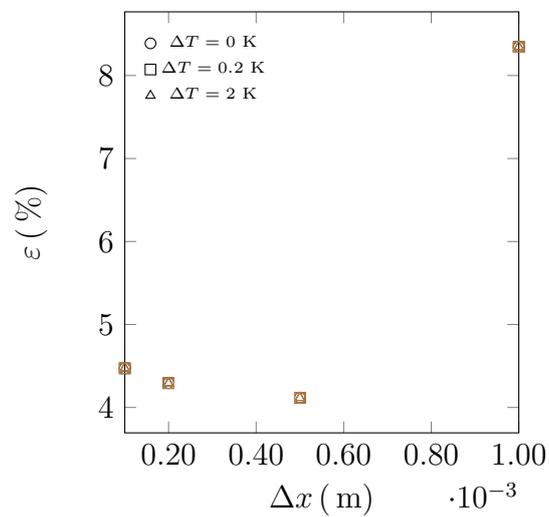
(a)  $t = 3600$  s

FIGURE 3.17 – Erreur moyenne en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 0.01$  s.



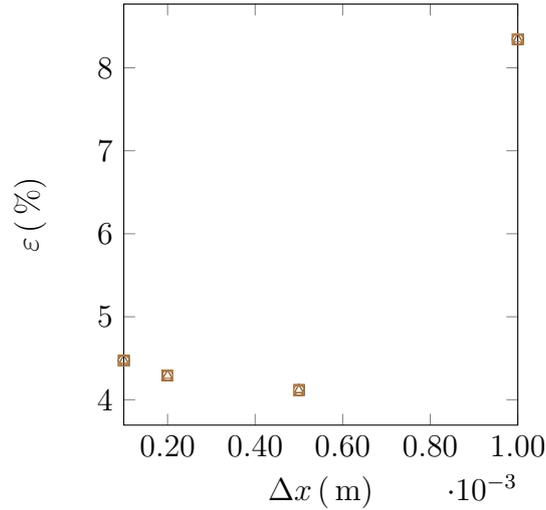
(a)  $t = 3600$  s

FIGURE 3.18 – Erreur moyenne en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 1$  s.



(a)  $t = 3600$  s

FIGURE 3.19 – Erreur sur la position de l'interface en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 0.01$  s.



(a)  $t = 3600$  s

FIGURE 3.20 – Erreur sur la position de l’interface en fonction de  $\Delta x$  pour les formulations Hsource (noir) et Tsource (marron),  $\Delta t = 1$  s.

correspondant à la transition de phase) pour nous focaliser sur l’étude des différentes erreurs calculées.

Tout d’abord l’erreur maximale ; on constate ici une dispersion plus importantes des résultats, entre  $\approx 0\%$  et  $\approx 6\%$  pour  $\Delta t = 0.01$  s et entre  $\approx 0\%$  et  $\approx 1\%$  pour  $\Delta t = 1$  s là où dans le cas précédent nous nous trouvions entre  $0\%$  et  $3\%$  d’erreur maximale pour les deux pas de temps. Les différences entre la formulation Hsource et Tsource sont également plus marquées, en particulier sur la figure 3.15 où l’erreur la plus élevée est systématiquement obtenue avec la formulation Tsource. Si l’on continue notre analyse sur cette figure, bien qu’il soit évident que la formulation Hsource génère le moins d’erreur, il est moins aisé de sélectionner un pas de température  $\Delta T$ . Physiquement, la logique voudrait que l’on paramètre  $\Delta T = 0$  K pour simuler un corps pur mais ce n’est pas forcément ce cas qui renvoie l’erreur maximale la plus faible. L’influence du pas de temps est ici beaucoup plus significative que dans le cas du problème de Stefan, surtout pour la formulation Tsource qui renvoie des erreurs plus faibles que la formulation Hsource dans le cas d’un pas de temps plus grand. Concernant le pas d’espace, on notera que l’écart d’erreur entre chaque  $\Delta x$  simulé reste très faible pour les deux formulations dans le cas  $\Delta t = 0.01$  s. Son influence est mieux visible sur la figure 3.16, où l’on peut observer que les erreurs diminuent avec la valeur de  $\Delta x$ .

En ce qui concerne l’erreur moyenne, les mêmes remarques que celles faites sur l’erreur maximale peuvent être appliquées, l’erreur moyenne variant entre  $\approx 0\%$  et  $\approx 4\%$  pour  $\Delta t = 0.01$  s et entre  $\approx 0\%$  et  $\approx 0.5\%$  pour  $\Delta t = 1$  s. On notera tout de même une dispersion importante des résultats avec la formulation Tsource à  $\Delta t = 0.01$  s.

Finalement, l’erreur sur la position de l’interface ; les résultats obtenus avec les deux

formulations se superposent quels que soient le pas de temps et le pas d'espace que l'on considère. L'écart le plus important avec la solution analytique est observé pour le pas d'espace le plus élevé à savoir  $10^{-3}$  s. À noter que l'erreur maximale culmine à 8%, tout comme pour le problème de Stefan. En affinant le maillage on augmente donc la précision de nos simulations. Cependant, on remarque que dès  $\Delta x = 5 \cdot 10^{-4}$  m on atteint la valeur minimum sur l'erreur et que continuer de diminuer la taille de la maille n'impacte plus ou très peu (voir défavorablement) la valeur de l'erreur.

### 3.2.3 Conclusions sur la partie théorique

Le but de cette étude est de proposer une vue d'ensemble sur les techniques de modélisation d'un changement de phase solide/liquide sélectionnées pour nos travaux, afin d'aider dans le choix d'une méthode par rapport à une autre en fonction de la précision numérique requise, du temps et des ressources disponibles. 144 simulations ont alors été réalisées en faisant varier trois paramètres que sont le pas de temps, le pas d'espace et la plage de températures sur laquelle se produit la fusion. L'influence du pas de temps  $\Delta t$  a alors pu être observée, particulièrement dans le cas du problème de Neumann, tout comme l'influence du pas d'espace  $\Delta x$ .

Dans le cas du problème de Neumann, on a pu constater que les erreurs maximales et moyennes les plus faibles étaient obtenues avec le pas de temps le plus grand. C'est une information qui peut s'avérer particulièrement utile dans l'objectif d'optimiser les temps de simulation.

On a également pu constater que sur la détermination de la position de l'interface, qui est une information primordiale dans nos travaux, les deux formulations renvoyaient les mêmes erreurs et ce quel que soit le problème étudié. De plus, on a pu remarquer que cette dernière diminuait lorsque l'on affinaient notre maillage pour atteindre une valeur minimale optimale n'évoluant que peu si l'on continuait à réduire la taille de notre maille.

Il est aussi intéressant de noter que les simulations lancées avec  $\Delta T = 2$  K ne sont pas systématiquement celles pour lesquelles l'erreur constatée est la plus importante, et ce malgré le fait que dans le cas de la modélisation d'un corps pur ces simulations n'aient pas de sens physique.

En croisant les différentes considérations faites sur le pas de temps et le pas d'espace, l'utilisateur est alors à même de paramétrer ses simulations dans l'optique d'optimiser le coût numérique de l'étude menée.

## 3.3 Étude comparative expérimentale

### 3.3.1 Définition du cas test

Après avoir comparé les deux formulations de l'équation de conservation de l'énergie aux solutions analytiques, nous allons maintenant réaliser le même type d'analyse sur un cas de changement de phase dominé par des mouvements convectifs pour des matériaux de

types corps pur.

Dès lors que nous prenons en compte la convection thermique, le champ de température devient dépendant du champ de vitesses (et inversement). De plus, ce type de problème est fortement non linéaire du fait du couplage entre l'enthalpie et la température. Il est donc indispensable de résoudre le système d'EDP complet (équations (2.1) et (2.2) en plus de l'équation (2.11) ou de l'équation (2.22)).

Du fait de la complexité du problème, il n'existe pas de solution analytique. Nous allons donc utiliser les résultats expérimentaux disponibles dans la littérature pour réaliser notre benchmark.

Nous allons considérer deux matériaux, le gallium (un métal) et le PEG-900 (un matériau organique), qui se distinguent essentiellement par leur nombre de Prandtl ( $Pr_{\text{gallium}} = 0.025$  et  $Pr_{\text{PEG900}} = 1190$ ). Dans la littérature, deux classes de matériaux ont principalement été mises à l'étude [203, 204] :

- MCP avec un nombre de Prandtl élevé ( $Pr \approx 10^2$ ), typiquement des paraffines (ex : octadécane) [196, 205, 206] ;
- MCP avec un nombre de Prandtl faible ( $Pr \approx 10^{-2}$ ), typiquement des métaux avec une température de fusion basse (ex : gallium) [3, 207, 208]

Les résultats expérimentaux sur lesquels nous nous sommes basés pour effectuer nos comparaisons sont issus de Gau et Viskanta [3] pour le gallium et de Wang et al. [4] pour le PEG-900.

On considère une cavité en deux dimensions, initialement remplie avec un matériau à l'état solide à une température uniforme. À  $t = 0$  s, la température d'une des parois verticales est fixée à une température  $T_p > T_F$  tandis que l'autre paroi verticale est maintenue à la température initiale  $T_0$ . Les parois horizontales sont quand à elles adiabatiques. L'écoulement est laminaire et l'ensemble des propriétés thermodynamiques sont supposées constantes.

Le domaine modélisé dans nos études est représenté sur la figure 3.21.

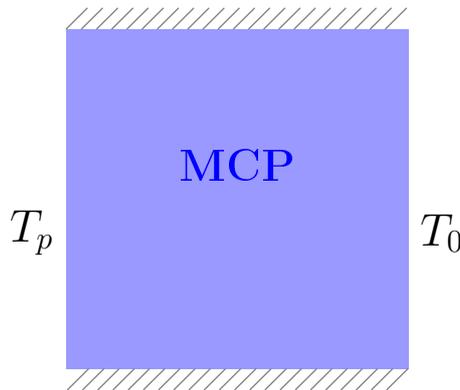


FIGURE 3.21 – Schéma du domaine simulé dans le cadre du benchmark expérimental.

Les caractéristiques géométriques de chaque cas étudiés sont présentés dans le tableau

3.2. Dans le cas du gallium, trois cas sont simulés, chacun correspondant à un rapport d'aspect,  $A = \frac{L_y}{L_x}$ , différent.

Reference	$L_x$	$L_y$
[3]	8.89 cm	6.35 cm
	8.89 cm	4.45 cm
	8.89 cm	2.54 cm
[4]	153 mm	103 mm

TABLE 3.2 – Dimensions du système pour chaque cas étudié dans le cadre du benchmark expérimental

Les propriétés thermodynamiques de PEG-900 sont disponibles dans le tableau 3.1 et celles du gallium dans le tableau 3.3.

$\rho(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	$c_s(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$c_l(\text{J} \cdot \text{kg} \cdot \text{K}^{-1})$	$k(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$
6093	381.5	381.5	32
$L_F(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	$T_F(^\circ\text{C})$	$\beta(\text{K}^{-1})$	$\nu(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$
80 160	29.78	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$2.97 \cdot 10^{-7}$

TABLE 3.3 – Propriétés thermophysiques du gallium [10]

Les conditions aux limites, et le temps de simulation dans chaque cas sont regroupés dans les tableaux 3.4 pour le gallium et 3.5 pour le PEG-900. Dans le cas du PEG-900, on impose comme condition à la limite une température dont la valeur évolue au cours du temps et est calculée via le polynôme présenté dans le tableau 3.5.

Cas	# 1
$T_{\text{init}}(^\circ\text{C})$	28.3
Temps (min)	19
$T_p(^\circ\text{C})$	38

TABLE 3.4 – Conditions aux limites dans le cas du gallium

Les simulations se font en  $2D$  sur le domaine présenté sur la figure 3.21. Concernant le pas d'espace, cinq cas sont simulés :

$$\Delta x = [10^{-4}, 2 \cdot 10^{-4}, 5 \cdot 10^{-4}, 10^{-3}, 2.5 \cdot 10^{-3}] \text{ m}$$

Cas	# 1	# 3	# 5
$T_{\text{init}} (\text{°C})$	20.93	21.38	23.12
Temps (min)	800	400	250
$T_p = At^5 + Bt^4 + Ct^3 + Dt^2 + Et + F$ (°C)			
$A =$	$1,35 \cdot 10^{-12}$	$5,02 \cdot 10^{-11}$	$5,13 \cdot 10^{-10}$
$B =$	$-2,62 \cdot 10^{-9}$	$-5,84 \cdot 10^{-8}$	$-3,80 \cdot 10^{-7}$
$C =$	$1,94 \cdot 10^{-6}$	$2,67 \cdot 10^{-5}$	$1,12 \cdot 10^{-4}$
$D =$	$-7,36 \cdot 10^{-4}$	$-6,02 \cdot 10^{-3}$	$-1,67 \cdot 10^{-2}$
$E =$	0,167	0,684	1,25
$F =$	22,6	22,4	23,5

TABLE 3.5 – Conditions aux limites dans le cas du PEG-900

Nous allons, en plus du pas d'espace, faire varier l'écart de températures  $\Delta T = T_{\text{liq}} - T_{\text{sol}}$  pour la formulation  $T_{\text{source}}$  :

$$\Delta T = [10^{-2}, 5 \cdot 10^{-2}, 10^{-1}, 2 \cdot 10^{-1}, 5 \cdot 10^{-1}, 1, 2] \text{ K}$$

Au total, ce sont 70 simulations qui ont été lancées et post-traitées.

Pour chacune des simulations nous comparerons la position de l'interface à différents instants physiques en fonction des résultats disponibles dans [3] et [4].

### 3.3.2 Résultats

#### 3.3.2.1 Cas du gallium [3]

Dans cette section nous présenterons pour nos analyses uniquement les résultats obtenus pour :

- $\Delta x = 10^{-3} \text{ m}$  ;
- $\Delta T = 0,5$  et  $1 \text{ K}$  dans le cas de la formulation  $T_{\text{source}}$ .

L'ensemble des simulations ont été réalisées avec un pas de temps  $\Delta t = 1 \text{ s}$ .

Les temps de simulations pour ces différents cas sont tous inférieurs à 1 heure.

La position de l'interface solide/liquide à  $t = 2, 6, 10 \text{ min}$  est visible sur les figures 3.22 ( $A = 0,714$ ), 3.23 ( $A = 0,5$ ) et 3.24 ( $A = 0,286$ )<sup>1</sup>. Les ronds correspondent aux résultats à 2 min, les triangles à 6 min et les pentagones à 10 min.

Si l'on observe les résultats sur l'évolution du front de fusion, on remarque qu'au début de la simulation l'interface est plane, presque parallèle à la paroi chauffée. À ces instants

---

1. Pour des raisons de lisibilité des figures, nous avons choisi de présenter les résultats que pour trois instants.

les transferts thermiques sont dominés par la conduction. L'écart observé entre les simulations et l'expérience est dû à plusieurs éléments. Premièrement, la condition à la limite imposée sur la paroi gauche n'est pas exactement la même. En effet dans l'expérience la température  $T_p$  est imposée sur la paroi de la cellule test tandis que dans le cas des simulations, cette température est directement imposée sur le MCP. La deuxième raison est le post-traitement utilisé pour obtenir le profil de l'interface. On trace cette dernière en récupérant les coordonnées des points pour lesquels la fraction massique liquide a une valeur de 0.5, ce qui entraîne forcément une incertitude sur la position exacte de l'interface. Ceci couplé, à des considérations liées à la taille des mailles, explique l'écart observé des les premiers instants de la simulation.

Ensuite, la fusion progressant, un écoulement laminaire 2D mono-cellulaire se met en place dans la partie déjà fondue. Cette étape est mise en évidence par l'apparition d'une interface non linéaire entre le haut et le bas de la cellule test. Ce comportement simulé coïncide avec le comportement expérimental observé dans [3].

Cependant, bien que le comportement global de l'interface soit bien représenté, qualitativement parlant, par nos deux modèles, des différences importantes dans les dynamiques de transferts apparaissent rapidement. En effet, même si aux premiers instants de la simulation la position est presque uniformément la même dans chaque cas, des différences sont rapidement constatées tout au long de l'interface. La position du *coude* d'inflexion de l'interface, qui correspond à la zone où sont présents les rouleaux convectifs (unique selon nos modèles ainsi que l'expérience de Gao et Viskanta, on parle dans ce cas de structure convective mono-cellulaire), se trouve globalement à la même hauteur dans chaque cas.

L'influence du rapport d'aspect  $A = L_y/L_x$  semble quant à lui correspondre aux observations faites par Gau et Viskanta dans [3], à savoir que le rapport d'aspect le plus élevé (figure 3.22) permet de mettre en évidence l'impact de la convection thermique sur la déformation de l'interface, ainsi que l'observation de la recirculation du liquide entre la partie haute et la partie basse du domaine. Le fluide s'échauffe en montant le long de la paroi gauche, puis se refroidit au contact de l'interface solide-liquide. En augmentant la dimension  $L_y$  (et donc la valeur de  $A$ ), on permet au phénomène de recirculation de se développer ce qui a pour effet d'accentuer la déformation de l'interface.

À contrario, pour un faible rapport d'aspect ce phénomène sera moins prononcé. Ceci est particulièrement marqué pour la simulation Hsource où l'on constate, sur la figure 3.24, une interface non déformée, parallèle à la paroi chauffée jusque dans les instants avancés de la simulation. Cela ne signifie pas pour autant qu'aucun effet convectif est mis en jeu, mais que les transferts de chaleur dans la partie basse et la partie haute de la cellule sont équivalents et que donc le front de fusion progresse de manière uniforme.

Considérant ces écarts, il ne semble pas évident qu'un modèle surpasse les autres. Bien que l'on puisse penser que la simulation réalisée à partir de la formulation Hsource soit celle qui colle au mieux aux résultats expérimentaux dans les cas où  $A = 0,714$  et  $A = 0,5$ , cela n'est plus vrai dans le cas où  $A = 0,286$ . Rappelons tout de même que la formulation Tsource que nous avons employé présente l'inconvénient de ne pas simuler un corps pur,

ce qui est le cas du gallium, en étalant la fusion sur une plage de température (0,5 K et 1 K en l'occurrence). Ce constat est d'ailleurs particulièrement visible sur la figure 3.25. Sur cette figure, la zone rouge correspond au matériau liquide ( $Y_l = 1$ ), la zone bleue au matériau solide ( $Y_l = 0$ ) et enfin la zone verte correspond à l'interface de changement de phase ( $0 < Y_l < 1$ ). On peut clairement observer que dans le cas de la formulation Hsource l'interface est nette tandis que dans le cas de la formulation Tsource cette dernière est beaucoup plus diffuse, ce qui est discordant avec la véritable physique du problème.

Il s'agit d'un constat fait à partir de l'observation des résultats obtenus avec un pas de temps de 1 s. Lors de notre étude analytique nous avons pu observer l'influence du pas de temps, c'est pour cela que nous allons maintenant présenter un cas optimisé en terme de discrétisation temporelle.

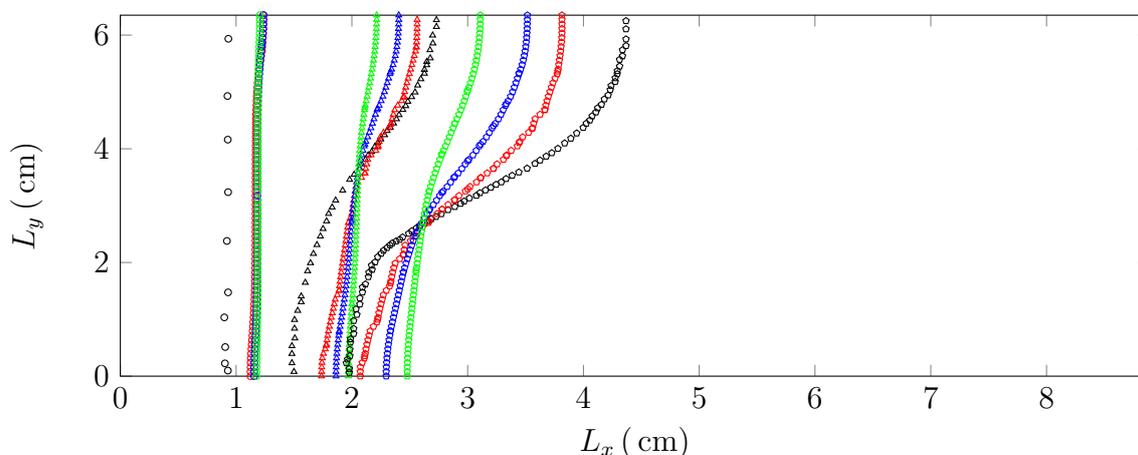


FIGURE 3.22 – Position de l'interface ( $A=0.714$ ) pour [3] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu  $\Delta T = 0,5$  K et vert  $\Delta T = 1$  K).

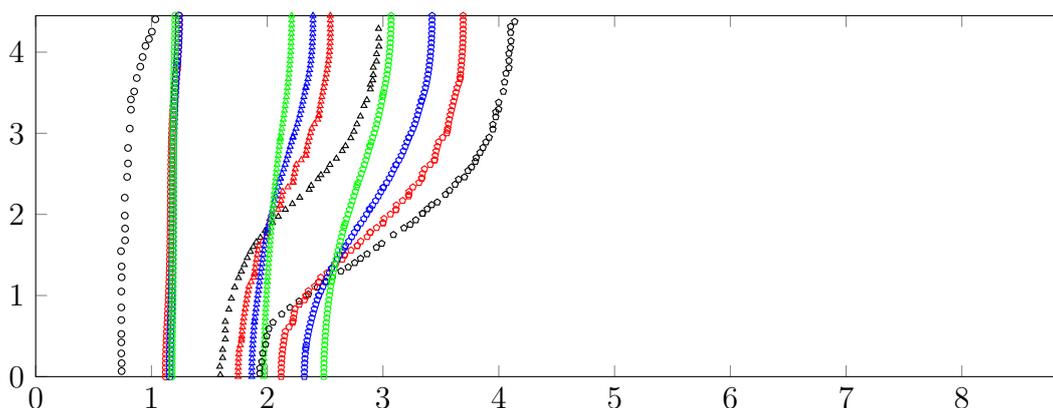


FIGURE 3.23 – Position de l'interface ( $A=0.5$ ) pour [3] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu  $\Delta T = 0,5$  K et vert  $\Delta T = 1$  K).

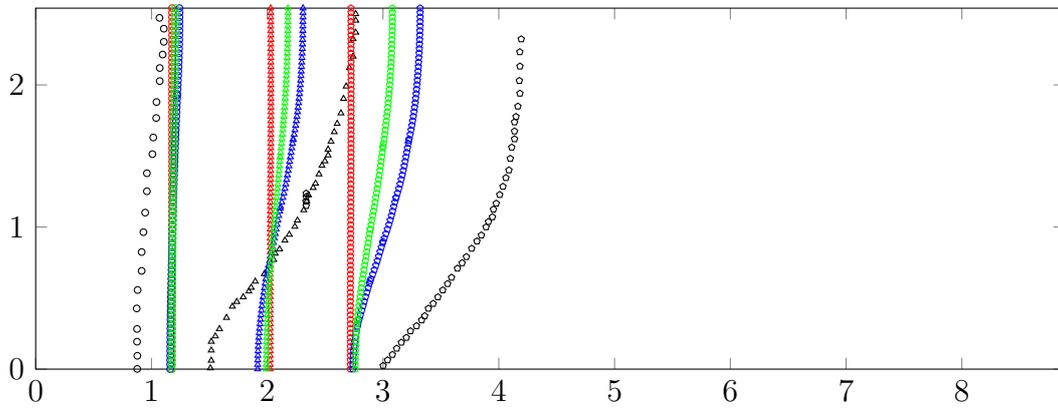


FIGURE 3.24 – Position de l'interface ( $A=0.286$ ) pour [3] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu  $\Delta T = 0,5$  K et vert  $\Delta T = 1$  K).

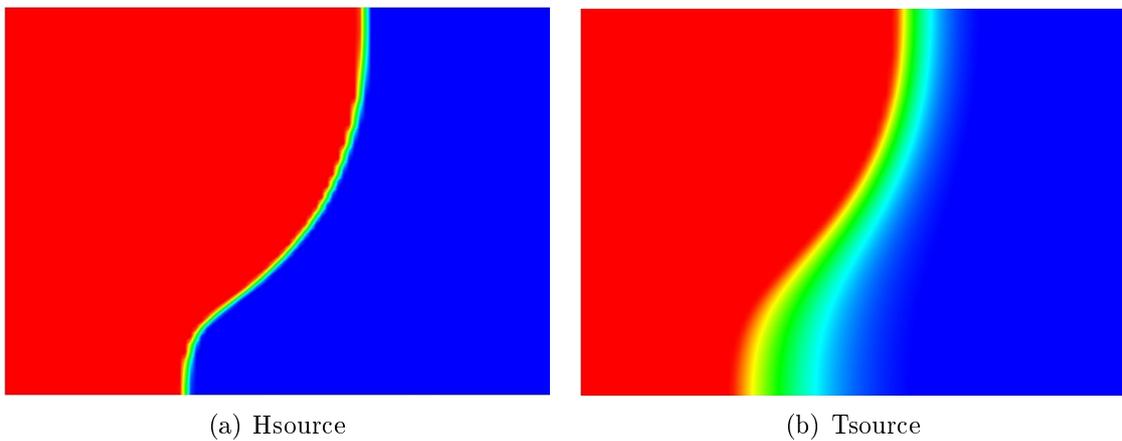


FIGURE 3.25 – Comparaison des champs de fraction volumique  $Y_l$  à  $t = 900s$  pour les formulations Hsource et Tsource à  $\Delta T = 1$  K et  $A = 0,714$ .

### 3.3.2.1.a Cas optimisés

Au vu des précédents résultats, il a été décidé de mener une simulation optimisée pour les formulations Hsource et Tsource. Pour ce faire nous allons uniquement modéliser le domaine 2D où  $A = 0.714$ . Dans les deux cas nous aurons un pas d'espace  $\Delta x = 10^{-3}$  m. Concernant le pas de temps, celui-ci est sélectionné de telle sorte à assurer la stabilité numérique et la précision temporelle optimale de notre simulation. On utilise alors le nombre de courant,  $C_o$ , pour calculer le pas de temps. Pour une cellule, ce dernier est défini comme suit :

$$C_o = \frac{\Delta t |\vec{V}|}{\Delta x} \quad (3.9)$$

avec  $|\vec{V}|$  la norme de la vitesse au travers de la cellule.

La vitesse varie au sein du domaine, et dans le cas d'un écoulement laminaire, on doit s'assurer que  $C_o < 1$  est vérifié dans toutes les cellules. On choisit alors  $\Delta t$  en se basant sur le pire des cas,  $C_o = 1$ , qui correspond aux effets combinés d'une vitesse d'écoulement importante avec des mailles de petites dimensions. Comme le pas d'espace est fixe, la valeur maximale du nombre de courant sera atteinte dans la zone de recirculation du matériau liquide. Ne connaissant pas, à priori, la valeur de la vitesse dans cette zone, nous faisons le choix (très prudent) de prendre  $|\vec{V}| = 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  pour s'assurer que notre nombre de Courant ne dépassera jamais la valeur de 1.

On calcule alors la valeur du pas de temps de la façon suivante :

$$\Delta t = \frac{C_o \Delta x}{|\vec{V}|} = 10^{-3} \text{ s} \quad (3.10)$$

Pour la formulation Tsource, on fixe  $\Delta T = 0.1 \text{ K}$ .

Les conditions initiales ainsi qu'aux frontières de notre système restent inchangées par rapport au cas présenté précédemment.

Sur la figure 3.26<sup>2</sup>, on peut voir la comparaison de l'évolution de la fraction massique liquide  $Y_l$  au cours du temps, pour les deux formulations. Première remarque, l'application d'un  $\Delta T = 0.1 \text{ K}$  permet d'avoir un front de fusion moins étalé comme on pouvait l'observer sur la figure 3.25. On se rapproche ainsi du comportement réel d'un corps pur. Avec ce  $\Delta T$  très petit, la différence avec la formulation Hsource pour laquelle la fusion se fait à une température unique devient minime.

Concernant la fusion du MCP, elle semble progresser de manière identique avec les deux formulations. On peut tout de même noter que le profil du front de fusion présente un angle plus aigu au niveau du point d'inflexion dans le cas Hsource, certainement lié à la modélisation de la fusion à  $T = T_F$ .

Sur la figure 3.27, on peut observer le comparatif des champs de température et de vitesse, à différents instants, entre les formulations Hsource et Tsource.

On constate une bonne concordance entre les deux simulations avec l'apparition d'une

---

2. volFrac et alpha désignant tous les deux la fraction massique liquide  $Y_l$ .

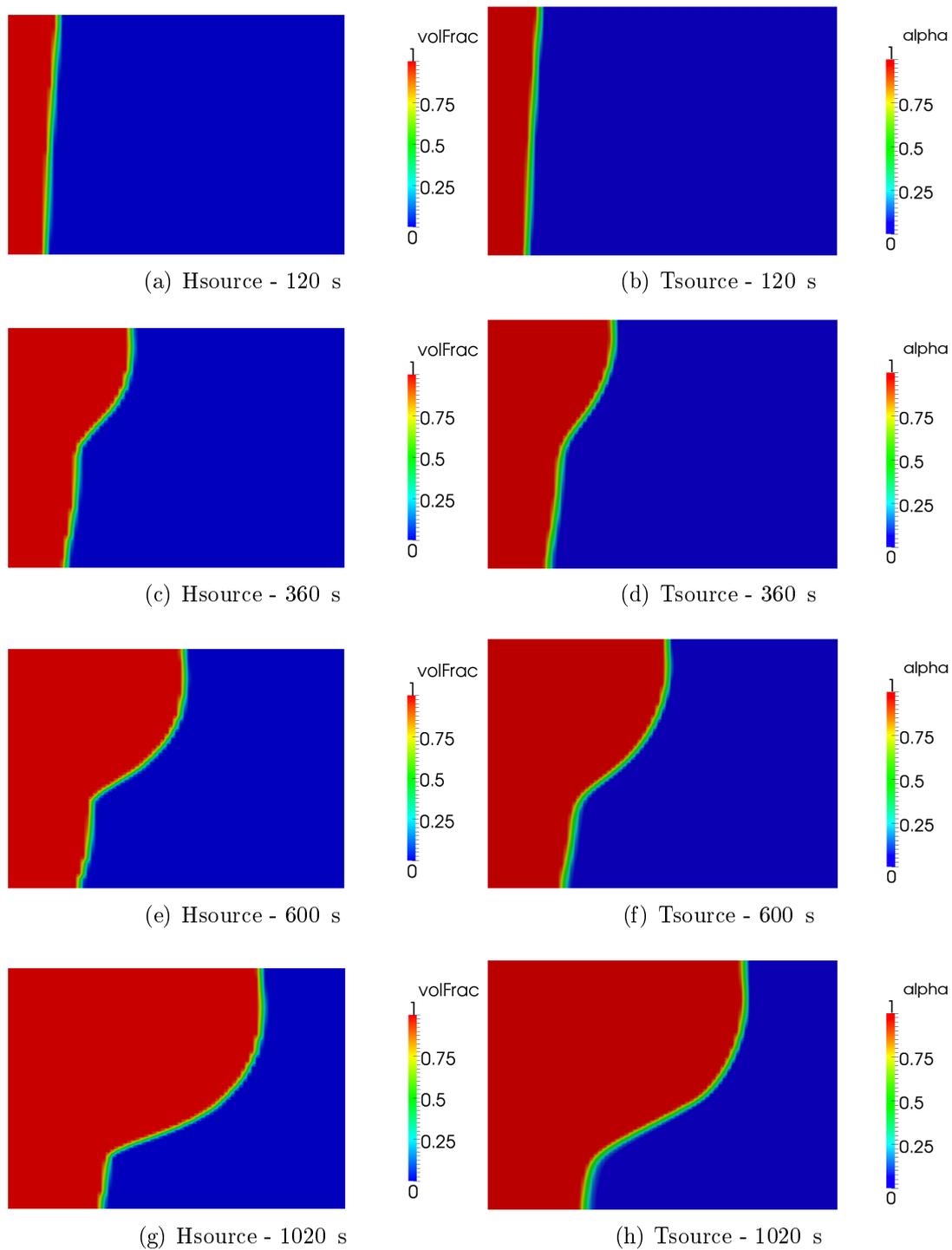


FIGURE 3.26 – Evolution temporelle de la fraction liquide obtenue avec Hsource et Tsource avec  $\Delta x = 10^{-3}$  m et  $\Delta t = 10^{-3}$  s.

cellule convective située en haut à gauche du domaine qui va se développer au cours du temps. Le fluide s'échauffe le long de la paroi gauche en montant, puis se refroidit au contact de l'interface solide-liquide en descendant. On remarque également une bonne cohésion sur les niveaux de températures dans le domaine.

En complément de la figure 3.27, on peut voir sur la figure 3.28 la comparaison de l'évolution temporelle de la vitesse pour les deux formulations. Les schémas de recirculation du fluide  $y$  sont mis en évidence.

Sur la figure 3.29 on peut voir le comparatif de l'évolution de l'interface solide-liquide entre les mesures expérimentales de Gau [3] et les formulations Hsource et Tsource à  $t = 120$  s (ronds),  $t = 360$  s (triangles),  $t = 600$  s (pentagones) et  $t = 1020$  s (carrés). Comparativement aux résultats présentés précédemment sur la figure 3.22 ceux-ci sont biens meilleurs. Cette fois, on constate une bonne adéquation entre la simulation et l'expérience. Les écarts importants que l'on observait précédemment sont grandement réduits lorsque l'on optimise nos simulations du point de vue du pas de temps. On met ainsi en évidence l'influence primordiale de la discrétisation en temps là où tout à l'heure nous attribuions les écarts observés à des différences dans la dynamique de transfert dû à une condition à la limite en paroi gauche sur-évaluée.

Il est également logique que dans le cas de la formulation Tsource on obtienne de meilleurs résultats en fixant un  $\Delta T$  proche de 0, puisque l'on se rapproche ainsi de la simulation d'un corps pur.

Si l'on prend en compte l'ensemble des résultats de cette section, on peut réaliser une analyse des phénomènes thermiques observés. Dans les premiers instants de la simulation, la forme de l'interface de changement de phase est plane et presque parallèle à la paroi chauffée. À ce moment les transferts sont dominés par la conduction. La fusion progressant, on va alors constater la déformation de l'interface solide/liquide caractérisant une structure d'écoulement type convection naturelle dans une cavité rectangulaire, i.e, le fluide s'élève en température le long de la paroi chauffée puis se refroidit au niveau de l'interface de fusion et descend le long de cette dernière. Le fluide est donc à une température plus élevée dans la partie haute de la cavité et c'est à ce niveau que le taux de fusion est le plus important. C'est donc logiquement dans cette zone que l'on observe la déformation de l'interface la plus importante. À contrario, du fait du schéma de recirculation du liquide, c'est dans la partie basse de la cavité que les transferts thermiques sont les plus faibles.

On observe toujours des écarts entre l'expérience et les simulations, mais ceux-ci restent assez faibles. À  $t = 120$  s, l'erreur maximale absolue observée pour les deux formulations est de  $\approx 0.15$  cm soit une erreur relative par rapport à l'expérience de 2%. Nous sommes de l'ordre de l'incertitude numérique (erreur liée à la taille de la maille mais aussi au post-traitement réalisé pour obtenir la position de l'interface) et donc ces résultats sont tout à fait acceptables.

Notons, avant de poursuivre nos études sur un autre matériau, que la simulation de la fusion du gallium pendant 17 min correspond à un temps de simulation d'environ 30 h,

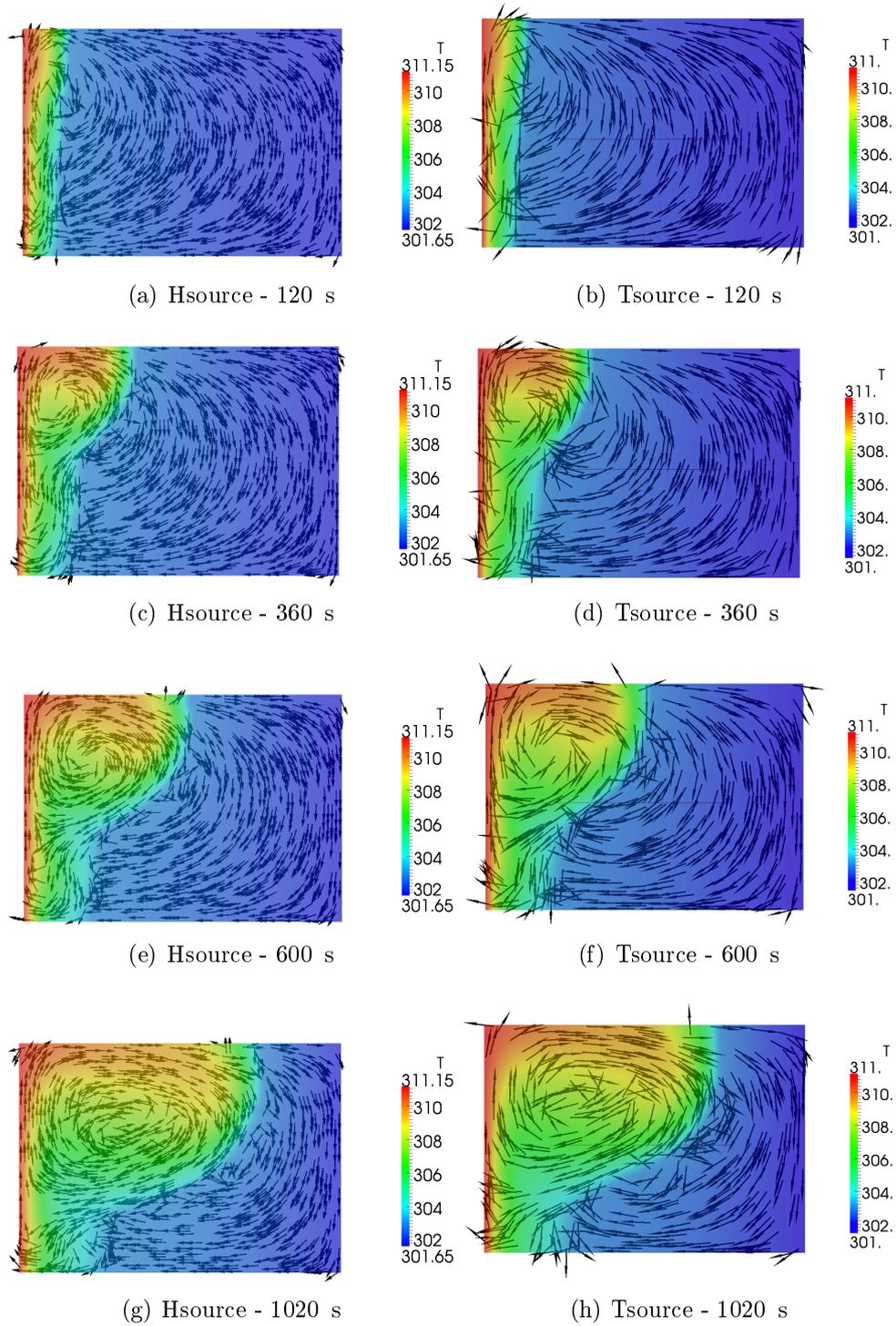


FIGURE 3.27 – Évolution temporelle du champ de température et de vitesse obtenus avec Hsource et Tsource avec  $\Delta x = 10^{-3}$  m et  $\Delta t = 10^{-3}$  s.

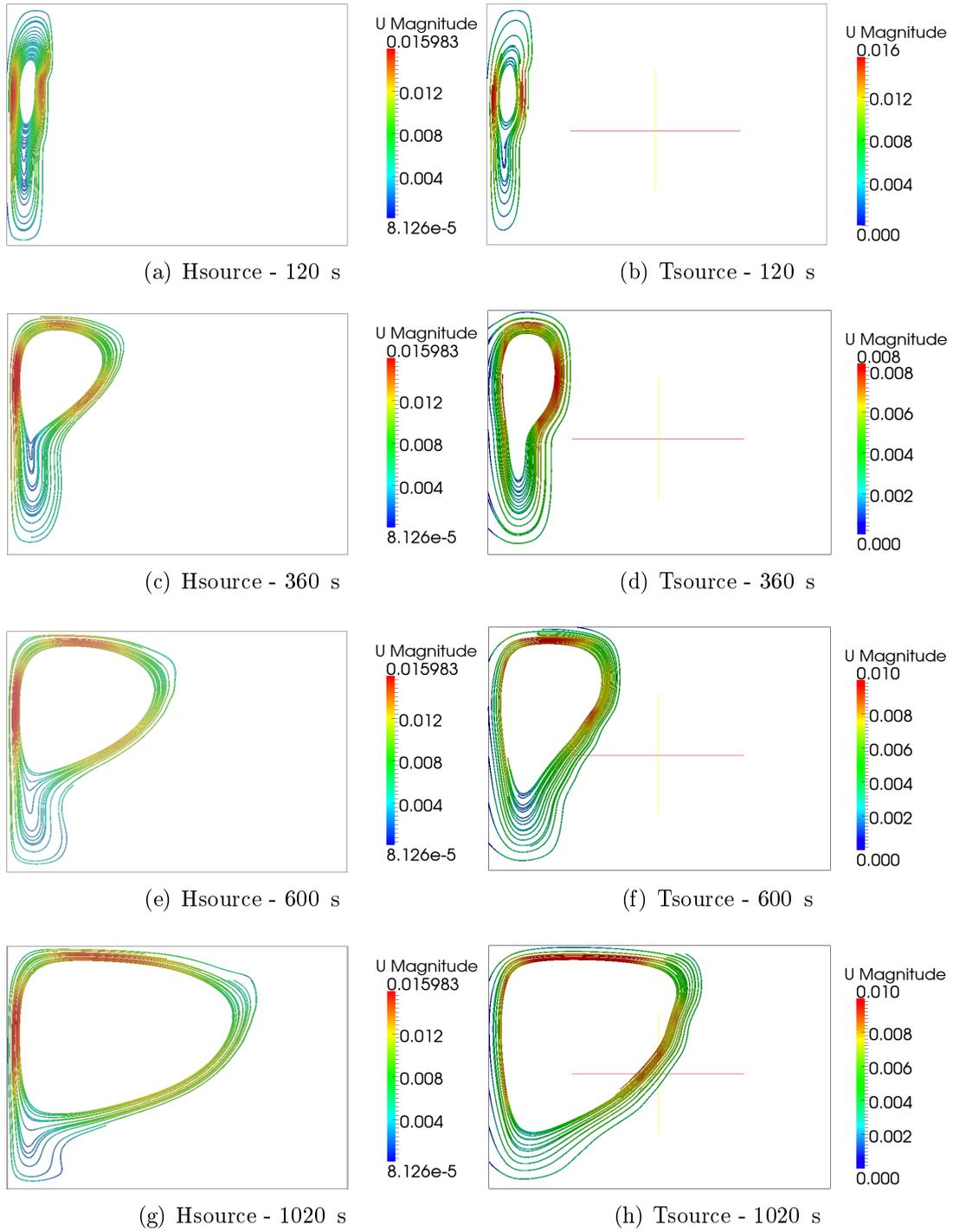


FIGURE 3.28 – Évolution temporelle de la vitesse obtenue avec Hsource et Tsource avec  $\Delta x = 10^{-3}$  m et  $\Delta t = 10^{-3}$  s.

dans le cas optimisé. Nous reviendrons sur ce point dans la discussion qui conclura cette section.

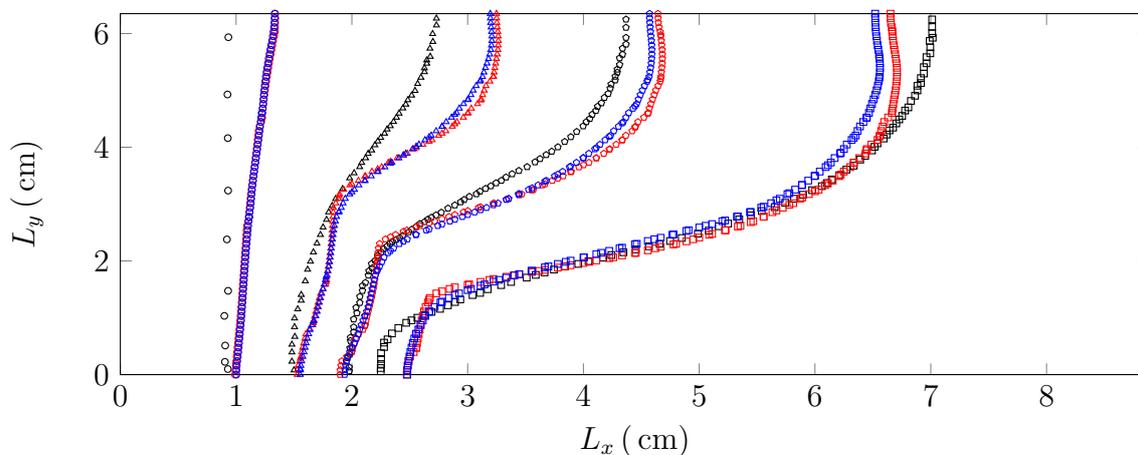


FIGURE 3.29 – Position de l’interface ( $A=0.714$ ) pour [3] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu  $\Delta T = 0.1$  K) avec  $\Delta x = 10^{-3}$  m et  $\Delta t = 10^{-3}$  s à  $t = 120$  s (ronds),  $t = 360$  s (triangles),  $t = 600$  s (pentagones) et  $t = 1020$  s (carrés).

En plus des divers éléments de simulation déjà présentés, on peut observer sur la figure 3.30, le comparatif de la position de l’interface solide-liquide entre l’expérience de Gau [3] et la formulation Hsource pour un rapport d’aspect  $A = 0.286$ .

Là où précédemment nous avions une interface qui demeurait plane et linéaire tout au long de la simulation avec la formulation Hsource (figure 3.24), on observe maintenant un comportement simulé bien plus proche de l’expérience. On démontre ainsi une nouvelle fois l’importance de la discrétisation en temps.

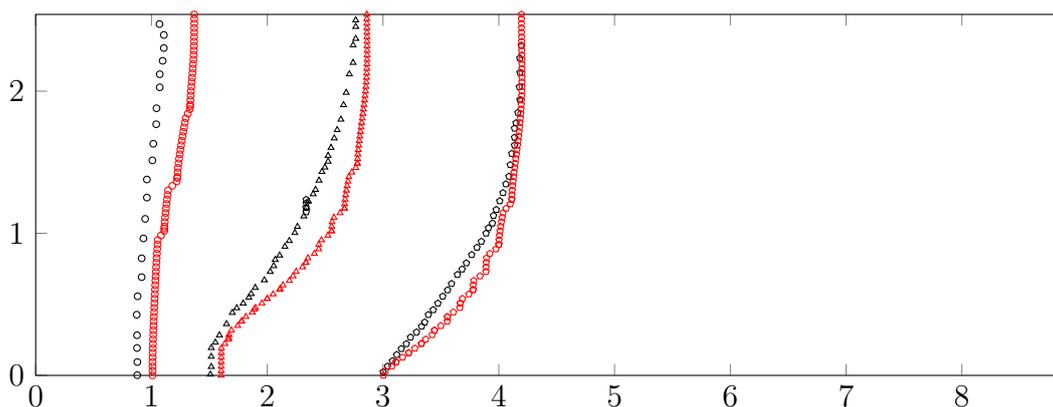


FIGURE 3.30 – Position de l’interface ( $A=0.286$ ) pour [3] (noir) et pour la formulation Hsource (rouge) avec  $\Delta x = 10^{-3}$  m et  $\Delta t = 10^{-3}$  s à  $t = 2$  min (ronds), à  $t = 6$  min (triangles) et à  $t = 11$  min (pentagones).

### 3.3.2.2 Cas du PEG-900 [4]

Dans cette section nous présenterons pour nos analyses uniquement les résultats obtenus pour :

- $\Delta x = 10^{-3}$  m ;
- $\Delta T = 0.5$  et 1 K dans le cas de la formulation Tsource.

L'ensemble des simulations présentées dans la suite ont été réalisées avec un pas de temps  $\Delta t = 1$  s.

Notons que les simulations ont toutes tourné en moins d'une heure.

La position de l'interface solide/liquide à  $t = 3, 6, 12$  h dans le cas #1 et à  $t = 1, 2, 3$  h dans le cas #5, est visible sur les figures 3.31 et 3.32.

Premier constat, les dynamiques de transferts dans le cas de nos modèles, que ce soit Hsource ou Tsource, sont largement sur-évaluées. Cela est dû aux conditions aux limites utilisées dans OpenFOAM où l'on impose une température de paroi, variant au cours du temps, directement sur le matériau alors que dans l'expérience [4] ce flux est imposé en paroi de la cellule test. On en arrive alors à observer des écarts importants allant jusqu'à  $\approx 60\%$  dans le cas #1 à  $t = 12$  h. Il importera donc ici de relancer ces simulations en prenant en compte la diffusion thermique dans le solide constituant la paroi de la cavité afin d'obtenir des résultats corrects d'un point de vu quantitatif<sup>3</sup>.

Ceci étant dit, les différences sur la position de l'interface sont essentiellement présentes dans la partie haute du domaine simulé, les écarts constatés étant beaucoup moins important en partie basse ( $\approx 30\%$  dans le cas #1 à  $t = 12$  h), ce qui est normal étant donné que c'est là que la fusion est la moins importante. De plus le profil de l'interface de changement de phase est qualitativement représenté si l'on observe les points d'inflexions correspondant aux zones de recirculation du liquide.

Maintenant concernant la dispersion des résultats entre nos deux modèles, on constate qu'elles sont moins importantes que dans le cas des simulation pour le gallium. Notamment, les différences entre les deux plages de températures pour la formulation Tsource sont beaucoup moins marquées et cela tout particulièrement dans la partie haute du domaine où le phénomène de recirculation du liquide intervient (ceci est également vrai si l'on compare les résultats obtenus avec les formulations Tsource et Hsource) et où donc les phénomènes convectifs sont les plus importants et où il est donc nécessaire d'avoir une bonne résolution des couches limites thermique et dynamique.

En  $y = 0$  mm, dans le cas #1 à  $t = 12$  h, on calcule un écart  $\frac{Position_{\text{expérience}}(x,y=0) - Position_{\text{numérique}}(x,y=0)}{Position_{\text{expérience}}(x,y=0)} \approx 10\%$  entre la formulation Tsource à  $\Delta T = 0,5$  K et celle à  $\Delta T = 1$  K, et un écart  $\approx 30\%$  entre la formulation Hsource et Tsource à  $\Delta T = 0.5$  K et un écart  $\approx 60\%$  avec celle à

---

3. Ceci n'est pas possible dans la version 2.2.1 d'OpenFOAM dans laquelle nous avons implémenté nos modèles. La version 2.3.0 mise en ligne courant 2014 permet ce type de simulations.

$\Delta T = 1 \text{ K}$ .

En revanche, en  $y = 103 \text{ mm}$  (toujours dans le même cas et au même instant), on calcule un écart  $\approx 0,2\%$  entre la formulation Tsource à  $\Delta T = 0.5 \text{ K}$  et celle à  $\Delta T = 1 \text{ K}$ , et un écart  $\approx 0,1\%$  entre la formulation Hsource et Tsource à  $\Delta T = 0.5 \text{ K}$  et un écart  $\approx 0.4\%$  avec celle à  $\Delta T = 1 \text{ K}$ .

Encore une fois, et en gardant à l'esprit les écarts de résultats constatés, il n'est pas possible de désigner de manière claire quel modèle est préférable à l'autre pour la simulation de ce type de problème de changement de phase. La seule différence dans la description mathématique du problème ne suffit à sélectionner un modèle plutôt qu'un autre. Il importe alors de réaliser une étude paramétrique sur le pas de temps et le pas d'espace. Dans notre cas nous avons fait varier le pas d'espace ( $\Delta x = [10^{-4}, 2 \cdot 10^{-4}, 5 \cdot 10^{-4}, 10^{-3}, 2.5 \cdot 10^{-3}] \text{ m}$ ) et nous avons pu constater que pour des  $\Delta x$  petits, la formulation Hsource renvoyait de meilleurs résultats notamment sur la description du profil de l'interface. Une explication apportée à ce constat est que, dans le cas de la formulation Tsource, l'on modélise le changement de phase sur une plage de températures et que donc lorsque le maillage est fin voir très fin, la *mushy region* (qui sépare la zone liquide du solide) est diffuse sur plusieurs mailles, entraînant des difficultés dans la résolution en plus de ne pas avoir de sens physique.

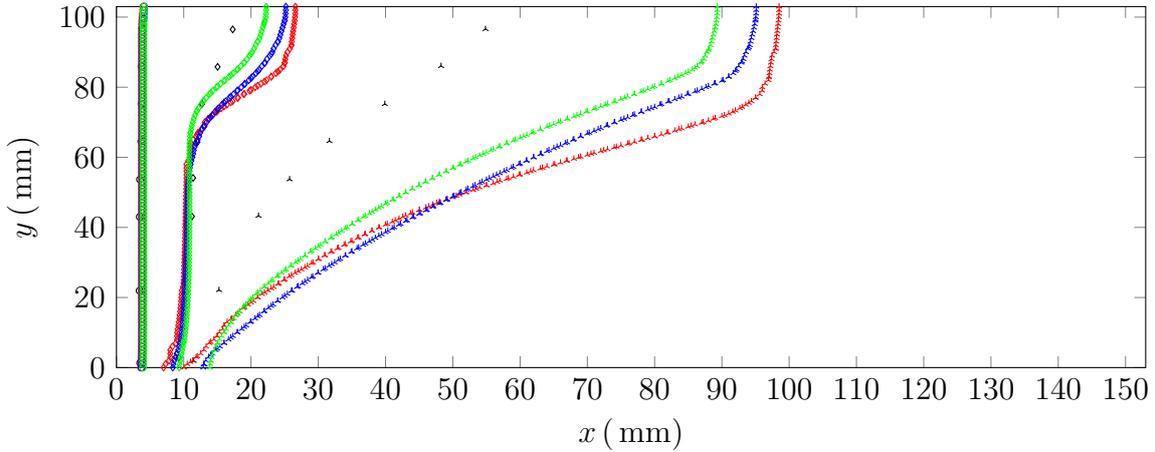


FIGURE 3.31 – Position de l'interface (cas #1) pour [4] et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu  $\Delta T = 0.5 \text{ K}$  et vert  $\Delta T = 1 \text{ K}$ ) à  $t = 3 \text{ h}$  (ronds), à  $t = 6 \text{ h}$  (diamants) et à  $t = 12 \text{ h}$  (étoiles).

### 3.3.2.2.a Cas optimisés

Tout comme pour le gallium, il a été décidé de mener une simulation optimisée pour les formulations Hsource et Tsource. Pour se faire nous allons uniquement modéliser le cas #5 avec un pas d'espace  $\Delta x = 10^{-3} \text{ m}$ .

Concernant le pas de temps, celui-ci est une nouvelle fois sélectionné de telle sorte à

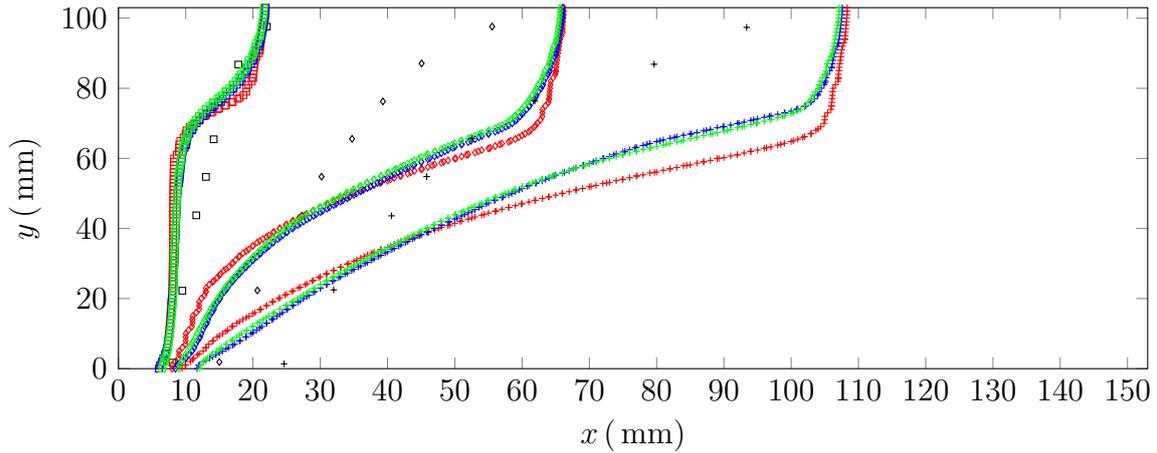


FIGURE 3.32 – Position de l’interface (case #5) pour [4] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu  $\Delta T = 0.5$  K et vert  $\Delta T = 1$  K) à  $t = 1$  h (carrés), à  $t = 2$  h (diamants) et à  $t = 3$  h (croix).

assurer la stabilité numérique et la précision temporelle optimale de notre simulation. On utilise de nouveau le nombre de courant,  $C_o$ , pour calculer le pas de temps :

$$\Delta t = \frac{C_o \Delta x}{|\vec{V}|} = 10^{-3} \text{ s} \quad (3.11)$$

Pour la formulation Tsource, on fixe  $\Delta T = 0.1$  K.

Les conditions initiales ainsi qu’aux frontières de notre système restent inchangées par rapport au cas #5 présenté précédemment.

Notons que la simulation de la fusion du PEG-900 pendant 2 h correspond à un temps de simulation d’environ 100 h, dans le cas optimisé.

Sur la figure 3.33, on peut voir la comparaison de l’évolution de la fraction massique liquide  $Y_l$  au cours du temps, pour les deux formulations. Concernant la fusion du MCP, on remarque tout de suite des différences beaucoup plus prononcées entre les deux formulations, par rapport à la simulation du gallium. L’observation des résultats pour les instants 5400 s et 7200 s laisse à penser que dans le cas de la formulation Tsource la cellule convective n’est pas confinée en haut à gauche du domaine simulé, alors que dans le cas de la formulation Hsource on retrouve un comportement similaire à celui que l’on avait pu observer avec le gallium. Gobin et al. [204] ont également constaté un comportement du front de fusion similaire dans le cas de la formulation enthalpique, qu’ils ont attribué à une résolution spatiale insuffisante. On remarque également que la fusion semble progresser moins rapidement avec Hsource, la différence entre la position de l’interface à 5400 s et 7200 s étant moins marquée que pour la formulation Tsource.

Sur la figure 3.34, on peut observer le comparatif des champs de température et de vitesse, à différents instants, entre les formulations Hsource et Tsource.

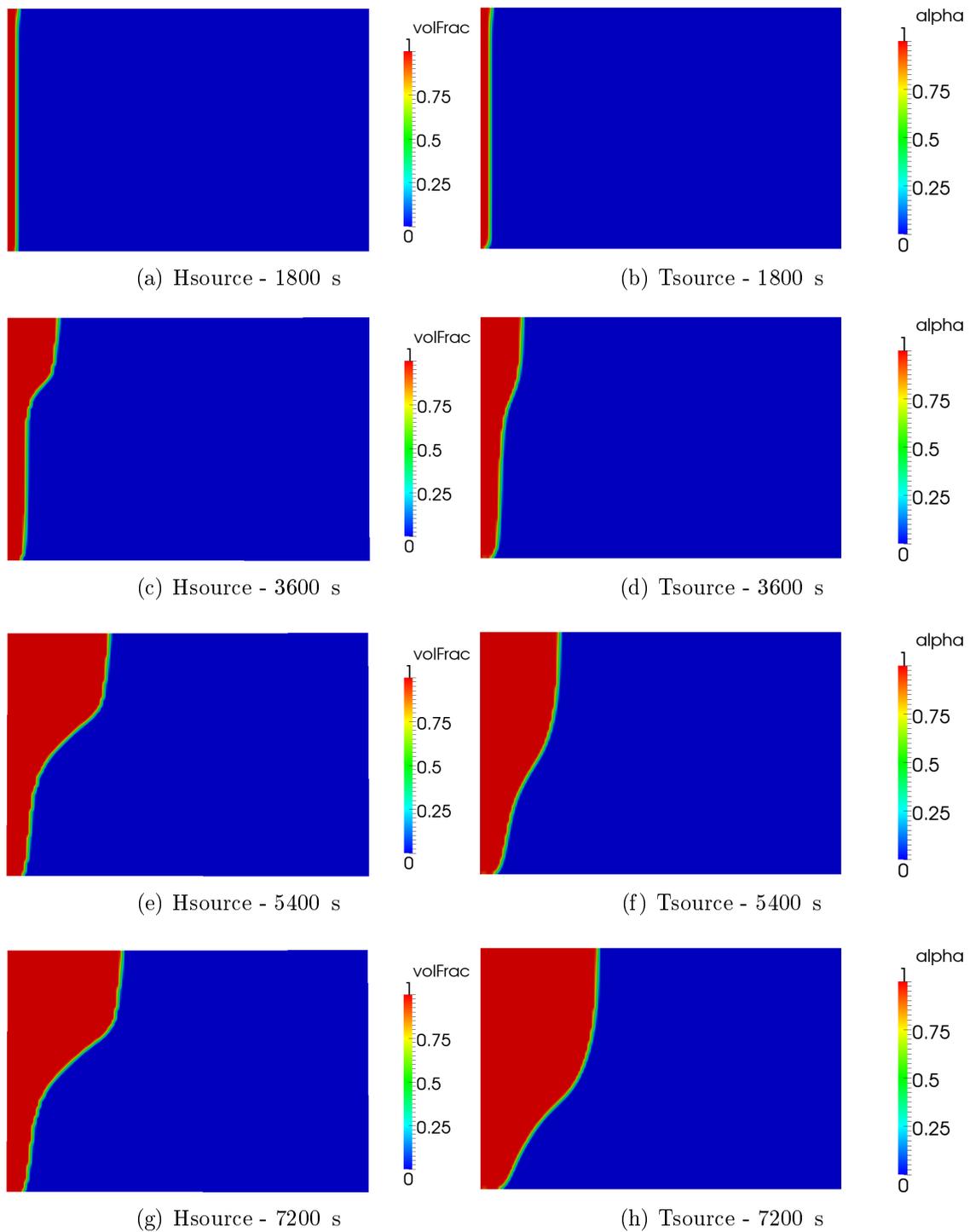


FIGURE 3.33 – Évolution temporelle de la fraction liquide obtenue avec Hsource et Tsource avec  $\Delta x = 10^{-3}$  m et  $\Delta t = 10^{-3}$  s.

Dans le cas d'un matériau avec un nombre de Prandtl élevé, le profil de température dans le fluide est fortement influencé par le profil de vitesse. On observe ici une excellente concordance entre les deux formulations concernant les niveaux de températures. Les phénomènes de recirculation du fluide (également visible sur la figure 3.34) semblent également correspondre dans les deux cas. On ne voit pas ici apparaître de cellule convective localisée dans la partie haute du domaine simulé, comme cela pouvait être le cas avec le gallium. La différence entre les deux formulations réside dans le fait que la fusion dans la partie basse du domaine est beaucoup plus prononcée dans le cas de la simulation avec Tsource.

Sur la figure 3.36 on peut voir le comparatif de l'évolution de l'interface solide-liquide entre les mesures expérimentales de Wang et al [4] et les formulations Hsource et Tsource à  $t = 1800$  s (ronds),  $t = 3600$  s (triangles),  $t = 5400$  s (pentagones) et  $t = 7200$  s (carrés). Comparativement aux résultats présentés précédemment sur la figure 3.32 ceux-ci sont biens meilleurs. Une nouvelle fois, les écarts importants que l'on observait précédemment sont grandements réduits lorsque l'on optimise nos simulations du point de vue du pas de temps.

Cependant, même si aux premiers instants de la simulation, les deux formulations coïncident parfaitement avec l'expérience, dès lors que la convection thermique devient le phénomène dominant les transferts, des différences fortes apparaissent au niveau du profil de l'interface de fusion.

À  $t = 2$  hr, là où l'on observe le plus fort décalage entre les simulations et l'expérience, en  $y = 103$  mm l'écart en absolu entre Hsource et Tsource est de  $\approx 1$  mm soit un écart relatif de  $\approx 2\%$  par rapport à Tsource. Toujours en  $y = 103$  mm, l'écart en absolu entre Hsource et l'expérience est de  $\approx 11$  mm et de  $\approx 10$  mm entre Tsource et l'expérience soit un écart relatif par rapport à l'expérience de  $\approx 18\%$  pour Hsource et de  $\approx 19\%$  pour Tsource.

Maintenant si l'on se positionne en  $y = 50$  mm, l'écart en absolu entre Hsource et Tsource est de  $\approx 20$  mm soit un écart relatif de  $\approx 48\%$  par rapport à Tsource. L'écart en absolu entre Hsource et l'expérience est de  $\approx 56$  mm et de  $\approx 7$  mm entre Tsource et l'expérience soit un écart relatif par rapport à l'expérience de  $\approx 56\%$  pour Hsource et de  $\approx 15\%$  pour Tsource.

### 3.3.3 Conclusions sur la partie expérimentale

Avant toute chose, il est important de rappeler que la nature même du problème étudié, à savoir la fusion d'un corps pur, est défavorable aux méthodes à domaine unique que nous utilisons dans nos études. Cependant ces dernières sont beaucoup plus polyvalentes. C'est pour cette raison que nous avons choisi de travailler avec ces méthodes. En particulier les méthodes de *front tracking* réussiront à reproduire fidèlement le profil de l'interface de fusion d'un corps pur, mais seront moins précises lors de la simulation de la transition solide-liquide si celle-ci est diffuse sur une plage de températures.

Il faut donc garder cet élément à l'esprit lorsque l'on observe les différents résultats et remarques de cette section.

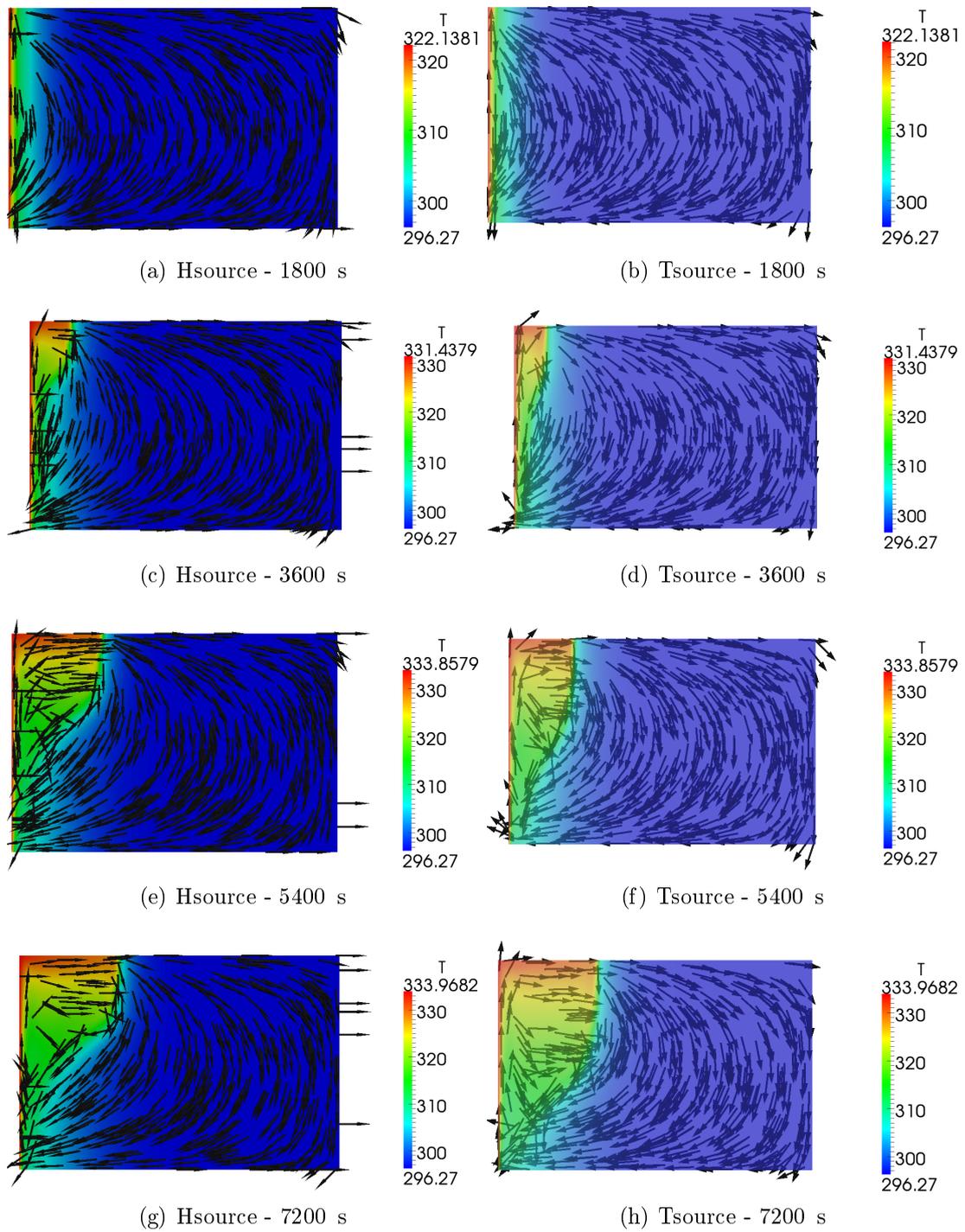


FIGURE 3.34 – Évolution temporelle du champ de température et de vitesse obtenus avec Hsource et Tsource avec  $\Delta x = 10^{-3}$  m et  $\Delta t = 10^{-3}$  s.

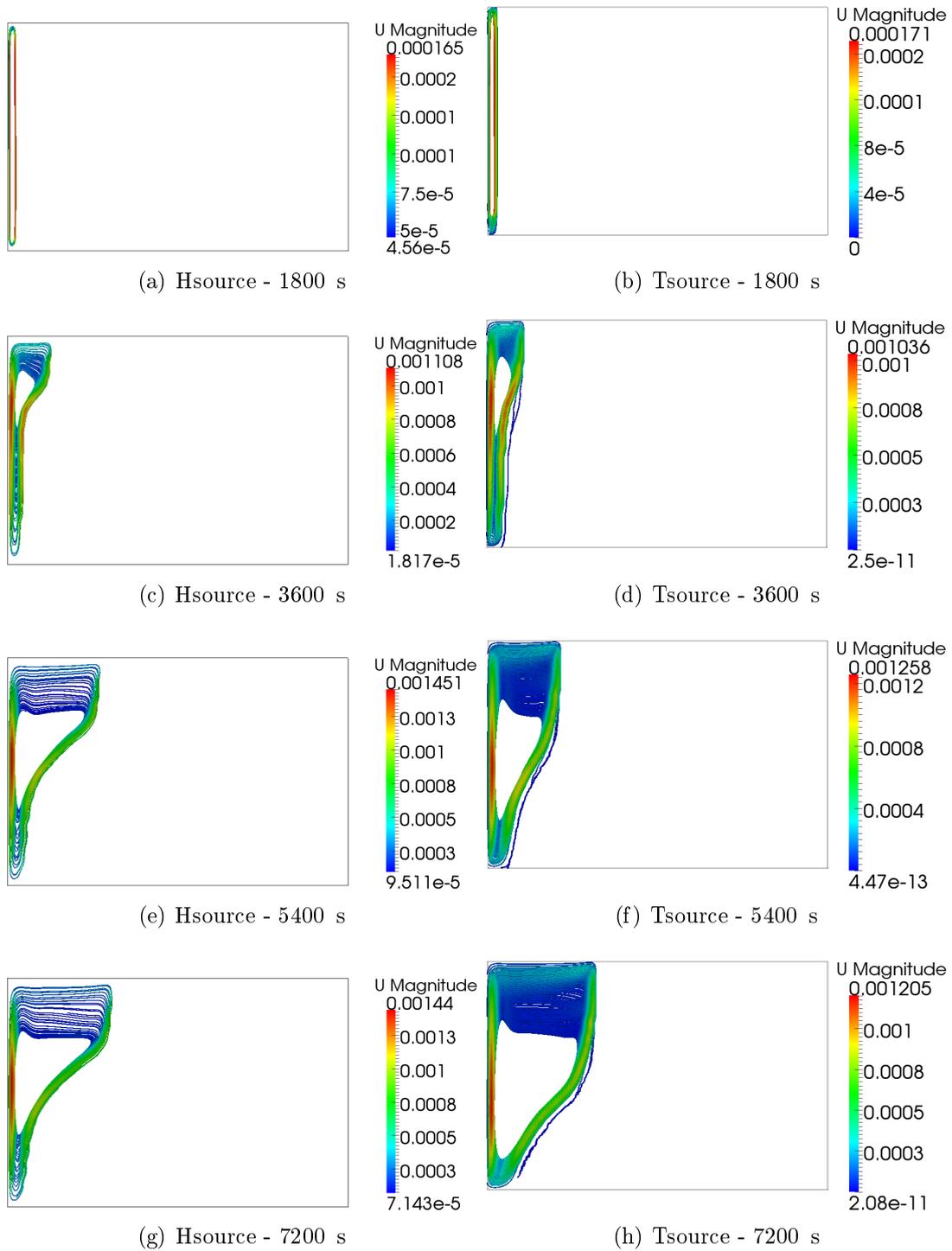


FIGURE 3.35 – Évolution temporelle de la vitesse obtenue avec Hsource et Tsource avec  $\Delta x = 10^{-3}$  m et  $\Delta t = 10^{-3}$  s.

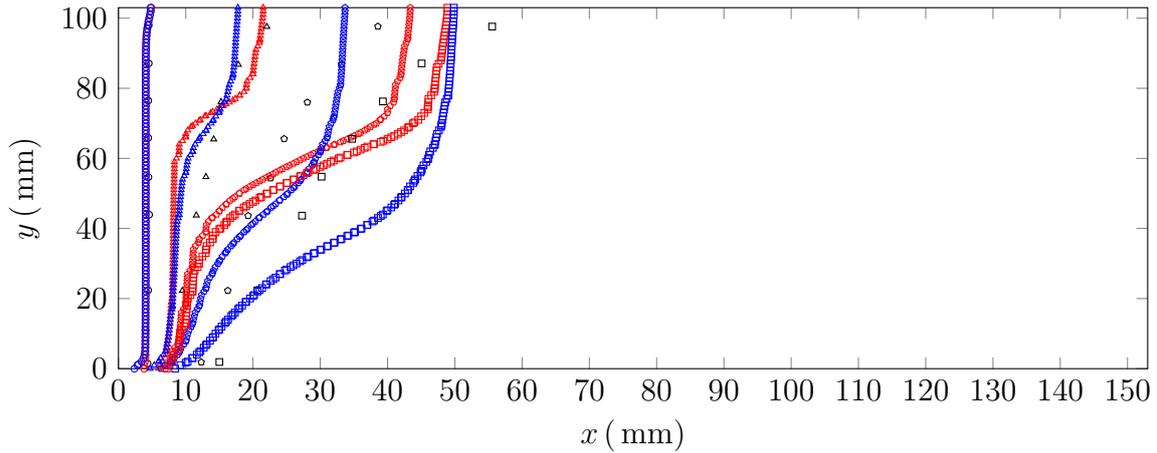


FIGURE 3.36 – Position de l’interface (cas #5) pour [4] (noir) et pour les formulations Hsource (rouge) et Tsource (bleu  $\Delta T = 0.1 \text{ K}$ ) avec  $\Delta x = 10^{-3} \text{ m}$  et  $\Delta t = 10^{-3} \text{ s}$  à  $t = 0.5 \text{ hr}$  (ronds), à  $t = 1 \text{ hr}$  (triangles), à  $t = 1.5 \text{ hr}$  (pentagones) et à  $t = 2 \text{ hr}$  (carrés).

Autre point intéressant à prendre en compte, les durées des simulations qui varient fortement entre les cas classiques et les cas optimisés que nous avons réalisés. C’est une information qu’il est primordiale de garder à l’esprit lorsque l’on débute un travail numérique. Comme on a pu le voir, le lancement d’un cas optimisé est particulièrement coûteux en terme de temps de simulation. Certes le gain sur les résultats est clairement visible mais de tels temps de simulations peuvent s’avérer problématiques en fonction des projets.

Le pas d’espace joue également un rôle majeur. On a pu constater sur le cas optimisé du PEG-900, avec la formulation Hsource, qu’une mauvaise détermination du profil de l’interface de changement de phase était liée à une taille de maille trop importante (cf. conclusions de Gobin et al [204]). C’est pour cela que nous avons mené une étude sur l’influence du pas d’espace qui sera présentée dans le cadre d’un article réalisé en partenariat avec une équipe du laboratoire allemand ZET de l’Université de Bayreuth. Dans cette étude sont également étudiés les formulations à maillage fixe présentées dans le chapitre 1.

Dans ce chapitre nous nous sommes focalisés sur les formulations mathématiques d’un problème de changement de phase. Dans la suite, nous faisons le choix de travailler uniquement avec la formulation Hsource de l’équation de conservation de l’énergie et ce dans le but de se démarquer le plus possible des modèles déjà présents dans le commerce (FLUENT utilise pour la modélisation d’un problème de changement de phase solide-liquide la formulation Tsource). Dans le prochain chapitre, notre attention va se porter sur la fermeture thermodynamique du problème, à savoir la relation qui permet de relier l’enthalpie à la température, et voir quelle influence cette dernière peut avoir sur la simulation du fonctionnement d’un système de stockage thermique par chaleur latente.



# Chapitre 4

## Analyse numérique de l'influence de la fonction $h(T)$ sur les processus de charge et de décharge d'un système de stockage thermique par chaleur latente

### 4.1 Avant-propos

Le but de l'étude menée dans ce chapitre est d'analyser les performances d'une solution de stockage thermique par chaleur latente au travers de la modélisation des phénomènes thermiques et hydrauliques. Au delà de ces considérations, le point qui a focalisé notre attention dans cette section du manuscrit est de démontrer l'influence que peut avoir le type de modélisation et surtout le type de fermeture thermodynamique (fonction  $h(T)$  selon que l'on considère un corps pur ou un binaire) sur le fonctionnement du stockage. Nous verrons que cette dernière impacte directement la dynamique, l'état prédit du stock et, si on élargit le spectre de notre réflexion, le contrôle commande de l'installation et bien sûr ses performances réelles.

Étant donné que les propriétés thermophysiques des MCP sont des données d'entrées essentielles dans notre modèle, ce dernier va nous permettre de mettre en évidence l'importance d'une bonne détermination de ces propriétés et surtout de l'utilisation d'un modèle thermodynamique approprié.

Dans le chapitre précédent nous comparions deux formulations pour l'équation de conservation de l'énergie. Ici nous allons uniquement utiliser celle que nous avons désigné par Hsource.

Par commodité pour le lecteur, on rappelle ici la formulation de l'équation de conservation de l'énergie que nous avons sélectionnée pour modéliser le MCP.

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \vec{\nabla} \cdot (h \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) \quad (4.1)$$

Dans la suite nous allons donc tester deux relations reliant l'enthalpie à la température (fermeture thermodynamique de notre système), l'une dans le cas d'un corps pur et l'autre

dans le cas d'une solution binaire.

L'expression de l'enthalpie dans le cas d'un corps pur est donnée par l'équation (4.2) :

$$h = \begin{cases} h_{\text{ref}} + c_s (T - T_{\text{ref}}) & \text{si } T < T_F \\ h_{\text{ref}} + c_s (T_F - T_{\text{ref}}) + Y_l L_F & \text{si } T = T_F \\ h_{\text{ref}} + c_s (T_F - T_{\text{ref}}) + L_F + c_l (T - T_F) & \text{si } T > T_F \end{cases} \quad (4.2)$$

Pour une solution binaire on a l'expression suivante (4.3) :

$$h = \begin{cases} h_{\text{ref}} + c_s (T - T_E) & \text{si } T \leq T_E \\ h_{\text{ref}} + \text{const1} + (T_{F,w} - T_F) \left( \frac{L_{F,w}}{T_{F,w} - T} \right) \\ \quad + c_s (T + (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T)) - c_l (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T) & \text{si } T_E \leq T \leq T_F \\ h_{\text{ref}} + c_l (T - T_F) + \text{const2} & \text{si } T > T_F \end{cases} \quad (4.3)$$

Avec :

$$\begin{aligned} \text{const1} = & L_E - \left( (T_{F,w} - T_F) \left( \frac{L_{F,w}}{T_{F,w} - T_E} \right) + c_s (T_E + (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_E)) \right) \\ & - c_l (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_E) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Et :

$$\begin{aligned} \text{const2} = & c_s (T_F + (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_F)) \\ & - c_l (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_F) + \text{const1} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Pour la modélisation de la partie fluide nous nous basons toujours sur les équations (2.1) et (2.2).

## 4.2 Introduction

Comme nous l'avons rappelé dans la partie introductive de ce manuscrit, l'augmentation de la part des ressources renouvelables comme énergie primaire dans le processus de production d'électricité passe par la levée de nombreux verrous technologiques. Parmi eux, la question de l'intermittence de la ressource représente un enjeu crucial pour tous les acteurs du domaine. Dans cette optique, un recours croissant aux MCP est fait pour répondre à la problématique du lissage de la production électrique, via la mise en place d'un système de stockage thermique [209]. Du fait de leur importante capacité de stockage thermique, sous la forme de chaleur latente avec de faibles plages de variation en températures durant les phases de charge et de décharge, les procédés de stockage thermique par chaleur latente (*latent heat thermal energy storage* ou LHTES) apparaissent comme la solution la plus efficace pour ajuster la production à la demande d'énergie.

Dans le but de mettre au point cette technologie, il est crucial de comprendre au mieux l'ensemble des phénomènes physiques impliqués durant les phases de fusion et de solidification du MCP. Du fait de la nature non linéaire du problème, une analyse numérique est nécessaire pour prédire le comportement thermique de telles installations. Donc la modélisation mathématique du matériau devient dès lors un point essentiel sur lequel se focaliser pour concevoir le stockage.

Plusieurs auteurs se sont penchés sur l'étude numérique des performances de ce type de stockage [11, 182, 210, 211]. Bien souvent, la détermination précise des propriétés intrinsèques des MCP employés ne fait pas l'objet d'analyses approfondies. Or ces propriétés sont des paramètres de simulation essentiels pour une détermination juste des performances du système de stockage thermique modélisé. Autre point peu fréquemment abordé, l'analyse au cours du temps de telles installations et la possibilité d'une détérioration des propriétés thermophysiques due au vieillissement du matériau.

Le modèle que nous avons développé permet la simulation des phénomènes thermiques couplés (transferts de chaleur et de masse), en présence de conduction et de convection, d'un système de stockage de chaleur incluant une partie latente. Nous montrons ici la prépondérance d'une bonne détermination des propriétés des matériaux à changement de phase dans l'analyse des performances d'une solution de stockage thermique. Cette analyse se fait via la modélisation du stockage en considérant les phénomènes thermiques et hydrauliques et plus particulièrement au travers du taux de remplissage qui sera défini dans la suite. Nous comparerons dans un premier temps deux matériaux fictifs, chacun d'un type différent. Puis nous nous baserons sur les résultats de caractérisation de cinq MCP, chacun modélisé par la loi d'état  $h(T)$  correspondante puis nous discuterons de l'impact des différents types de modélisation sur les performances d'un système de stockage.

## 4.3 Résultats

### 4.3.1 Définition du cas test

Afin de bien démontrer le propos de cette étude, nous allons considérer le cas simple d'un stockage rectangulaire (dimensions 400 x 10 mm) avec une condition en température fixe à la limite inférieure et une condition adiabatique sur les autres parois (voir figure 4.3). Le calcul se fait sur un maillage régulier, identique pour chaque cas, défini par un pas d'espace de 1 mm. Le pas de temps est de 0.01 s. Ces valeurs ont été choisies de telle sorte à assurer la stabilité numérique de notre simulation.

On regardera successivement le cas d'une charge, d'une décharge, d'un cycle et de plusieurs cycles successifs.

Concernant le MCP modélisé, plusieurs cas sont ici mis à l'étude afin d'envisager l'ensemble des fermetures thermodynamiques présentées précédemment et d'avoir le plus d'éléments possibles pour permettre notre analyse. Les résultats suivants sont la compilation de ceux qui ont été présentés lors des congrès internationaux *ECOS* [8] et *GREEN-*

STOCK [9] en 2015.

Nous allons tout d'abord présenter les matériaux utilisés dans [8].

Ce premier jeu de données est un peu particulier en cela qu'il concerne un corps fictif, i.e., que les propriétés thermophysiques de ce corps ont été définies pour les besoins numériques de notre étude. Au moment de la rédaction de [8], nous ne disposions pas encore de données de caractérisation thermique pour les types de matériaux étudiés dans cette section ce qui explique le recours à cette démarche. Cependant il est important de comprendre que dans le cas de notre analyse cela n'engendre pas de problème particulier puisque le but ici est d'observer l'influence que peut avoir le type de modélisation du MCP sur les performances d'un système de stockage thermique. Les différentes grandeurs visibles sur le tableau 4.1 sont des paramètres d'entrée de notre modèle et ont été fixées de telle sorte que la courbe de la fonction  $h(T)$  obtenue via l'équation (4.2) corresponde à celle d'un matériau type corps pur. Puis par la suite nous avons procédé de manière identique afin de définir les propriétés d'une solution binaire.

Nous avons donc défini les propriétés d'un matériau type corps pur ainsi que celles pour trois situations différentes dans le cas d'une solution binaire ( $2K$ ,  $5K$  et  $8K$  désigne l'intervalle de températures sur lequel s'étale la fusion du corps); les courbes des fonctions utilisées sont visibles sur la figure 4.1<sup>1</sup>. Les propriétés des matériaux simulés sont quant à elles données dans les tableaux 4.1 et 4.2<sup>2</sup>.

Une remarque importante à faire ici sur l'observation de ces courbes est que, sur l'intervalle de température que nous considérons pour nos simulations, la variation d'enthalpie totale est la même et ce quel que soit le corps (et donc quelle que soit la fonction enthalpie qui le représente). Ce qui change en revanche c'est le profil de ces courbes entre ces points. Ceci est un point primordial sur lequel nous reviendrons au moment de l'analyse de nos résultats.

$\rho(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	$c_s(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$c_l(\text{J} \cdot \text{kg} \cdot \text{K}^{-1})$	$k(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$
820	930	700	0.2
$L_F(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	$T_F(^{\circ}\text{C})$	$\beta(\text{K}^{-1})$	$\nu(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$
254 000	35	$1 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-6}$

TABLE 4.1 – Propriétés thermophysiques du matériau corps pur ECOS [8]

Dans un second jeu de résultats nous nous sommes basés sur les travaux de caractérisation réalisés au sein du laboratoire dans le cadre d'une thèse complémentaire à celle de ce manuscrit [189]. Cette fois il ne s'agit non plus d'un matériau fictif mais du nitrate de sodium,  $NaNO_3$ , MCP ayant fait l'objet de plusieurs études dans le domaine du stockage

1. La courbe orange représente bien une fonction  $h(T)$  type corps pur. L'écart observé sur la fusion est dû au fait que nous n'avons pas un point à  $T = T_F$  pour le tracé de la courbe.

2. Précision sur les grandeurs thermophysiques du tableau 4.2 :  $T_E$  représente la température de l'eutectique, c'est à cette dernière que la fusion démarre.  $L_E$  représente la chaleur latente du solvant prise à  $T_E$ , i.e.,  $L_E = L_w(T_E)$ .

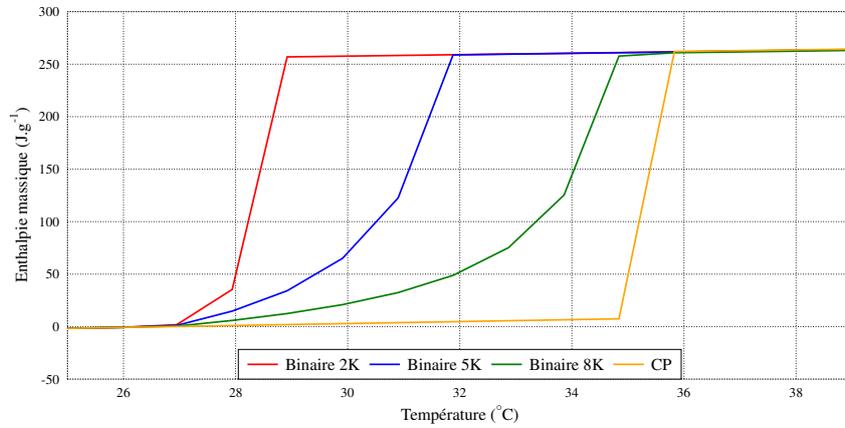


FIGURE 4.1 – Modèles thermodynamiques utilisés pour l'enthalpie du MCP ECOS [8]

<i>Type</i>	$\rho$	$c_s$	$c_l$	$k$	$L_{F,w}(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$
<i>Bin2K</i>	820	890	700	0.2	293 500
$T_{F,w}(\text{°C})$	$T_F$	$\beta$	$\nu$	$L_E(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	$T_E (\text{°C})$
29.15	28.85	$10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-6}$	0	26.85
<i>Type</i>	$\rho$	$c_s$	$c_l$	$k$	$L_{F,w}(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$
<i>Bin5K</i>	820	890	700	0.2	321 000
$T_{F,w}(\text{°C})$	$T_F$	$\beta$	$\nu$	$L_E(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	$T_E (\text{°C})$
33.15	31.85	$10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-6}$	0	26.85
<i>Type</i>	$\rho$	$c_s$	$c_l$	$k$	$L_{F,w}(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$
<i>Bin8K</i>	820	890	700	0.2	290 000
$T_{F,w}(\text{°C})$	$T_F$	$\beta$	$\nu$	$L_E(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	$T_E (\text{°C})$
36	34.85	$10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-6}$	0	26.85

TABLE 4.2 – Propriétés thermophysiques de la solution binaire ECOS [8].

de l'énergie solaire pour des centrales thermodynamiques. Pour notre étude nous considérons trois solutions binaires différentes ainsi que le cas d'un corps pur (voir la figure 4.2). En ce qui concerne le cas des solutions binaires, nous allons nous intéresser ici au mélange nitrate/nitrite de sodium ( $NaNO_3/NaNO_2$ ) avec trois différents pourcentages en mole pour le nitrite de sodium (sur la figure 4.2,  $\%M$  désigne la fraction molaire de nitrite).

La présence d'un pourcentage molaire de  $NaNO_2$  dans le nitrate de sodium entraîne dès lors une modification des propriétés thermophysiques de ce corps. Cela se constate lorsque l'on observe l'évolution de l'enthalpie en fonction de la température pour les composés  $NaNO_3/NaNO_2$  sur la figure 4.2. Ce comportement peut être assimilé à celui caractéristique d'une solution binaire et la modélisation numérique de ces composés s'en trouve donc affectée.

L'essentiel ici est avant tout d'avoir une fonction  $h(T)$  conforme à ce que nous mesurons. Pour se faire on peut donc, soit se baser entièrement sur la thermodynamique de notre matériau et développer une relation  $h(T)$  propre à ce dernier. C'est un travail fastidieux et présentant l'inconvénient de ne pas être extensible à d'autres cas d'études faisant intervenir des composés différents. Soit, comme nous avons choisi de le faire dans notre étude, utiliser une fermeture thermodynamique correspondant à une solution binaire, pour laquelle la fonction enthalpie a le même type de comportement. La dernière étape consiste alors à déterminer les valeurs des différents paramètres.

Les différentes grandeurs présentées dans les tableaux 4.3 et 4.4, ont été déterminées en se basant sur les résultats de campagnes expérimentales.

Le choix de ce mélange ne s'est pas fait au hasard. Durant les cycles de chauffe et de refroidissement qu'a subis le  $NaNO_3$  pour sa caractérisation, le laboratoire a observé une modification des propriétés thermophysiques de ce dernier. Ceci est dû la fraction de nitrite qui apparaît dans le matériau pur initialement. Plusieurs explications sont avancées. Il pourrait s'agir d'une dégradation thermique du matériau ou bien d'un phénomène de corrosion qui interviendrait entre la paroi métallique du réservoir (ou plutôt de la cellule test à l'échelle du laboratoire) et le MCP. Ces deux possibilités peuvent mener à la production de nitrite.

$\rho(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	$c_s(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$c_l(\text{J} \cdot \text{kg} \cdot \text{K}^{-1})$	$k(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$
1900	2300	2200	0.56
$L_F(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	$T_F(^{\circ}\text{C})$	$\beta(\text{K}^{-1})$	$\nu(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$
178 000	306	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-6}$

TABLE 4.3 – Propriétés thermophysiques du  $NaNO_3$  grade laboratoire [9]

Maintenant que nous avons présenté les différents matériaux simulés dans notre étude, nous allons nous attarder sur la dimension système de notre problème et expliciter quels résultats nous cherchons à obtenir pour mener à bien nos analyses.

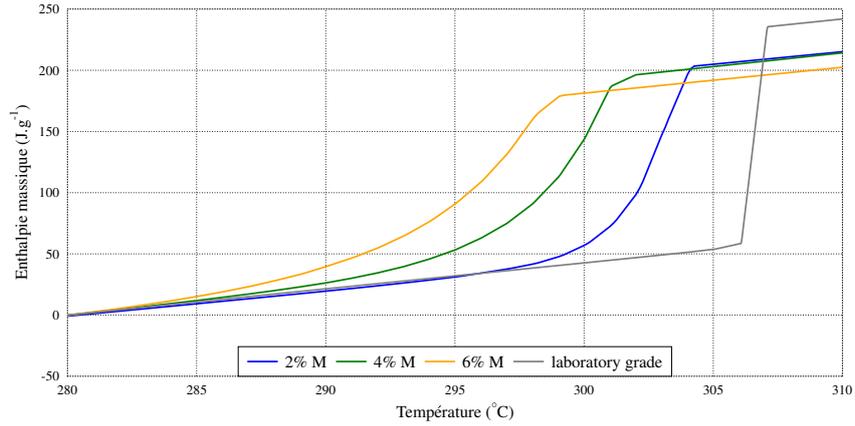


FIGURE 4.2 – Modèles thermodynamiques utilisés pour l'enthalpie du  $NaNO_3$  pur et des solutions  $NaNO_3/NaNO_2$  [9]

<i>Type</i>	$\rho$	$c_s$	$c_l$	$k$	$L_{F,w}(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$
2%M	1900	1750	2000	0.56	173 500
$T_{F,w}(\text{°C})$	$T_F$	$\beta$	$\nu$	$L_E(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	$T_E(\text{°C})$
303.35	302,65	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-6}$	0	281.85
<i>Type</i>	$\rho$	$c_s$	$c_l$	$k$	$L_{F,w}(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$
4%M	1900	1980	2300	0.56	194 000
$T_{F,w}(\text{°C})$	$T_F$	$\beta$	$\nu$	$L_E(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	$T_E(\text{°C})$
302.65	300.65	$10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-6}$	0	279.35
<i>Type</i>	$\rho$	$c_s$	$c_l$	$k$	$L_{F,w}(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$
6%M	1900	2000	2050	0.56	208 500
$T_{F,w}(\text{°C})$	$T_F$	$\beta$	$\nu$	$L_E(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	$T_E(\text{°C})$
302	297.85	$10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-6}$	0	297.85

TABLE 4.4 – Propriétés thermophysiques de la solution binaire  $NaNO_3/NaNO_2$  [9].

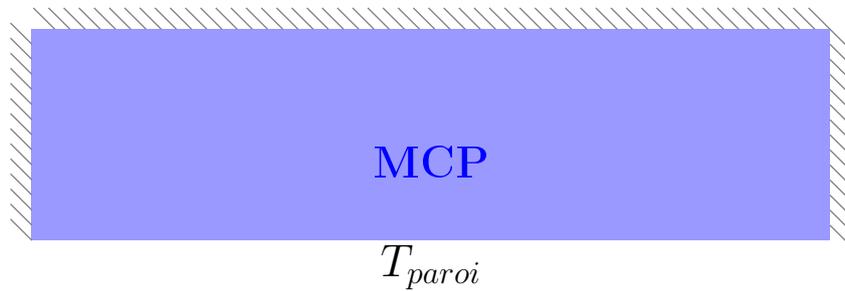


FIGURE 4.3 – Schéma de la configuration du cas test dans les cas ECOS [8] et GREENSTOCK [9].

Nb : par commodité on représente ici la géométrie du cas test à l'horizontal mais dans nos simulations nous paramétrons la force gravitationnelle  $\vec{g}$  de telle sorte que le stockage soit en position verticale. Cette orientation est d'ailleurs celle que l'on retrouve le plus fréquemment dans les systèmes de stockage d'énergie solaire actuellement en fonctionnement (notamment pour des raisons d'encombrement au sol).

D'un point de vue système, les performances globales d'une installation type solaire à concentration dépendent directement des performances individuelles de chaque élément de la centrale. Il est donc nécessaire d'établir un critère permettant d'évaluer la quantité de chaleur stockée ou déstockée (d'un point de vue énergétique). Bien que dans notre étude nous nous intéressons au seul système de stockage, les performances de ce dernier sont directement liées à la température d'injection du fluide caloporteur en provenance du champ de capteurs solaires. Ici, comme explicité plus haut, nous avons choisi d'appliquer comme condition à la limite à la paroi du stockage en contact avec le fluide caloporteur, une température fixe. Bien que simple, cette condition n'en est pas moins valable dans notre approche, au vu des modes opératoires de ce type de systèmes. En effet, tout est mis en œuvre afin de compenser le caractère intermittent de la ressource et ainsi limiter au maximum les variations de la température en entrée du stockage. Donc dans une première approche, une condition à la limite dépendante du temps n'est pas indispensable dans nos simulations. Cependant, si la température d'injection ne varie pas (ou alors très peu), le constat n'est pas le même concernant la température du fluide caloporteur le long de la paroi de l'échangeur. Du fait des échanges qui ont lieu, un gradient de températures apparaît entre l'entrée et la sortie. Cette partie de la physique ne peut être prise en compte qu'en simulant le problème de manière couplé (résolution des équations de la thermique et de la mécanique des fluides dans le fluide caloporteur et dans le MCP), ce que nous ne faisons pas ici. Étant donnée la faible longueur du système simulé, l'approximation faite ne faussera en rien les analyses menées sur l'influence de la fermeture thermodynamique employée.

Afin de comparer les résultats renvoyés par l'ensemble de nos simulations, nous allons donc calculer le taux de remplissage (ou fill factor) au cours du temps. Ce paramètre est défini comme le rapport de l'énergie stockée (ou déstockée) à un instant donné sur la capacité de stockage (ou de déstockage) maximale du système :

$$FF = \frac{h(t) - h_{min}}{h_{max} - h_{min}} \quad (4.6)$$

Avec  $h(t)$  l'enthalpie massique totale de notre système à un instant  $t$ ,  $h_{max}$  l'enthalpie massique totale maximale et  $h_{min}$  l'enthalpie totale minimale du système.

Nous présenterons alors, entre autres résultats, l'évolution du fill factor au cours du temps durant les différentes simulations.

### 4.3.2 Charge et décharge

Une charge correspond à un apport de chaleur au stockage (respectivement une décharge correspond à une extraction). En pratique cela signifie qu'un flux thermique ou qu'une

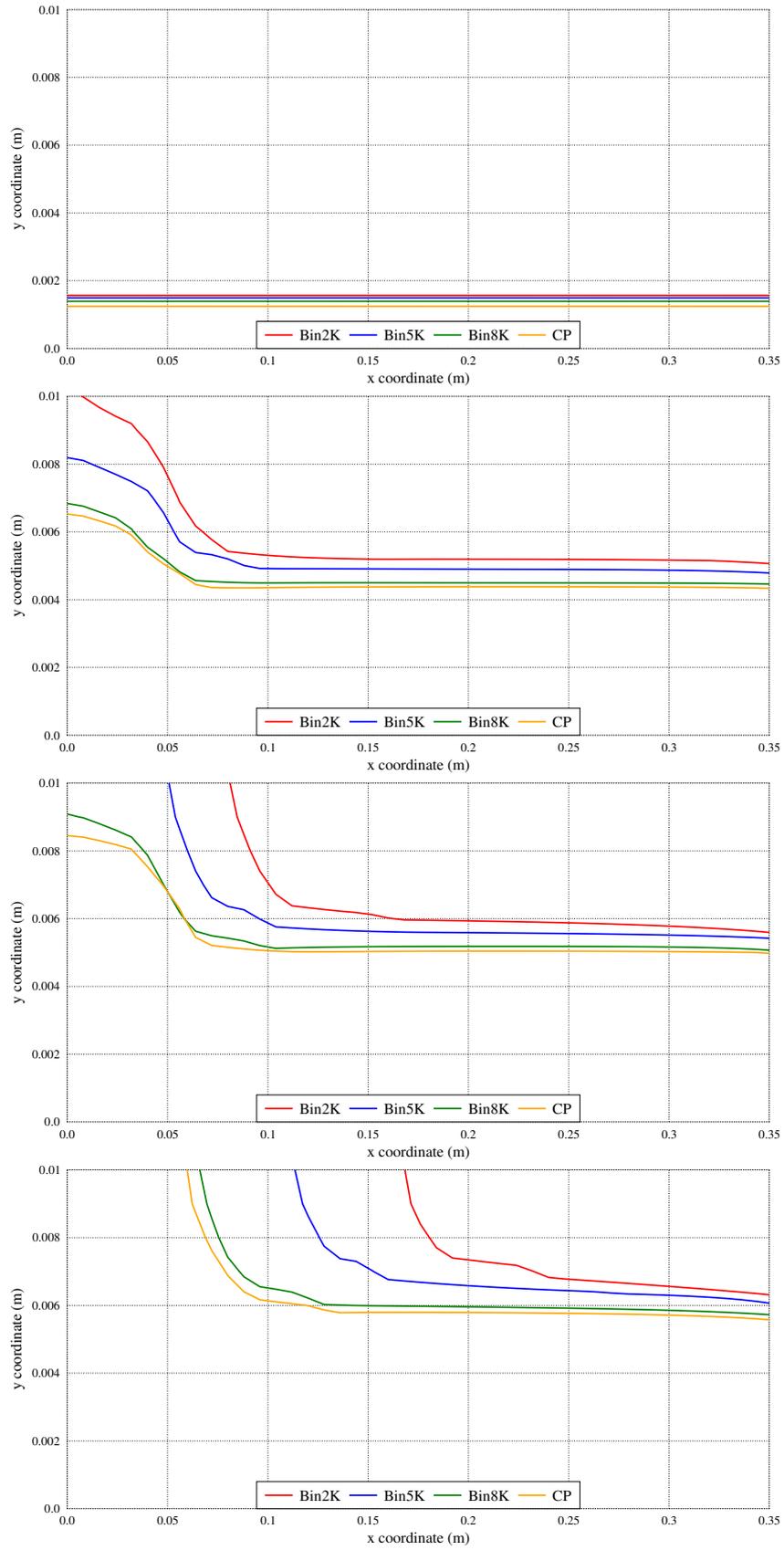


FIGURE 4.4 – Position de l'interface solide/liquide à  $t = [60 - 600 - 780 - 1020]$  s lors de la phase de charge - cas ECOS (la gravité est selon l'axe  $\vec{e}_x$  et la paroi chauffée est en  $y = 0$  m).

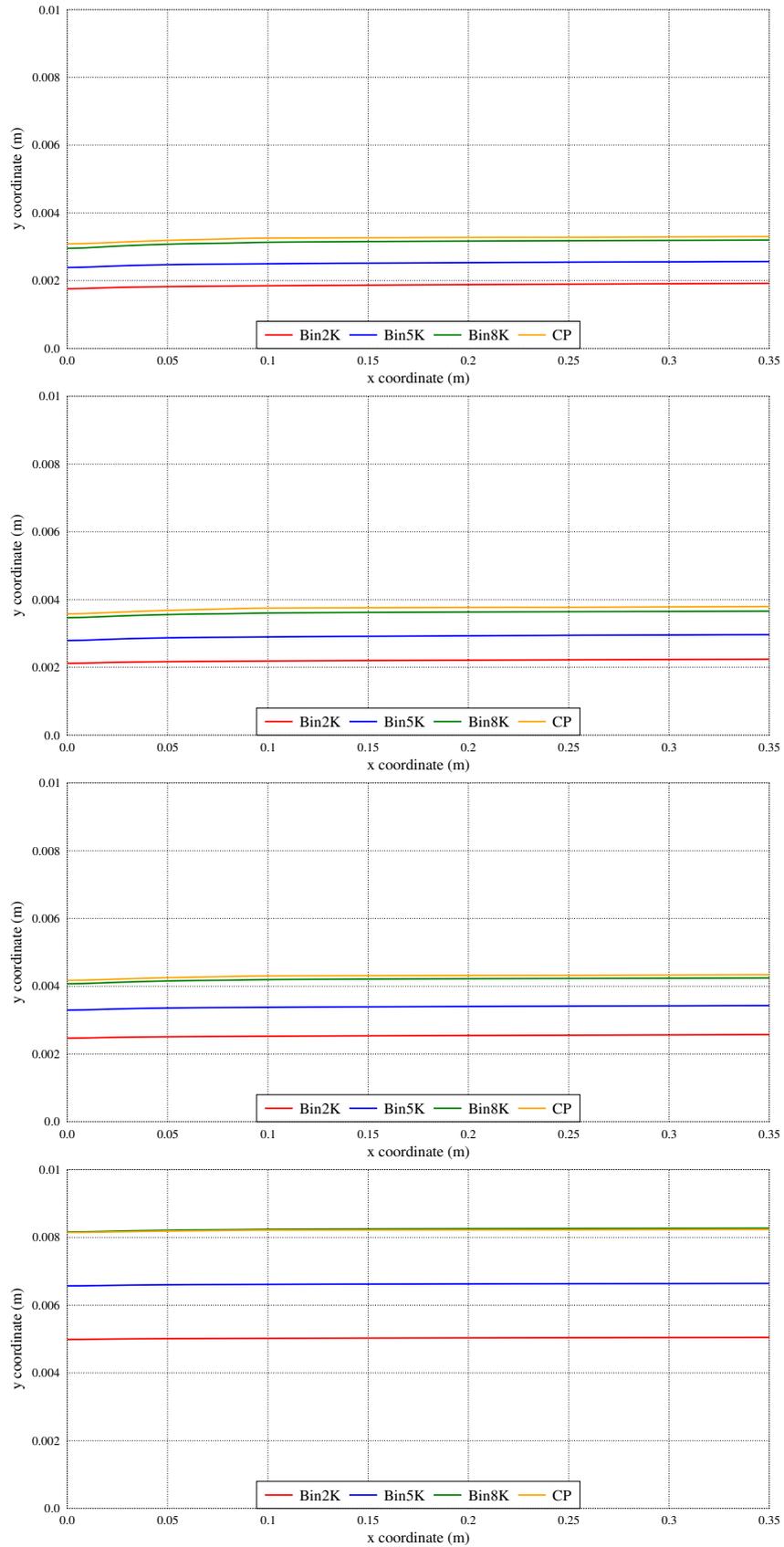


FIGURE 4.5 – Position de l'interface solide/liquide à  $t = [600 - 780 - 1020 - 3600]$  s lors de la phase de décharge - cas ECOS (la gravité est selon l'axe  $e_x^{\vec{}}$  et la paroi chauffée est en  $y = 0$  m).

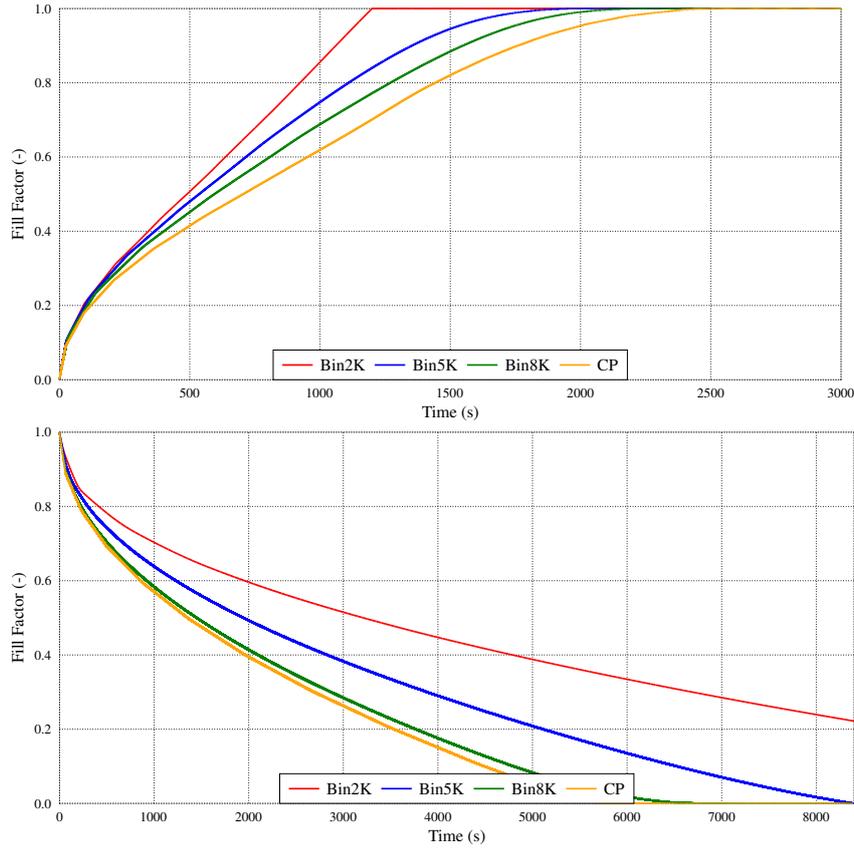


FIGURE 4.6 – Évolution du Fill Factor au cours du temps lors des phases de charge (figure du haut) et de décharge (figure du bas) - cas ECOS.

température *chaude* (ou *froide*) est fixé sur l'une des frontières du système étudié.

Les résultats concernant l'évolution du fill factor liés à la dynamique de charge/décharge du système sont présentés sur les figures 4.6 et 4.14 en fonction de la modélisation retenue pour le MCP pour des temps physiques similaires. Ici la température de la paroi inférieure est fixée à  $T_{paroi} = 326.15K$  dans le cas d'une charge et à  $T_{paroi} = 298.15K$  dans le cas d'une décharge pour les simulations concernant notre matériau fictif [8], et à  $T_{paroi} = 585K$  dans le cas de la phase de charge et à  $T_{paroi} = 550K$  en phase de décharge pour les simulations concernant le  $NaNO_3$  et le composé  $NaNO_3/NaNO_2$  [9]. Le choix de ces températures a été effectué de telle sorte à se situer suffisamment au dessus et en dessous de la température de fusion (ou de la plage de température dans le cas d'une solution binaire) pour qu'à l'état final et à l'état initial de nos simulations la totalité des transferts par chaleur latente ait été effectué. Les échanges se feront donc par chaleur sensible dans le solide, puis par chaleur latente et enfin de nouveau par chaleur sensible dans le liquide. Outre l'évolution temporelle du FillFactor nous présentons également ici les résultats de simulations que sont l'évolution de la position de l'interface solide/liquide lors des phases de charge et décharge sur les figures 4.4 et 4.5 pour notre matériau fictif et sur la figure 4.13 pour le  $NaNO_3$  et ses composés. Sont également présentés dans cette section l'évolution temporelle du champ de températures (figures 4.7 et 4.8), du champ

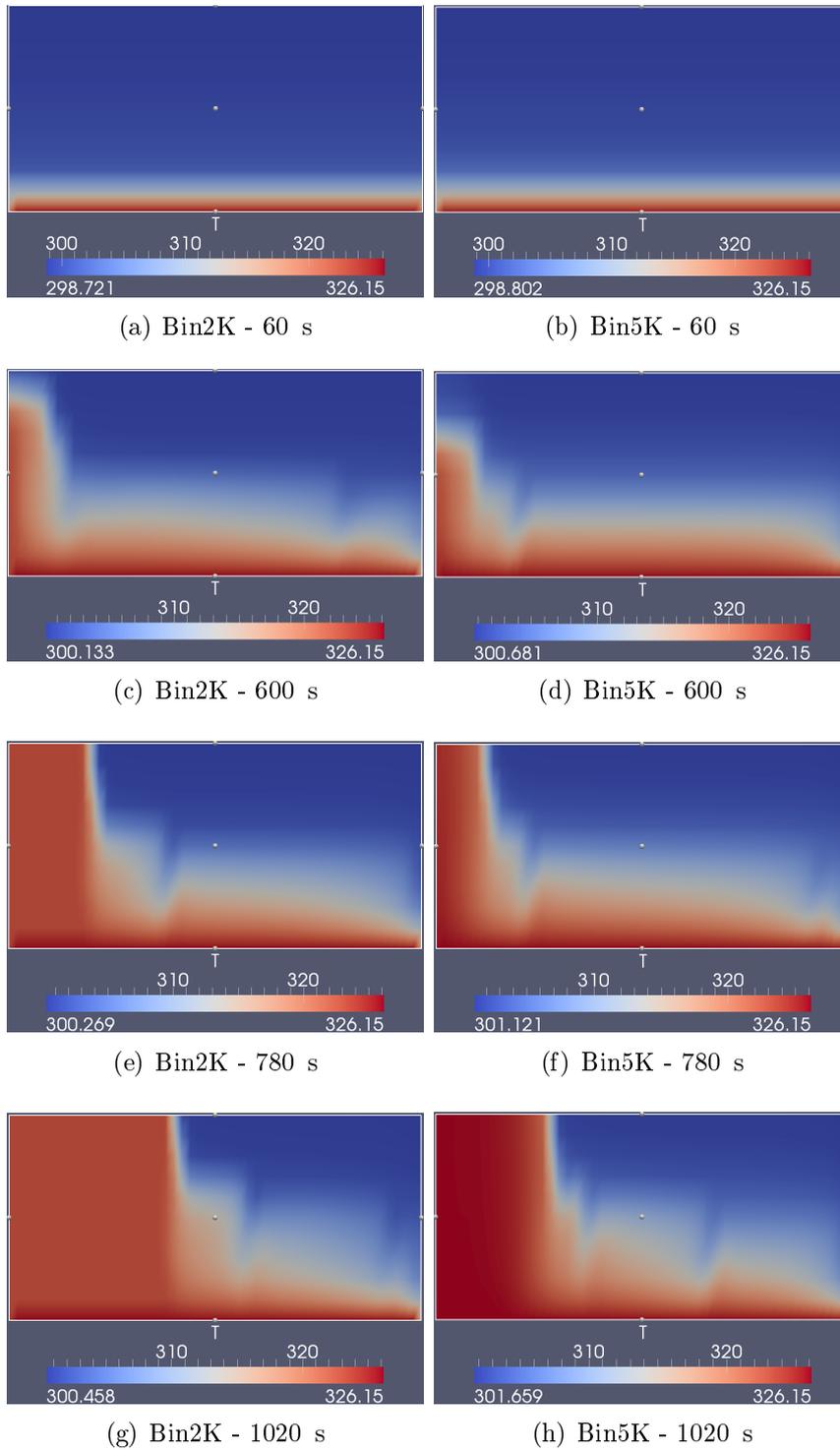


FIGURE 4.7 – Evolution temporelle du champ de température lors de la phase de charge - cas ECOS.

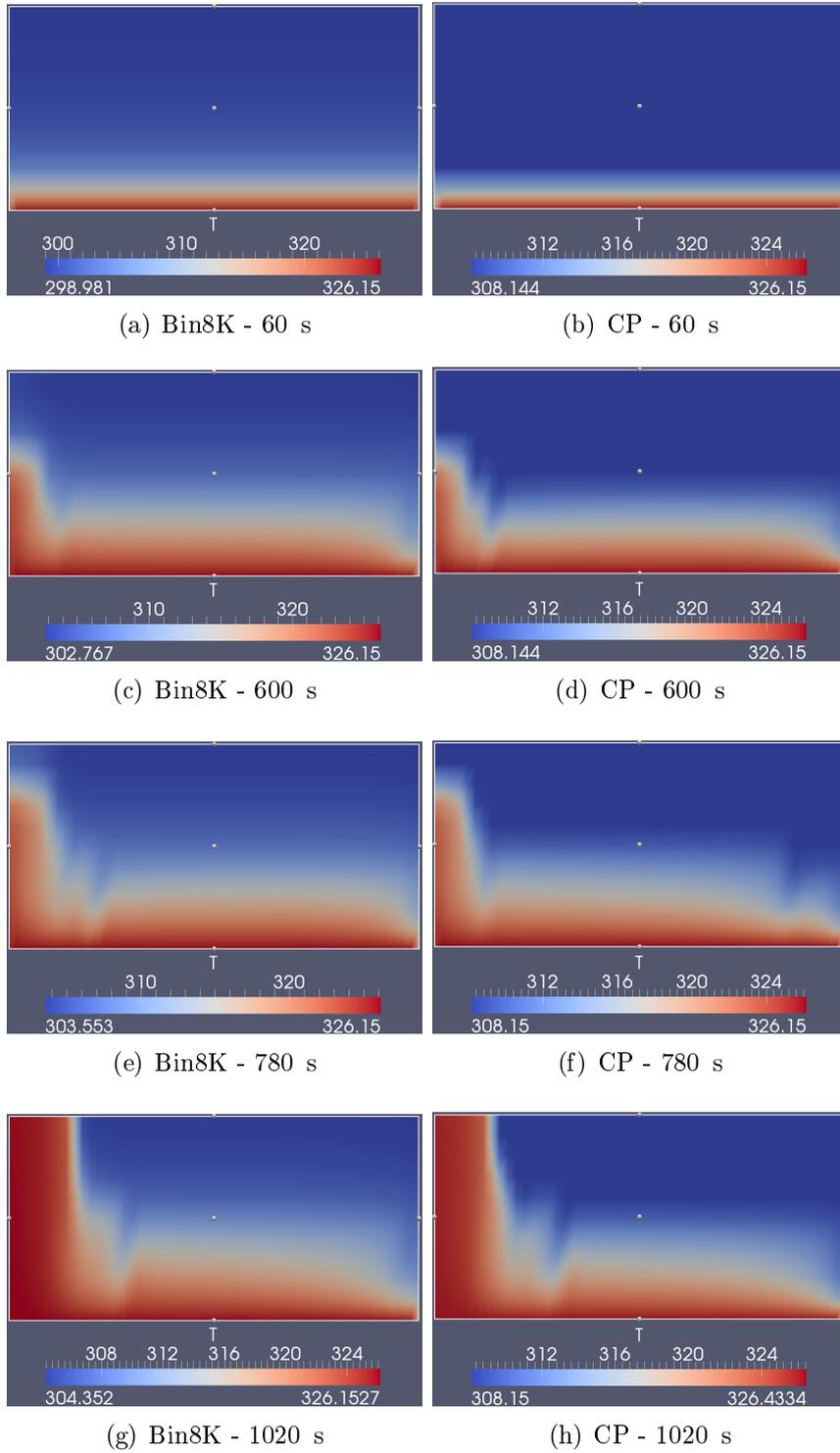


FIGURE 4.8 – Evolution temporelle du champ de température lors de la phase de charge - cas ECOS.

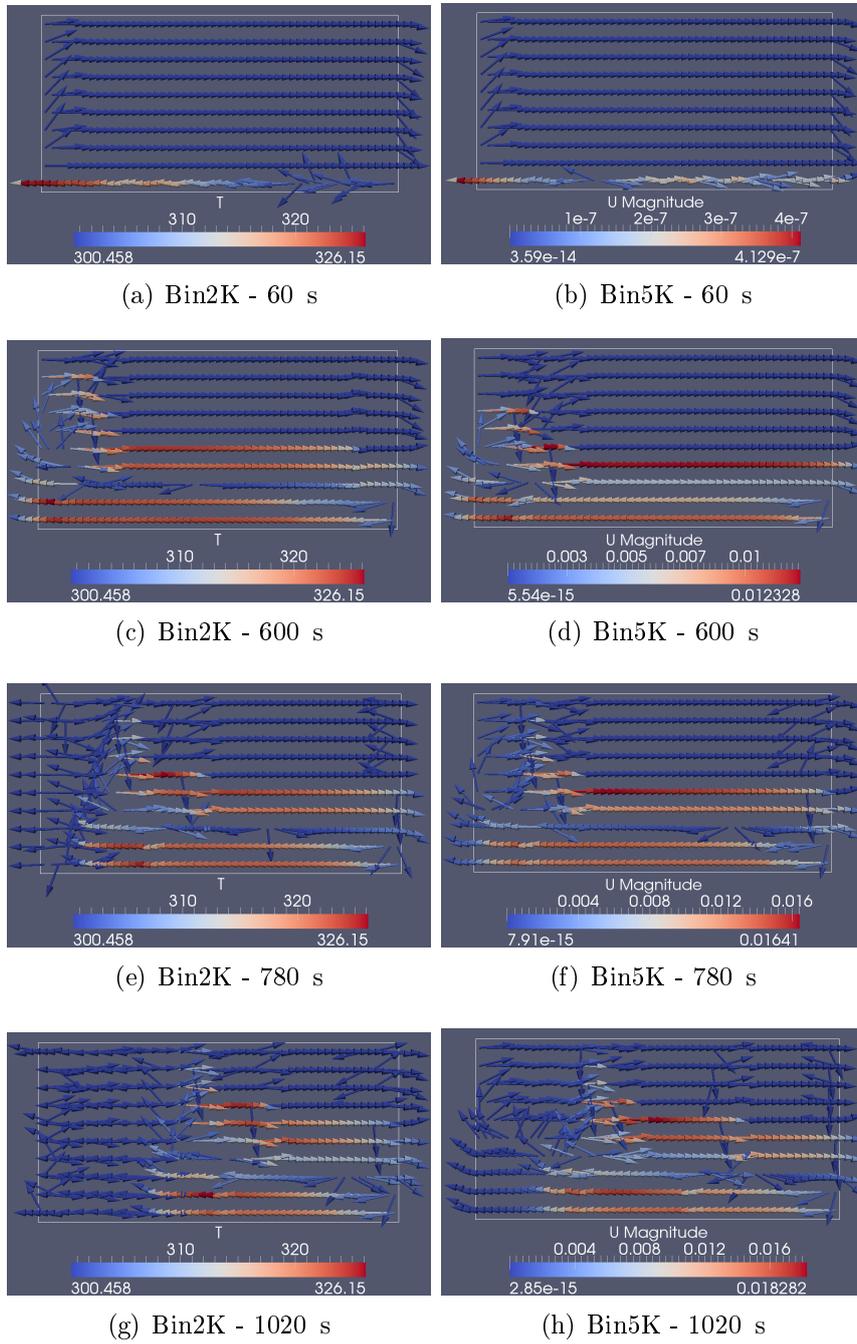


FIGURE 4.9 – Evolution temporelle du champ de vitesse lors de la phase de charge - cas ECOS.

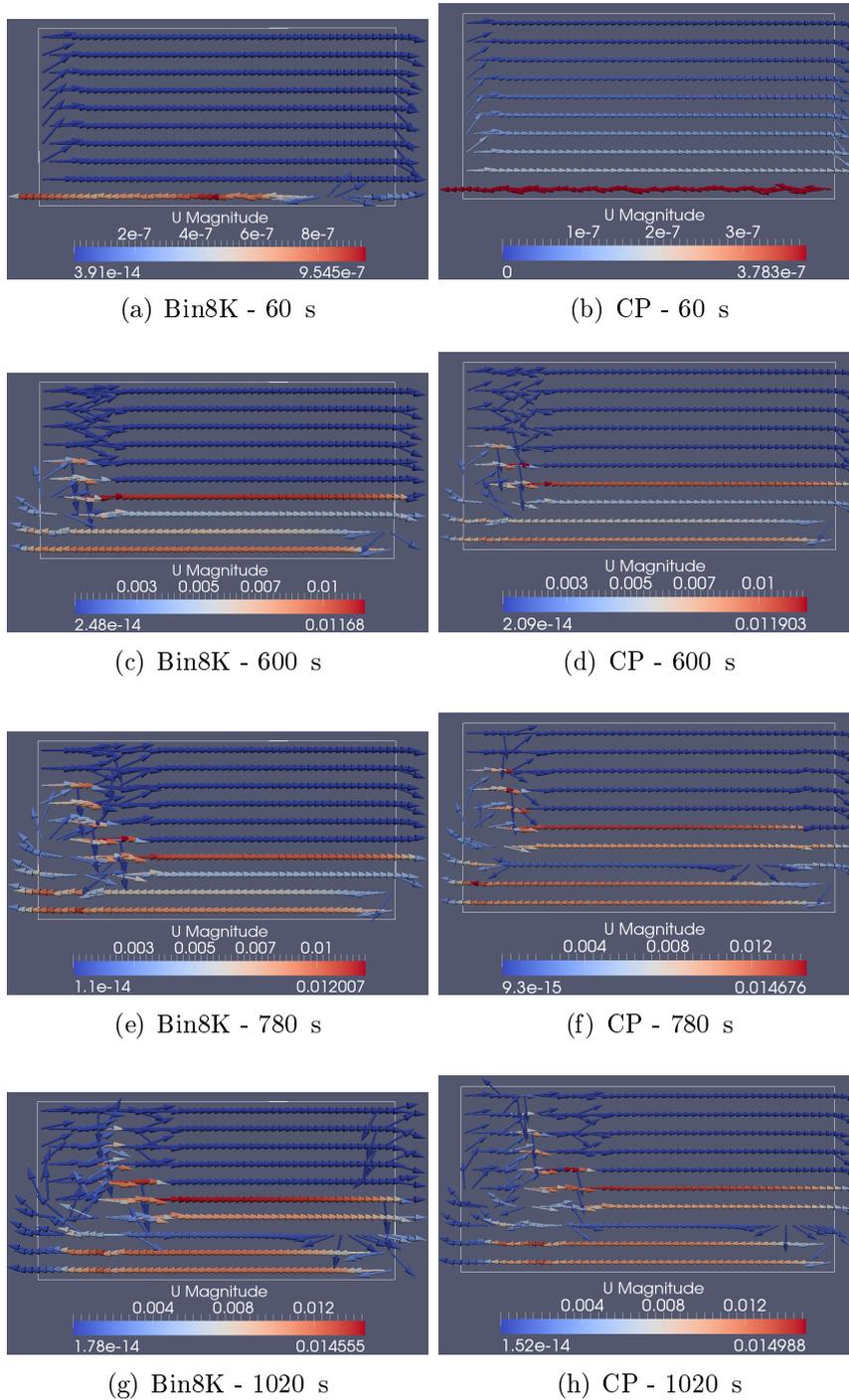


FIGURE 4.10 – Evolution temporelle du champ de vitesse lors de la phase de charge - cas ECOS.

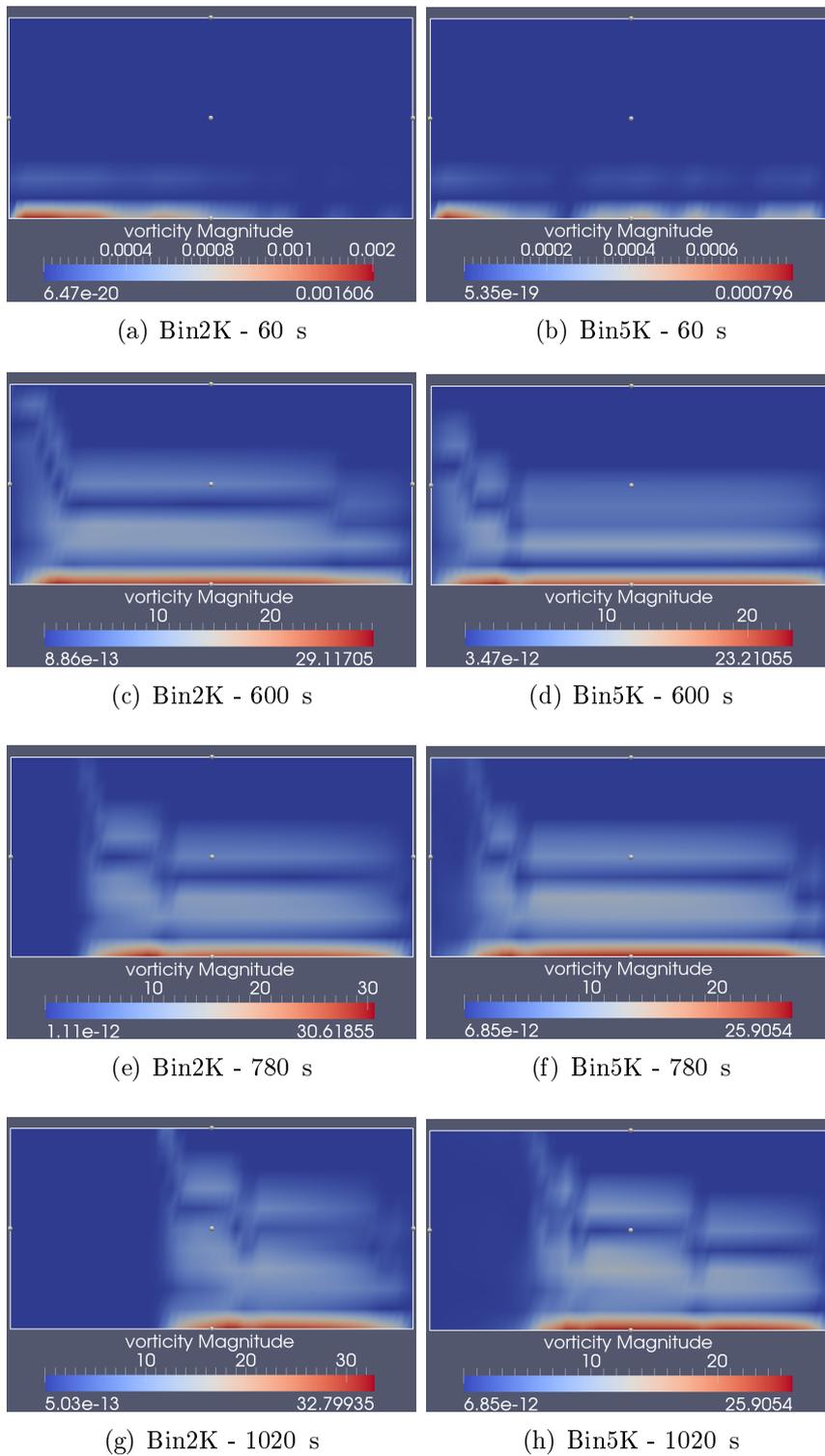


FIGURE 4.11 – Evolution temporelle du champ de vorticité lors de la phase de charge - cas ECOS.

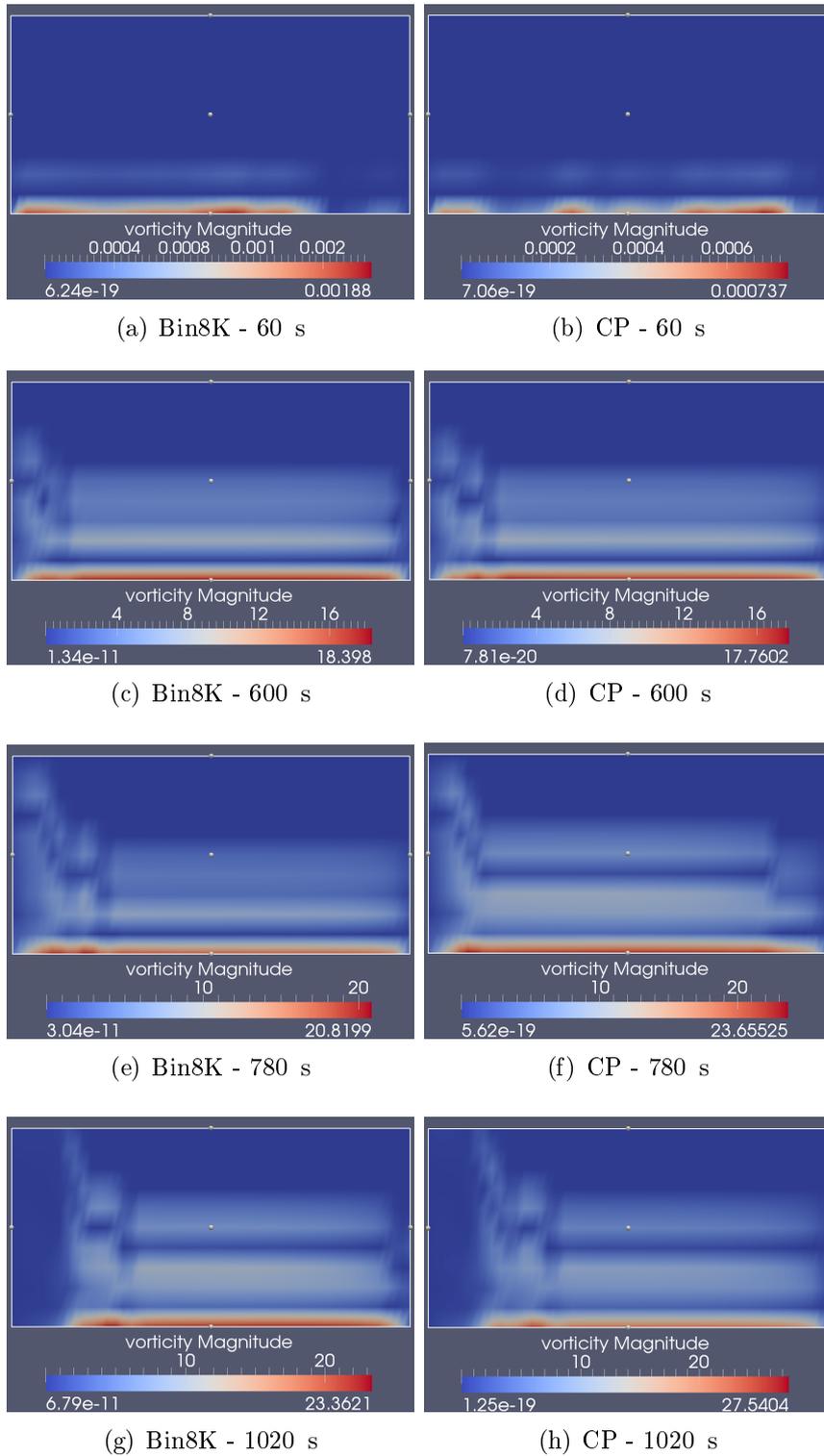


FIGURE 4.12 – Evolution temporelle du champ de vorticit  lors de la phase de charge - cas ECOS.

de vitesses (figures 4.9 et 4.10) et du champ de vorticit  (figures 4.11 et 4.12) pour le mat riau fictif.

Parmi ces divers  l ments de simulations, l'un des plus parlants concernant les diff rences qu'entra nent la fermeture thermodynamique s lectionn e est l' volution temporelle de la position du front de fusion/solidification. On voit clairement sur ces figures que d s les premiers instants un  cart se cr e entre les diff rents cas mod lis s et que cet  cart n'est pas constant mais au contraire augmente au cours du temps. Sur la figure correspondant au temps de simulation le plus avanc  (quatri me graphe en partant du haut, de la figure 4.4) on constate alors un  cart important entre le mod le corps pur et celui correspondant   une solution binaire dont la fusion est  tal e sur une plage de  $2K$ . Cela impacte directement la valeur du taux de fusion du stockage   l'instant final, ce que nous verrons plus clairement sur les courbes de l' volution du fill factor en fonction du temps. Comment s'explique alors cet  cart ? Le mieux pour comprendre est de se baser sur l'observation de l' volution des enthalpies en fonction de la temp rature (figure 4.1). Nous allons consid rer les cas du corps pur et de la solution binaire  $2K$  lors de la phase de charge qui correspond   la fusion du mat riau.   l' tat initial les deux corps sont en phase solide   la temp rature de  $298.15\text{ K}$ . Dans le cas du corps pur la fusion d marre    $T_F = 308.15\text{ K}$  tandis que dans le cas du binaire celle-ci d marre   partir du moment o  l'on atteint la temp rature de solidus,  $T_{sol}$  (pour rappel, la temp rature de solidus repr sente la temp rature   laquelle apparait la premi re goutte de liquide),  gale dans ce cas    $300\text{ K}$ . C'est donc cette diff rence dans le d but de la fusion qui est la principale raison des  carts constat s sur la position de l'interface.    $T = 300\text{ K}$ , le binaire entame le processus de changement de phase tandis que le corps pur lui restera   l' tat solide et accumulera de l' nergie sous forme de chaleur sensible tant que sa temp rature n'aura pas atteint les  $308.15\text{ K}$ . Sachant cela, comment expliquer les  carts constat s entre chaque binaire puisque tous ont une fusion qui d marre    $300\text{ K}$  ? Cette fois, il s'agit de ne plus prendre en compte uniquement la temp rature de solidus, mais  galement celle du liquidus,  $T_{liq}$  (qui repr sente la temp rature   laquelle dispara t le dernier cristal de solide). Prenons cette fois l'exemple de la solution binaire  $2K$  et de celle  $5K$  dont les temp ratures de liquidus sont respectivement  $302\text{ K}$  et  $305\text{ K}$ . M me si cette fois la fusion va d marrer au m me instant, l'intervalle de temp rature pour atteindre  $T_{liq}$  est plus grand dans le cas du binaire  $5K$  que dans celui du binaire  $2K$  (  quantit  d' nergie  gale), ce qui g n re l' cart que nous observons sur la figure 4.4.

 videmment le comportement observable sur ces figures se constate sur les autres r sultats de simulation que sont l' volution temporelle des champs de temp ratures, de vitesses et de vorticit s.

Ces r sultats nous permettent  galement de voir l'importance que peut avoir la prise en compte de la convection dans nos simulations. Ce ph nom ne thermique est tout particuli rement visible lors de la phase de charge o  il devient rapidement le mode de transfert dominant (par rapport   la conduction) ce qui a pour effet la d formation de l'interface de changement de phase comme on peut l'observer sur la figure 4.4. L'apparition d'une interface non plane met en  vidence la structure typique d'un changement de phase domin  par des mouvements convectifs naturels.

Ce phénomène s'observe également sur les figures 4.9 et 4.10 où l'on voit clairement le rouleau convectif se former. Le schéma de recirculation que nous observons dans la phase liquide explique que les transferts thermiques soient plus importants dans la partie gauche (qui correspond en fait à la partie haute du système) du domaine simulé. Le fluide s'échauffe et s'élève le long de la frontière où une température chaude est fixée, puis se refroidit et descend le long de l'interface de changement de phase.

Les mouvements de fluides induisent également une distribution non linéaire de la température (voir figures 4.7 et 4.8) selon la distance à laquelle on se trouve de la paroi chauffée.

Lors de la phase de décharge, la conduction est le phénomène thermique prépondérant (figure 4.5). L'interface de changement de phase conserve une structure linéaire tout au long de la simulation. On remarque également que les écarts sont moindres entre les différentes modélisations et que ceux-ci n'évoluent que peu durant la simulation. Encore une fois, l'observation de la figure 4.1 nous permet de comprendre ces écarts. Le corps pur va cristalliser plus rapidement que les autres composés car ce dernier présente la température de solidification la plus haute sur son diagramme de phase  $T_{FCP} = 35^\circ\text{C}$ .

Si maintenant on s'intéresse à l'évolution temporelle du fill factor ; il est clair que l'on aboutit à des résultats différents en fonction de la fermeture thermodynamique utilisée bien que la quantité d'énergie stockée est sensiblement la même dans chaque cas étant donné que la différence d'enthalpies est la même sur la plage de température simulée. On constate alors en fonction des cas, des écarts qui correspondent aux durées de stockage ou de déstockage. On observe alors des variations pouvant aller jusqu'à 30% sur la durée en stockage et jusqu'à 40% sur celle en déstockage pour notre MCP fictif (figure 4.6) entre la simulation avec une fonction  $h(T)$  type corps pur et le cas de la solution binaire *Bin2K*. Sur la figure 4.14 l'écart maximal est observé entre le  $\text{NaNO}_3$  pur (grade laboratoire) et le composé  $\text{NaNO}_3/\text{NaNO}_2$  à 6% en masse molaire (30% en phase de charge et 10% en décharge d'écart entre les différents Fill Factor).

Ces écarts s'expliquent du fait qu'entre chaque modélisation le début de la fusion (respectivement de la solidification) n'intervient pas aux mêmes températures, et donc, pas aux mêmes instants. Si l'on observe la figure 4.14, par exemple, à  $T = 573\text{K}$  le  $\text{NaNO}_3$  est toujours dans la partie sensible et par conséquent subit une augmentation plus importante de sa chaleur sensible, donc de sa température, que les composés  $\text{NaNO}_3/\text{NaNO}_2$  qui eux ont déjà entamé le changement de phase et accumulent donc de l'énergie sous forme de chaleur latente.

Comme nous avons déjà pu le remarquer sur les figures 4.2 et 4.1, corps pur et solution binaire (même avec un faible pourcentage molaire dans le cas du  $\text{NaNO}_3/\text{NaNO}_2$ ) ont des propriétés thermodynamiques très différentes. Il est donc indispensable de prendre en compte ces différences dans la modélisation du comportement du MCP, et ce dès l'étape du design de la solution de stockage afin d'éviter toute erreur de dimensionnement. Sachant que le Fill Factor est un des paramètres essentiels pour les industriels dans le processus de dimensionnement du système, des tels écarts sur la valeur du Fill Factor peuvent clairement compromettre les conditions opératoires optimales. En effet ce paramètre est utilisé par les industriels pour évaluer les performances en stockage/déstockage,

de la géométrie considérée dans les conditions opératoires du système. Il leur est alors possible, au vue de ce critère, d'ajuster les conditions opératoires (en particulier le débit masse et la pression du fluide caloporteur en entrée du module de stockage) afin d'optimiser le Fill Factor et ainsi de répondre au cahier des charges sur la performance du système de stockage.

De plus, nous avons considéré ici des processus de charges et de décharges complets, donc bien que l'on observe des différences dans les dynamiques de transferts thermiques, la quantité globale d'énergie stockée (ou déstockée) est sensiblement la même dans chaque cas. Cependant dans l'optique d'une approche plus réaliste du fonctionnement de ce type de systèmes, des cycles charges/décharges, ces états finaux ne sont pas toujours atteints.

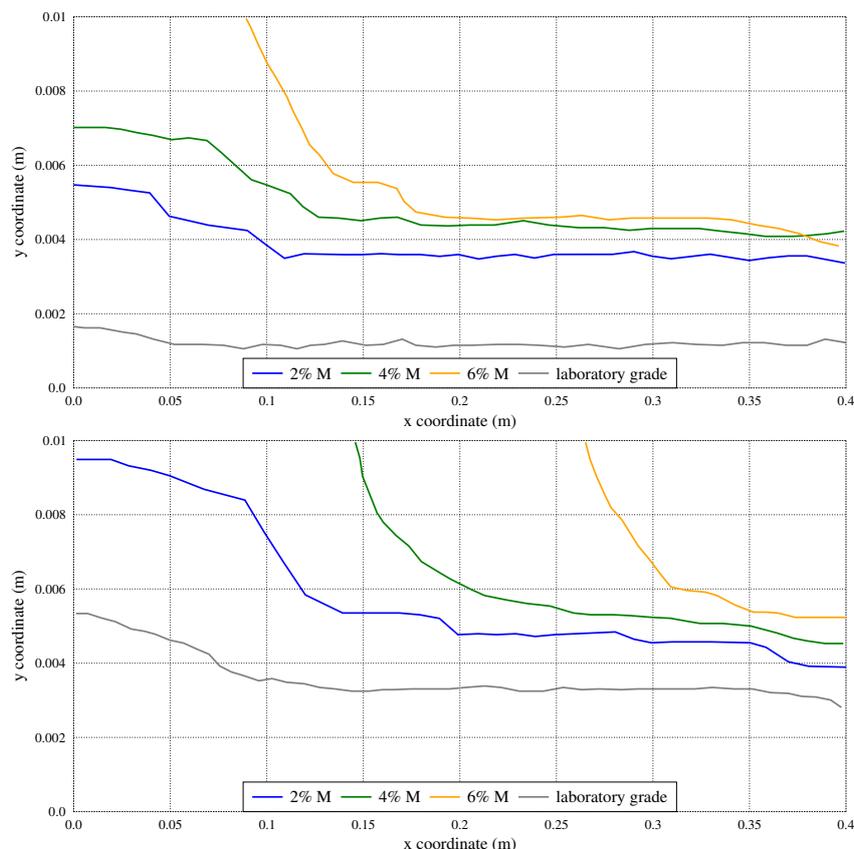


FIGURE 4.13 – Évolution de la position du front de fusion à  $t = [600 - 900]$  s durant la phase de charge - cas GREENSTOCK (la gravité est selon l'axe  $e_x^{\vec{}}$  et la paroi chauffée est en  $y = 0$  m).

### 4.3.3 Cyclage

Si l'on envisage maintenant une situation proche des conditions réelles de fonctionnement de ce type d'installations, il est nécessaire d'envisager un cycle charge/décharge du système de stockage. Les résultats des simulations correspondantes sont fournis sur les figures 4.15 et 4.16. Encore une fois il est clair que selon la façon dont on modélise

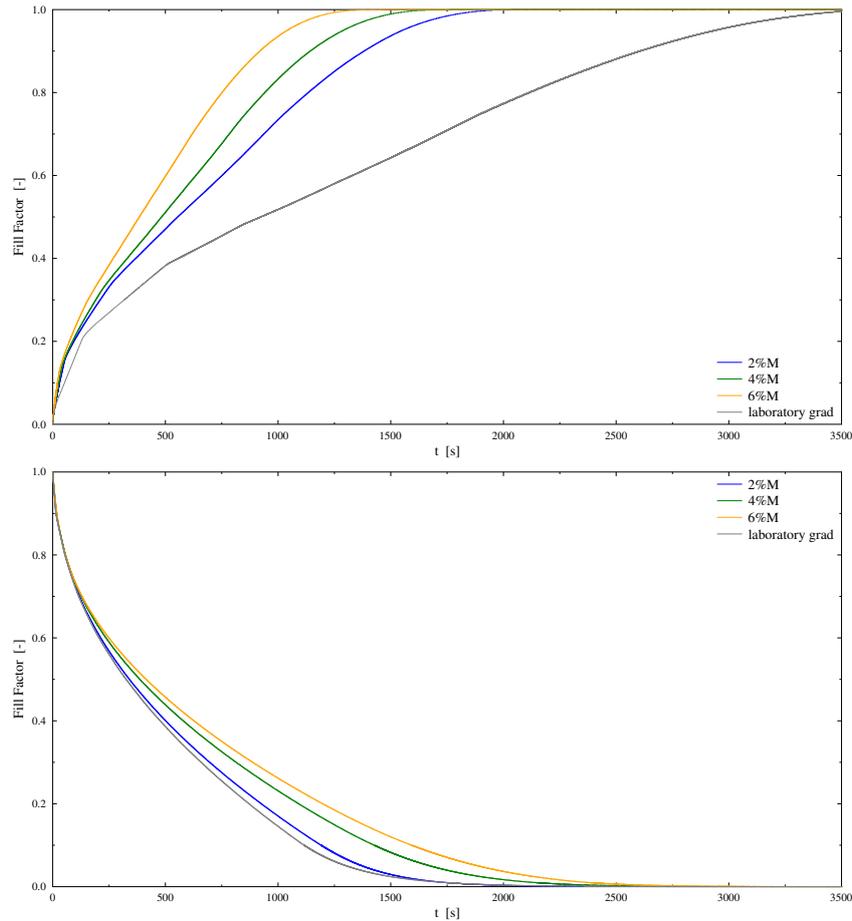


FIGURE 4.14 – Évolution du Fill Factor au cours du temps lors des phases de charge et de décharge - cas GREENSTOCK.

le MCP, on peut aboutir à une erreur sur la quantité totale stockée et de facto sur la quantité d'énergie encore disponible à la fin du cycle. Concrètement, cela signifie que l'on pourrait stopper le processus de stockage bien avant d'être certain d'avoir complètement chargé le système ou au contraire que l'on pourrait maintenir une circulation du fluide caloporteur au-delà du temps nécessaire. En menant une analyse similaire, on comprend que le stock se décharge avec une dynamique bien différente de ce qui était initialement prévu lorsque le nombre de cycles augmente ; en pratique, cela risque de conduire à des situations où aucune énergie ne sera disponible, ce qui implique un arrêt de la production.

En prenant l'exemple de la solution binaire 2K, on observe que dès le second cycle on atteint la capacité maximale de stockage avant la fin de la période de charge, ce qui n'est pas le cas pour l'ensemble des autres simulations. Dès lors on pourrait être amené à estimer que ce matériau est le plus avantageux dans cette situation. Cependant si l'on s'intéresse à la phase de décharge consécutive à la phase de charge du second cycle, on observe que l'énergie déstockée par ce même corps est inférieure à celle libérée par le corps pur. À  $t = 3000$  s, l'écart relatif ( $\%e_{rel} = \frac{FF_{2K}(t=3000s) - FF_{CP}(t=3000s)}{FF_{2K}(t=3000s)}$ ) entre ces deux corps s'élève à 54%. Même si cet écart a tendance à s'estomper lorsque l'on augmente le

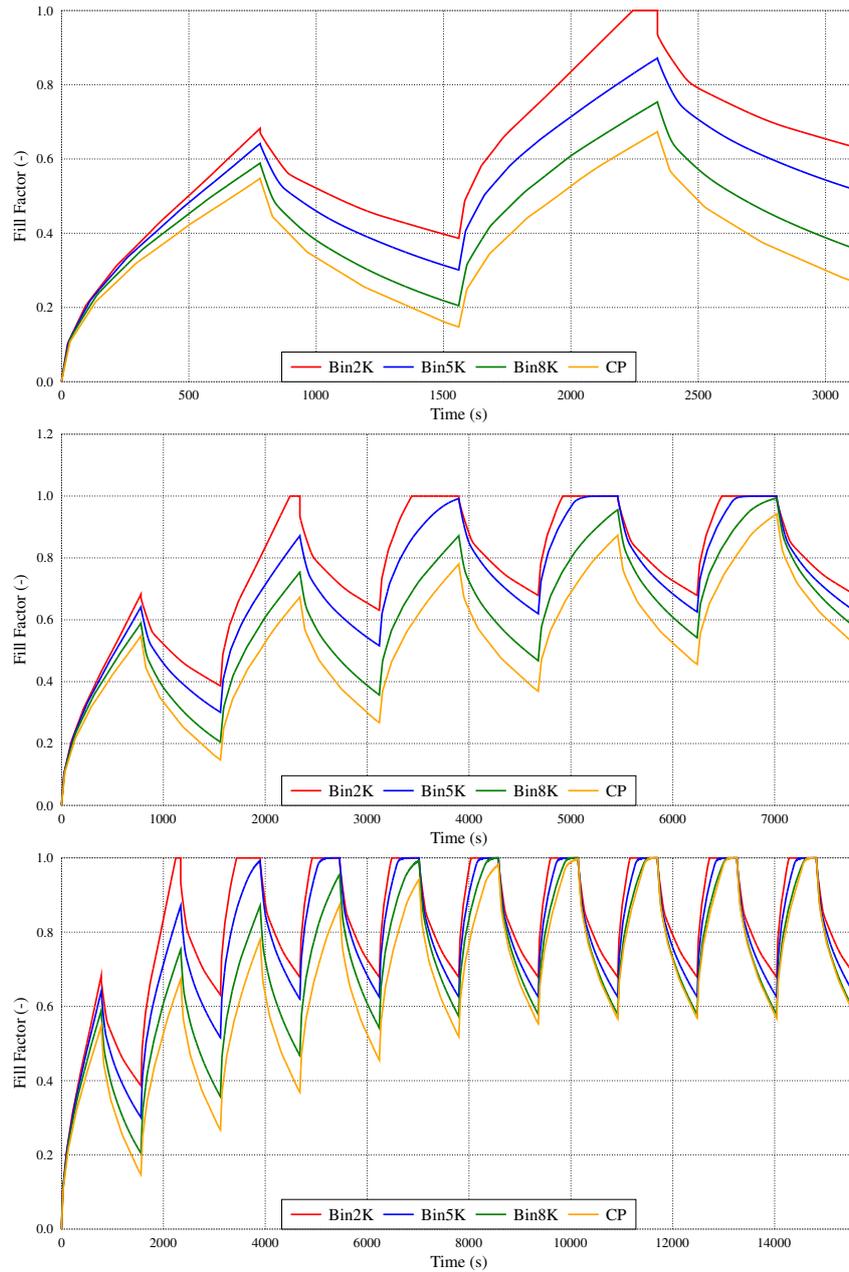


FIGURE 4.15 – Évolution du Fill Factor au cours du temps pour différents nombres de cycles charges/décharges - cas ECOS.

nombre de cycles, le binaire 2K reste le moins favorable puisque présentant toujours la plus faible variation entre l'énergie stockée et celle déstockée.

Comme nous en faisons la remarque dans la section présentant les cas tests, la variation d'enthalpie totale est globalement la même (on observe une légère différence entre les composés de  $NaNO_3$ ) sur la plage de température que nous considérons quelle que soit la fonction enthalpie représentant le corps. Mais cette conclusion n'est valable que dans le cas où les processus de charge et de décharge sont réalisés dans leur totalité et que les

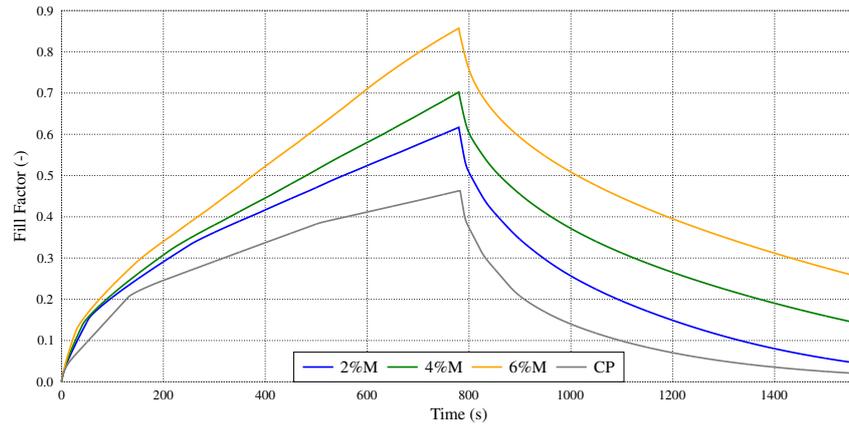


FIGURE 4.16 – Évolution du Fill Factor au cours du temps un cycle de charge/décharge - cas GREENSTOCK.

états finaux (qui deviennent des états initiaux dans le cas d'un cycle) soient les mêmes pour chaque corps. Un processus de fusion/solidification incomplet, signifie que l'on se trouve dans la zone où les courbes  $h(T)$  divergent par leurs comportements. Dans ce cas, le type de modélisation utilisé pour simuler le MCP devient d'autant plus crucial dans l'analyse des performances du système de stockage thermique. C'est exactement le cas de figure qui est rencontré lors d'un cycle.

## 4.4 Conclusion

Au travers de l'analyse d'un critère énergétique, le Fill Factor, il a été démontré dans notre étude l'influence que peut avoir la fonction  $h(T)$ , et par conséquent sa modélisation, sur le comportement thermique du système de stockage par chaleur latente. Cela implique donc que les performances globales, ainsi que les conditions opératoires, dépendent fortement de ce paramètre et donc en amont de la fermeture thermodynamique que l'on va utiliser pour modéliser le MCP.

Les propriétés thermophysiques des MCP ne sont pas forcément des paramètres fixes dans le temps à l'échelle du cycle de vie du système de stockage thermique. Le contact qui existe entre le métal constituant la paroi de l'échangeur et le matériau, les séries de fusion et de solidification sont autant de causes pouvant induire une altération des propriétés du matériau.

Une campagne expérimentale menée au sein du LaTEP a mis en évidence le fait qu'après un certain nombre de cycles, la corrosion du composant métallique de la cellule test en contact avec le MCP entraîne la production de produits dégradés, à savoir le  $NaNO_3$  et les différents composés  $NaNO_3/NaNO_2$ . Il est donc tout à fait envisageable que cela se reproduise dans le cadre d'une installation réelle, et qu'un matériau ayant initialement le comportement d'un corps pur, se dégrade au cours du temps pour finalement avoir les propriétés d'un binaire.

Pour résumer, ces analyses mettent en évidence l'importance d'une bonne caractérisation des propriétés thermophysiques du MCP, et démontrent les conséquences que peuvent avoir les différentes fermetures thermodynamiques sur le fonctionnement de la solution

de stockage.

# Conclusion

C'est dans un contexte de développement de la filière technologique du solaire à concentration à génération directe de vapeur en France, que l'ADEME a financé le projet STARS dans lequel s'inscrit les travaux de thèse de ce manuscrit. Afin de répondre à la problématique majeure de ce type d'installations, à savoir le découplage entre la disponibilité de la ressource et la demande en énergie des consommateurs, et également d'améliorer les performances de ces systèmes en terme de coûts (diminution du prix du kWh électrique), le développement d'une solution de stockage thermique était indispensable. Parmi les différentes technologies existantes, celle qui a retenu l'attention du consortium STARS est celle des systèmes de stockage thermique par chaleur latente, impliquant donc l'utilisation d'un matériau à changement de phase.

Ce choix étant fait, le rôle du LaTEP était d'apporter une expertise sur la caractérisation du MCP et également de mener l'étude de leur comportement thermique lors de leur intégration au système de stockage d'énergie par chaleur latente à l'aide de campagnes expérimentales [189] et numériques.

Du point de vue numérique, puisque c'est l'approche qui nous concerne dans ce manuscrit, il a d'abord fallu, dans un premier temps, sélectionner l'outil de calcul que nous utiliserions pour nos simulations. Notre choix s'est porté sur un logiciel libre de droit, OpenFOAM, afin de s'assurer d'une grande liberté dans la modification du code source et d'ainsi pouvoir y implémenter les différents modèles numériques dont nous aurions besoin. La possibilité de pouvoir diffuser nos travaux sous la forme d'une application solveur qui serait intégrée au code source d'OpenFOAM dans ses futures versions appuyait également ce choix.

Dans un second temps, il a fallu référencer et mener une analyse critique des modèles mathématiques, d'une part, et numérique d'une autre, ayant attrait à la modélisation d'un problème de changement de phase solide-liquide. Cette analyse est présentée dans le chapitre 1. Les premiers travaux significatifs sur le sujet ont été réalisées en 1831 par Clapeyron et Lamé [12] mais ce sont les études menées par Stefan, en 1889 notamment, [1] qui ont marqué le milieu scientifique et qui font qu'aujourd'hui les problématiques de changement de phase d'un corps soient regroupées sous la dénomination de problème de Stefan. Dès lors, cette classe de problèmes a énormément focalisé l'attention des chercheurs et un grand nombre de modèles/formulations a vu le jour. Même s'il existe des systèmes de classification, ceux-ci ne sont pas toujours très clairs. Nous avons donc tâché dans le chapitre 1 de présenter ces derniers de la manière la plus compréhensible pour le lecteur.

Ce qu'il faut retenir, c'est que le problème de Stefan se subdivise en deux sous catégories,

le problème de Stefan à une phase et celui à deux phases (encore appelé problème de Neumann), et que pour résoudre ces dernières il existe plusieurs formulations mathématiques des équations de conservations, elles mêmes regroupées au sein de deux classes, les méthodes à domaine multiple et celles à domaine unique.

À la fin de ce chapitre nous avons choisi de travailler exclusivement avec les méthodes à domaine unique.

Si jusqu'à présent nous nous intéressions uniquement à la formulation du problème d'un point de vue thermique (l'enjeu de développement se situant essentiellement à ce niveau), dans le chapitre 2 nous prenions en compte ce dernier dans sa globalité, à savoir la modélisation de la partie dynamique des fluides et de la partie thermique dans une approche couplée. Nous aboutissions ainsi à un système d'équations aux dérivées partielles complet, reposant sur deux formulations auxquelles il était fait mention sous les noms de Hsource (2.11) et Tsource (2.22). Pour compléter le système, la donnée de la relation liant l'enthalpie à la température est indispensable. Cette dernière est étroitement liée au type de matériau que nous simulons. Dans ce manuscrit nous avons fait le choix de nous intéresser aux corps purs ainsi qu'aux solutions binaires. Nous avons alors présenté deux types de fermetures thermodynamiques correspondant à ces deux catégories de matériaux.

Ce chapitre a également été l'occasion de présenter plus en détail l'outil de calcul CFD OpenFOAM ainsi que la résolution numérique de notre problème.

Une fois nos modèles implémentés dans OpenFOAM et les différents solveurs créés, la première étude numérique menée consistait à déterminer si l'une des formulations Hsource et Tsource était préférable à l'autre dans la résolution des problèmes qui nous concernent. Dans la première partie du chapitre 3 nous avons réalisé une étude comparative théorique pour un problème de Stefan à une phase et également pour un problème de Neumann. Cette première a mené au constat qu'en dehors de toute solution numérique de référence, il était difficile d'établir des critères discriminant l'une ou l'autre des formulations. En cela nous rejoignons les conclusions de Gobin et al [204] et de Bertrand et al [203]. Cependant ayant effectué le calcul d'erreurs, notre analyse proposait les éléments nécessaires à une comparaison quantitative de nos deux formulations ce qui est un plus par rapport aux deux articles que nous venons de citer.

Dans la seconde partie du chapitre 3, nous avons réalisé cette fois une étude comparative expérimentale. Encore une fois, nous sommes arrivés à la conclusion que les éléments d'expériences disponibles dans la littérature ne nous permettaient pas de trancher quant à l'utilisation d'une formulation plutôt qu'une autre. Il appartient alors à l'utilisateur de se fixer des seuils d'acceptabilité, en lien étroit avec le but de la simulation (la tolérance au niveau des écarts de précision n'est pas la même que l'on travaille au design d'un échangeur de plusieurs centaines de kWh ou que l'on cherche à observer un phénomène thermique finement).

Dans le dernier chapitre, nous avons donc fait le choix de ne travailler uniquement, pour cette dernière étude, avec la formulation Hsource et ce essentiellement pour des raisons de stabilité dans le schéma numérique. D'un point de vue système de stockage thermique par chaleur latente, le chapitre 4 est celui qui présente le plus d'intérêt. Ici nous avons observé l'influence de la relation  $h(T)$  sur les processus de charge, de décharge et lors

de plusieurs cycles consécutifs. Au travers du calcul d'un critère de performance énergétique, le fill factor, nous avons démontré l'importance que peut avoir cette relation sur le fonctionnement d'un système de stockage, et de facto, le rôle crucial d'une bonne caractérisation du MCP afin de lui appliquer la fermeture thermodynamique correspondante. Pour faire le lien avec le projet STARS, l'une des raisons du développement de notre modèle était la simulation fine des phénomènes thermiques intervenant dans le système de stockage. En terme d'échelle on se trouve au niveau micro-système. Le but alors était d'utiliser les observations faites au niveau micro pour s'assurer du bon fonctionnement de l'installation solaire au niveau macro. Et clairement, les remarques faites dans le chapitre 4 au niveau micro, peuvent avoir un impact sur le contrôle-commande de tout le système à l'échelle macro.

Cette étude était également l'occasion de coupler les différents travaux, numériques et expérimentaux, réalisés au sein du LaTEP dans le cadre du projet STARS.

Au sortir de cette thèse, nous avons donc développé un solveur permettant la résolution eulérienne des équations de conservation pour un fluide incompressible en présence d'un changement de phase solide-liquide dominé par des effets convectifs. Deux formulations sont d'ores et déjà implémentées ainsi que deux types de fermetures thermodynamiques. Il aurait bien évidemment été intéressant d'élargir le spectre des méthodes, mais la prise en main de l'outil OpenFOAM n'aura pas été aisée et la phase de développement numérique plus longue que prévue. Cette contrainte de temps nous a donc amené à une sélection plus restreinte des méthodes étudiées.

Cependant nous avons l'intention de faire vivre nos modèles, de les améliorer (en prenant en compte la convection solutale par exemple), de les tester et surtout de les partager avec la communauté des utilisateurs d'OpenFOAM.



# Annexe A

## Revue d'articles traitant de la résolution numérique de problèmes de changement de phase.

TABLE A.1 – Revue d'articles traitant de la résolution numérique de problèmes de changement de phase.

Ref.	Méthode	Hypothèses	Commentaires	Validation
[107]	Enthalpy based heat equation - Implicit control volume Method : eq. QDM et eq. continuité de la masse - Predictor corrector method [81] : eq. énergie	2D - Fluide newtonien - Écoulement laminaire - Approximation de Boussinesq - Conduction + convection (thermique et solutale)	Solidification d'un binaire	Numérique [80]
[153]	Enthalpy based heat equation - Coupled explicit/implicit scheme	2D - Convection solutale uniquement	Solidification de mélanges eutectiques	Théorique Jackson-Hunt [212]
				...

TABLE A.1 – suite

Ref.	Méthode	Hypothèses	Commentaires	Validation
[73]	Enthalpy porosity method - Fixed grid	2D - Conduction + convection naturelle en régime laminaire	Fusion d'un métal (gallium)	Expérimental
[109]	Enthalpy based heat equation - Fixed grid	-	Développement d'un schéma de résolution pour la fonction chaleur latente dans le cas de matériaux métallurgiques - Étude de la variation de la fonction inverse de la chaleur latente	Théoriques
[113]	Enthalpy based heat equation - Fixed grid	2D - Phase solide mobile - Écoulement laminaire - Fluide Newtonien et incompressible - $\rho_s = \rho_l = cste$ - Conduction + convection	Solidification d'une solution $NH_4Cl - H_2O$ - Mise en évidence des phénomènes de refonte lors de la solidification	Numérique [194] [213]
				...

TABLE A.1 – suite

Ref.	Méthode	Hypothèses	Commentaires	Validation
[98]	Enthalpy based heat equation - Fixed grid - semi-implicit volume method	2D - Écoulement laminaire instationnaire - Fluide Newtonien incompressible - Approximation de Boussinesq - Conduction + convection (thermique et solutale)	Solidification d'une solution eutectique aqueuse $NH_4Cl - H_2O$	Expérimental [214]
[115]	Enthalpy porosity method - Control volume finite element	2D - Écoulement laminaire - Fluide Newtonien incompressible - Approximation de Boussinesq - Pas de mouvement de la phase solide $u_s = 0ms^{-1}$ - Pas de variation du volume - Propriétés physiques constantes dans tout le domaine simulé - Conduction + convection	Fusion corps pur - Analyse de la structure de l'écoulement induit par la convection naturelle	Numérique [215]
				...

TABLE A.1 – suite

Ref.	Méthode	Hypothèses	Commentaires	Validation
[216]	Fixed grid - Finite difference method	1D - Variation unidimensionnelle de la température - Pas de variation des propriétés thermophysiques de l'eau sur la plage de températures étudiée	Étude du processus de production de glace dans un échangeur à plaques - Calcul d'un critère de performance de l'échangeur	Numérique [217] et [218] et expérimentale (construction d'un banc d'essai)
[219]	Boundary immobilization technique - Finite volume method	2D - Pas de variation des propriétés thermophysiques du MCP avec la température - $\rho_s = \rho_l = cste$ Conduction seule mode de transfert intervenant dans la phase solide	Solidification le long de tubes horizontaux dans un échangeur	Expérimentale (construction d'un banc d'essai)
[110]	Apparent heat capacity - Multi block finite volume method	Axisymétrique - Fluide incompressible - Approximation de Boussinesq - Conduction + convection	Campagne expérimentale et numérique sur la fusion d'une paraffine	Expérimentale (construction d'un banc d'essai)
...				

TABLE A.1 – suite

Ref.	Méthode	Hypothèses	Commentaires	Validation
[220]	Enthalpy based heat equation - Fully implicit finite difference method	1D - Changement de phase isotherme - Pas de surfusion - Pas de convection naturelle - Propriétés thermophysiques du matériau indépendantes de la température	Modèle pour le simulation de MCP macro-encapsulé	Expérimentale (construction d'un banc d'essai)
[221]	Effective heat capacity	1D/2D - Conduction pure en solidification - Les phases liquide et solide du MCP sont considérées comme étant homogènes et isentropiques	Approche système (numérique et expérimentale) - Étude des performances d'un stockage thermique par chaleur latente à tubes (technologie <i>heat pipe</i> ), avec et sans ailette axiale	Expérimentale (construction d'un banc d'essai)
				...

TABLE A.1 – suite

Ref.	Méthode	Hypothèses	Commentaires	Validation
[93]	Enthalpy porosity method - Fixed grid - Finite volume method	2D - Approximation de Boussinesq - Écoulement laminaire, incompressible et bidimensionnel - Les propriétés du MCP sont constantes dans chacune des phases - $\rho_s = \rho_l = cste$ - Conduction + convection	Fusion du gallium	Expérimentale [222]
[?]	Enthalpy method et Effective heat capacity method	2D - Approximation de Boussinesq - $\rho_s = \rho_l = cste$ - $k_s = k_l = cste$ - On néglige le coefficient d'échange convectif dans la phase liquide durant l'étape de solidification	Utilisation du logiciel FEM-LAB (codé en MATLAB) - Étude et comparaison de 2 systèmes de stockage (l'un classique et l'autre avec ailettes) en phase de fusion et de solidification - Tracé des profils de températures en plusieurs points du stockage	Expérimentale (construction d'un banc d'essai) et numérique (comparaison enthalpy method et effective heat capacity method)
...				

TABLE A.1 – suite

Ref.	Méthode	Hypothèses	Commentaires	Validation
[223]	Enthalpy porosity method	2D/3D - Approximation de Boussinesq - Conduction + convection	Approche système d'un stockage thermique par chaleur latente (technologie <i>shell and tube</i> )	Expérimentale [224]
[149]	Enthalpy based heat equation - SIMPLER algorithm	1D/2D - Approximation de Boussinesq - Écoulement laminaire - Fluide incompressible - Convection thermique	Solidification d'un composé binaire eutectique	Numérique [225–227]
[228]	Volume of fluid method (free surface flow) - Fixed grid enthalpy based heat equation control volume (solidification)	2D - Approximation de Boussinesq - Écoulement laminaire - Fluide Newtonien et incompressible - $\rho_s = \rho_l$ - La vitesse dans la phase solide est nulle	Analyse numérique simultanée du remplissage d'un moule et de la solidification d'un composé métallique	-
[229]	Fixed grid - Enthalpy porosity heat equation control volume - Finite difference scheme	2D - Approximation de Boussinesq - Écoulement laminaire - Fluide Newtonien et incompressible - Propriétés thermophysiques constantes	Fusion/solidification du gallium - Comparaison de la structure de l'écoulement et des isothermes avec les données de la littérature	Expérimentale [230]
				...

TABLE A.1 – suite

Ref.	Méthode	Hypothèses	Commentaires	Validation
[82]	Fixed grid - Enthalpy porosity method - PIMPLE solution	2D - Approximation de Boussinesq - Écoulement laminaire - Fluide Newtonien et incompressible	Enthalpy porosity method associée à une fonction fraction massique liquide continue - Simulation d'un échangeur type <i>shell and tube</i>	Expérimentale [231]
[232]	Enthalpy porosity method - VOF (suivi de l'interface air/MCP)	2D - Les phases solide et liquide sont homogènes et isentropique - Écoulement laminaire - Fluide Newtonien et incompressible - Le processus de fusion est axisymétrique - Conduction	Fusion d'un MCP dans un tube verticale - Étude thermique et hydraulique - Comparaison des schéma de discrétisation PISO vs SIMPLE et PRESTO! vs body force weighted	Expérimentale [233]
[152]	Enthalpy based heat equation - Fully implicit finite differences method	1D axi - Les propriétés de la phase solide et liquide sont identiques et constantes sauf pour la masse volumique - Pas de convection	Étude de la solidification sur un tube verticale ailetté d'un MCP - Approche système - Utilisation de la fonction [234]	Expérimentale (construction d'un banc d'essai)
				...

TABLE A.1 – suite

Ref.	Méthode	Hypothèses	Commentaires	Validation
[112]	Enthalpy porosity method	2D - Écoulement laminaire - Utilisation de méthodes développées dans le cadre de l'étude des écoulements turbulents	Modèle de la conductivité augmentée pour prendre en compte les effets convectifs $k_i = \frac{\rho c u T}{\partial i}$	Numérique (comparaison avec un modèle CFD complet)



# Bibliographie

- [1] J. Stefan. Über einige probleme der theorie der wämeleitung. *Sitzungs-Berichte Wien. Akad. Mat. Natur.*, 98 :473–484, 1890.
- [2] F. Neumann. Die partiellen differential-gleichungen der mathematischen physik, nach riemann's vorlesungen. *Braunwschweig*, 2 :118–122, 1901.
- [3] C. Gau and R. Viskanta. Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall. *Journal of Heat Transfer*, 108 :174–181, 1986.
- [4] Y. Wang, A. Amiri, and K. Vafai. An experimental investigation of the melting process in a rectangular enclosure. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42 :3659–3672, 1999.
- [5] H. Muller-Steinhagen, F. Trieb, and F. Trieb. Concentrating solar power : a review of the technology. *Quarterly of the royal academy of engineering*, 18 :43–50, 2004.
- [6] D. Laing, C. Bahl, and T. Bauer. Thermal energy storage for direct steam generation. *Solar Energy*, 85 :627–633, 2011.
- [7] P. Papon, J. Leblond, and P. H. E. Meijer. *The physics of phase transitions : concepts and applications*. Advanced Texts in Physics. Springer, 2<sup>nd</sup> edition, 2006.
- [8] ECOS Pau 2015. *Numerical modelling of a latent thermal energy storage system for high efficiency processes*, 2015.
- [9] IEA-ECES conference Greenstock Beijing 2015. *Latent heat thermal energy storage system : numerical analysis of the influence of the enthalpy function on the charge/discharge processes*, 2015.
- [10] W. H. Cubberley. *Metal Handbook - Properties and Selection : Nonferrous Alloys and Pure Metals*. American Society of Metals, 1979.
- [11] Commissariat général au développement durable. Chiffres clés de l'environnement - édition 2013, 2013.
- [12] B.P.E. Clapeyron and M.M. Lamé. *Mémoire sur la solidification par refroidissement d'un globe liquide*. 1831.
- [13] G.W. Evans. A note on the existence of a solution to a problem of stefan. *Q Appl. Math.*, 9 :185–193, 1951.
- [14] J. Douglas. A uniqueness theorem for the solution of a stefan problem. *Proc. Am. Math. Soc.*, 8 :402–408, 1957.
- [15] M.N. Ozisik. *Heat conduction*. Wiley, 1980.
- [16] John Crank. *Free and moving boundary problems*. Oxford Science Publications, 1984.

- [17] J.M. Hill. *One-dimensional Stefan problems : an introduction*. Longman scientific technical, 1987.
- [18] R.H. Nochetto, M. Paolini, and C. Verdi. An adaptative finite element method for two-phase stefan problems in two space dimensions, part ii : implementation and numerical experiments. *SIAM J. Sci Comput*, 12 :1207–1244, 1991.
- [19] N. Provatas, N. Goldenfeld, and J. Dantzig. Efficient computaion of dendritic microstructures using adaptive mesh refinement. *Phys Rev Lett*, 80 :3308–3311, 1998.
- [20] N. Provatas, N. Goldenfeld, and J. Dantzig. Adaptive mesh refinement computation of solidification microstructures using dynamic data structures. *J Comput Phys*, 148 :265–290, 1999.
- [21] M. Ainsworth and J.T. Oden. *A posteriori error estimation in finite element analysis, pure and applied mathematics*. Interscience, 2000.
- [22] J. A. Mackenzie and M. L. Robertson. A moving mesh method for the solution of the one-dimensional phase-field equations. *Journal of Computational Physics*, 181(2) :526 – 544, 2002.
- [23] J. A. Mackenzie and M. L. Robertson. The numerical solution of one-dimensional phase change problems using an adaptive moving mesh method. *Journal of Computational Physics*, 161(2) :537 – 557, 2000.
- [24] J.A. Mackenzie and W.R. Mekwi. *On the use of moving mesh methods to solve PDEs*. Beijing : Science Press, 2007.
- [25] Z. Tan, K.M. Lim, and B.C. Khoo. An adaptive mesh redistribution method for the incompressible mixture flows using phase-field model. *J Comput Phys*, 225 :1137–1158, 2007.
- [26] R Bonnerot and P Jamet. Numerical computation of the free boundary for the two-dimensional Stefan problem by space-time finite elements. *Journal of Computational Physics*, 25(2) :163 – 181, 1977.
- [27] E. M. Sparrow, S. V. Patankar, and S. Ramadhyani. Analysis of melting in the presence of natural convection in the melt region. *Journal of Heat Transfer*, 99(4) :520–526, 1977.
- [28] Hisham M. Ettouney and Robert A. Brown. Finite-element methods for steady solidification problems. *Journal of Computational Physics*, 49(1) :118 – 150, 1983.
- [29] R. M. Furzeland. A comparative study of numerical methods for moving boundary problems. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 26(4) :411–429, 1980.
- [30] A. Gadgil and D. Gobin. Analysis of two-dimensional melting in rectangular enclosures in presence of convection. *ASME Journal of Heat Transfer*, 106(1) :20–26, 1984.
- [31] James M. Hyman. Numerical methods for tracking interfaces. *Physica D*, pages 396–407, 1984.
- [32] E. M. Sparrow and Y. Ohkubo. Numerical analysis of two-dimensional transient freezing including solid-phase and tube-wall conduction and liquid-phase natural convection. *Numerical Heat Transfer*, 9(1) :59–77, 1986.

- [33] E. M. Sparrow and Y. Ohkubo. Numerical predictions of freezing in a vertical tube. *Numerical Heat Transfer*, 9(1) :79–95, 1986.
- [34] Scott. D. Gilmore and Selçuk. I. Güçeri. Three-dimensional solidification : A numerical approach. *Numerical Heat Transfer*, 14(2) :165–186, 1988.
- [35] S.E. Hibbert, N.C. Markatos, and V.R. Voller. Computer simulation of moving-interface, convective, phase-change processes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31(9) :1785 – 1795, 1988.
- [36] J. M. Floryan and H. Rasmussen. Numerical methods for viscous flow with moving boundaries. *Appl. Mech. Rev.*, 42(12) :323–341, 1989.
- [37] M. Rappaz. Modelling of microstructure formation in solidification processes. *International Materials Review*, 34(3) :93–123, 1989.
- [38] M. Lacroix and V. R. Voller. Finite difference solutions of solidification phase change problems : transformed versus fixed grids. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 17(1) :25–41, 1990.
- [39] G. H. Yeoh, M. Behnia, and G. de Vahl Davis. A numerical study of three-dimensional natural convection during freezing of water. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30(4) :899–914, 1990.
- [40] Marcel Lacroix. Etude numérique de la fusion d'un métal pur dans une enceinte avec une paroi chauffée glissante. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34(7) :1663 – 1677, 1991.
- [41] A.A. Samarskii, P.N. Vabishchevich, O.P. Iliev, and A.G. Churbanov. Numerical simulation of convection/diffusion phase change problems—a review. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36(17) :4095 – 4106, 1993.
- [42] SergioR. Idelsohn, MarioA. Storti, and LuisA. Crivelli. Numerical methods in phase-change problems. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 1(1) :49–74, 1994.
- [43] M. Fabbri and V. R. Voller. Numerical solution of plane-front solidification with kinetic undercooling. *Num. Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 27(4) :467–486, 1995.
- [44] Henry Hu and Stavros A. Argyropoulos. Mathematical modelling of solidification and melting : a review. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 4(4), 1996.
- [45] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann, and A. Karma. Phase-field simulation of solidification. *Annual Review of Materials Research*, 32(1) :163–194, 2002.
- [46] Chin-Yuan Li, Suresh V. Garimella, and James E. Simpson. Fixed-grid front-tracking algorithm for solidification problems, part I : Method and validation. *Num. Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 43(2) :117–141, 2003.
- [47] V.R. Voller, A. Mouchmov, and M. Cross. An explicit scheme for coupling temperature and concentration fields in solidification models. *Applied Mathematical Modelling*, 28(1) :79 – 94, 2004. Mathematical Modelling in Metals Processing.
- [48] V.R. Voller. An enthalpy method for modeling dendritic growth in a binary alloy. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(3-4) :823 – 834, 2008.

- [49] V. R. Voller. Numerical methods for phase-change problems. In W. J. Minkowycz, E. M. Sparrow, and J. Y. Murthy, editors, *Handbook of Numerical Heat Transfer*, chapter 19, pages 593–622. John Wiley & Sons, Inc., second edition, 2009.
- [50] Victor D. Fachinotti, Steven Le Corre, Nicolas Triolet, Manuel Bobadilla, and Michel Bellet. Two-phase thermo-mechanical and macrosegregation modelling of binary alloys solidification with emphasis on the secondary cooling stage of steel slab continuous casting processes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 67(10) :1341–1384, 2006.
- [51] S. Jana, S. Ray, and F. Durst. A numerical method to compute solidification and melting processes. *Applied Mathematical Modelling*, 31(1) :93 – 119, 2007.
- [52] J. Crank. Two methods for the numerical solution of moving boundary problems in diffusion and heat flow. *Quart. J. Mech. Appl. Math.*, 10 :220–231, 1957.
- [53] W.D. Murray and F. Landis. Numerical and macmach solutions of the transient heat conduction problems involving melting or freezing. *J. Heat Transfer*, 81 :106–112, 1959.
- [54] A.K. Verma, S. Chandra, and B.K. Dhindaw. An alternative fixed grid method for solution of the classical one-phase stefan problem. *App. Math. and Comput.*, 158 :573–584, 2004.
- [55] N. R. Eyres, D. R. Hartree, J. Ingham, R. Jackson, R. J. Sarjant, and J. B. Wagstaff. The calculation of variable heat flow in solids. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 240(813) :pp. 1–57, 1946.
- [56] Milton E. Rose. A method for calculating solutions of parabolic equations with a free boundary. *Mathematics of Computation*, 14(71) :pp. 249–256, 1960.
- [57] L.W. Hunter and J.R. Kuttler. The enthalpy method for heat conduction problems with moving boundaries. *J. Heat Transfer*, 111 :239–242, 1989.
- [58] M. Amdjadi, B. Fabre, and C. Meynadier. Resolution unidimensionnelle d’un probleme de stefan par une méthode à pas de temps variable. application a une bille de chliarolithe. *Rev. Gén. Therm.*, 339 :129–134, 1990.
- [59] V. Voller and M. Cross. Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 24(3) :545 – 556, 1981.
- [60] Karl-Hermann Tacke. Discretization of the explicit enthalpy method for planar phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 21(3) :543–554, 1985.
- [61] D. Poirier and M. Salcudean. On numerical methods used in mathematical modeling of phase change in liquid metals. *Journal of Heat Transfer*, 110(3) :562–570, 1988.
- [62] M. Salcudean and Z. Abdullah. On the numerical modelling of heat transfer during solidification processes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 25(2) :445–473, 1988.
- [63] Jonathan A. Dantzig. Modelling liquid–solid phase changes with melt convection. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 28(8) :1769–1785, 1989.

- [64] V.R. Voller. An overview of numerical methods for solving phase change problems. *Advances in Numerical Heat Transfer*, 1, 1996.
- [65] S.L. Lee and R.y. Tzong. An enthalpy formulation for phase change problems with a large thermal diffusivity jump across the interface. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34(6) :1491 – 1502, 1991.
- [66] L. Clavier, E. Arquis, J. P. Caltagirone, and D. Gobin. A fixed grid method for the numerical solution of phase change problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37(24) :4247–4261, 1994.
- [67] A. Laouadi, M. Lacroix, and N. Galanis. A numerical method for the treatment of discontinuous thermal conductivity in phase change problems. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 8(3) :265–287, 1998.
- [68] Tomasz A. Kowalewski and Dominique Gobin, editors. *Phase Change with Convection : Modelling and Validation*, volume 449 of *CISM International Centre for Mechanical Sciences*. Springer-Verlag Wien, 2004.
- [69] Graham E. Bell. On the performance of the enthalpy method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 25(4) :587 – 589, 1982.
- [70] V. R. Voller and M. Cross. Estimating the solidification/melting times of cylindrically symmetric regions. *Int. J. Heat Mass Transfer.*, 24(9) :1457–1462, 1981.
- [71] V. R. Voller and C. R. Swaminathan. Treatment of discontinuous thermal conductivity in control-volume solutions of phase-change problems. *Num. Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 24 :161–180, 1993.
- [72] V.R. Voller and C. Prakash. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(8) :1709 – 1719, 1987.
- [73] A. D. Brent, V. R. Voller, and K. J. Reid. Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change : application to the melting of a pure metal. *Num. Heat Transfer, Part A : Applications*, 13(3) :297–318, 1988.
- [74] Y. Cao and A. Faghri. A numerical analysis of phase-change problems including natural convection. *J. Heat Transfer*, 112(3) :812–816, 1990.
- [75] M. C. Flemings. *Solidification Processing*. McGraw-Hill, New York, 1974.
- [76] H. D. Brody and M. C. Flemings. Solute redistribution in dendritic solidification. *Trans. Met. Soc. AIME*, 236 :615–624, 1966.
- [77] T. W. Clyne and W. Kurz. Solute redistribution during solidification with rapid solid state diffusion. *Metallurgical Transactions A*, 12(6) :965–971, 1981.
- [78] V. Voller. Fast implicit finite-difference method for the analysis of phase change problems. *Numerical Heat Transfer*, 1990.
- [79] V. Voller and C.R. Swaminatha. General source-based method for solidification phase change. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 19 :175–189, 1991.
- [80] C.R. Swaminathan and V.R. Voller. A general enthalpy method for modeling solidification processes. *Metallurgical Transactions B*, 23(5) :651–664, 1992.
- [81] C. R. Swaminathan and V. R. Voller. On the enthalpy method. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 3(3) :233–244, 1993.

- [82] Fabian Rösler and Dieter Brüggeman. Shell-and-tube type latent heat thermal energy storage : numerical analysis and comparison with experiments. *Heat and Mass Transfer*, 47(1027-1033), 2011.
- [83] W. Donald Rolph and Klaus-Jürgen Bathe. An efficient algorithm for analysis of nonlinear heat transfer with phase changes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 18 :119–134, 1982.
- [84] V. R. Voller. Fast implicit finite-difference method for the analysis of phase change problems. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 17(2) :155–169, 1990.
- [85] R. Viswanath and Y. Jaluria. A comparison of different solution methodologies for melting and solidification problems in enclosures. *Num. Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 24(1) :77–105, 1993.
- [86] Diego Celentano, Eugenio Oñate, and Sergio Oller. A temperature-based formulation for finite element analysis of generalized phase-change problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37(20) :3441–3465, 1994.
- [87] Víctor D. Fachinotti, Alberto Cardona, and Alfredo E. Huespe. A fast convergent and accurate temperature model for phase-change heat conduction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(12) :1863–1884, 1999.
- [88] B. Ghasemi and M. Molki. Melting of unfixed solids in square cavities. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 20(4) :446 – 452, 1999.
- [89] Marilena Gangi and Fulvio Stella. Analysis of natural convection during solidification of a pure metal. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 11(3-4) :341–349, 1999.
- [90] Marcela A. Cruchaga and Diego J. Celentano. A finite element thermally coupled flow formulation for phase-change problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 34(4) :279–305, 2000.
- [91] Fulvio Stella and Marilena Gangi. Melting of a pure metal on a vertical wall : numerical simulation. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 38(2) :193–208, 2000.
- [92] Marcela A. Cruchaga and Diego J. Celentano. A fixed-mesh finite element thermally coupled flow formulation for the numerical analysis of melting processes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 51 :1231–1258, 2001.
- [93] Sin Kim, Min Chan Kim, and Sang-Baek Lee. Prediction of melting process driven by conduction-convection in a cavity heated from the side. *Korean J. Chem. Eng.*, 18(5) :593–598, 2001.
- [94] Q. Duan, F.L. Tan, and K.C. Leong. A numerical study of solidification of n-hexadecane based on the enthalpy formulation. *Journal of Materials Processing Technology*, 120(1–3) :249 – 258, 2002.
- [95] Zdravko Virag, Marija Živić, and Antun Galović. Influence of natural convection on the melting of ice block surrounded by water on all sides. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(21–22) :4106 – 4115, 2006.
- [96] Kay Wittig and Petr A Nikrityuk. Three-dimensionality of fluid flow in the benchmark experiment for a pure metal melting on a vertical wall. *IOP Conf. Series : Materials Science and Engineering*, 27 :1–8, 2011.

- [97] H. El Qarnia, A. Draoui, and E.K. Lakhali. Computation of melting with natural convection inside a rectangular enclosure heated by discrete protruding heat sources. *Applied Mathematical Modelling*, 37(6) :3968 – 3981, 2013.
- [98] M. Dhar, N. Barman, S. Mandal, and H. Chattopadhyay. Remelting and interface dynamics during solidification of a eutectic solution in a top-cooled rectangular cavity : A numerical study. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 77(0) :730 – 737, 2014.
- [99] T. Fujii, D. R. Poirier, and M. C. Flemings. Macrosegregation in a multicomponent low alloy steel. *Metallurgical Transactions B*, 10(3) :331–339, 1979.
- [100] V. R. Voller, M. Cross, and N. C. Markatos. An enthalpy method for convection/diffusion phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24(1) :271–284, 1987.
- [101] C. Beckermann and R. Viskanta. Double-diffusive convection during dendritic solidification of a binary mixture. *Physico-Chemical Hydrodynamics*, 10(2) :195–213, 1988.
- [102] Gustav Amberg. Computation of macrosegregation in an iron-carbon cast. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34(1) :217 – 227, 1991.
- [103] S. D. Felicelli, J. C. Heinrich, and D. R. Poirier. Simulation of freckles during vertical solidification of binary alloys. *Metallurgical Transactions B*, 22(6) :847–859, 1991.
- [104] H. Shahani, G. Amberg, and H. Fredriksson. On the formation of macrosegregations in unidirectionally solidified Sn-Pb and Pb-Sn alloys. *Metallurgical Transactions A*, 23(8) :2301–2311, 1992.
- [105] S.L. Lee and R.Y. Tzong. Latent heat method for solidification process of a binary alloy system. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(7) :1237 – 1247, 1995.
- [106] C.R. Swaminathan and V.R. Voller. Towards a general numerical scheme for solidification systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(12) :2859 – 2868, 1997.
- [107] G. Arampatzis and D. Assimacopoulos. Numerical modeling of convection-diffusion phase change problems. *Computational Mechanics*, 21(4-5) :409–415, 1998.
- [108] Diego Celentano and Marcela Cruchaga. A thermally coupled flow formulation with microstructural evolution for hypoeutectic cast-iron solidification. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 30(4) :731–744, 1999.
- [109] Suman Chakraborty and Pradip Dutta. A generalized formulation for evaluation of latent heat functions in enthalpy-based macroscopic models for convection-diffusion phase change processes. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 32(3) :562–564, 2001.
- [110] Benjamin J. Jones, Dawei Sun, Shankar Krishnan, and Suresh V. Garimella. Experimental and numerical study of melting in a cylinder. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(15–16) :2724 – 2738, 2006.
- [111] R. Pardeshi, V.R. Voller, A.K. Singh, and P. Dutta. An explicit–implicit time stepping scheme for solidification models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(13–14) :3399 – 3409, 2008.

- [112] Guillaume Vidalain, Louis Gosselin, and Marcel Lacroix. An enhanced thermal conduction model for the prediction of convection dominated solid–liquid phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(7–8) :1753 – 1760, 2009.
- [113] Prodyut R. Chakraborty and Pradip Dutta. A generalized enthalpy update scheme for solidification of a binary alloy with solid phase movement. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 42(6) :1075–1079, 2011.
- [114] J. Guo and C. Beckermann. Three-dimensional simulation of freckle formation during binary alloy solidification : effect of mesh spacing. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 44 :559–576, 2003.
- [115] Mehdi Fteiti and Sassi Ben Nasrallah. Numerical study of interaction between the fluid structure and the moving interface during the melting from below in a rectangular closed enclosure. *Comput. Mech*, 35 :161–169, 2005.
- [116] C. Bonacina, G. Comini, A. Fasano, and M. Primicerio. Numerical solution of phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 16(10) :1825 – 1832, 1973.
- [117] B.M. Budak, E.N. Sobol’eva, and A.B. Uspenskii. A difference method with coefficient smoothing for the solution of stefan problems. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 5(5) :59 – 76, 1965.
- [118] O. A. Oleinik. A method of solution of the general Stefan problem. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 135(1054-1057), 1960.
- [119] S. L. Kamenomostskaja. On Stefan’s problem. *Mat. Sb.*, 53(95) :485–514, 1965.
- [120] H.T. Hashemi and C.M. Sliepcevich. A numerical method for solving two-dimensional problems of heat conduction with change of phase. *Chem. Eng. Prog. Symp. Series*, 63(79) :34–41, 1967.
- [121] Q.T. Pham. A fast, unconditionally stable finite-difference scheme for heat conduction with phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 28(11) :2079 – 2084, 1985.
- [122] G. Comini, S. Del Giudice, and O. Saro. A conservative algorithm for multidimensional conduction phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30(4) :697–709, 1990.
- [123] G. Comini, S. Del Giudice, R. W. Lewis, and O. C. Zienkiewicz. Finite element solution of non-linear heat conduction problems with special reference to phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 8(3) :613–624, 1974.
- [124] S. Del Giudice, G. Comini, and R. W. Lewis. Finite element simulation of freezing processes in soils. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 2(3) :223–235, 1978.
- [125] L.E. Goodrich. Efficient numerical technique for one-dimensional thermal problems with phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 21(5) :615 – 621, 1978.
- [126] K. Morgan, R. W. Lewis, and O. C. Zienkiewicz. An improved algorithm for heat conduction problems with phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 12(7) :1191–1195, 1978.

- [127] Boris Rubinsky and Ernest G. Cravahlo. A finite element method for the solution of one-dimensional phase change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 24(12) :1987 – 1989, 1981.
- [128] B.G. Thomas, I.V. Samarasekera, and J.K. Brimacombe. Comparison of numerical modeling techniques for complex, two-dimensional, transient heat-conduction problems. *Metallurgical Transactions B*, 15(2) :307–318, 1984.
- [129] J. S. Hsiao and B. T. F. Chung. An efficient algorithm for finite element solution to two-dimensional heat transfer with melting and freezing. *ASME Journal of Heat Transfer*, 108(2) :462–464, 1986.
- [130] Y. Rabin and E. Korin. An efficient numerical solution for the multidimensional solidification (or melting) problem using a microcomputer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36(3) :673–683, 1993.
- [131] Q. T. Pham. Comparison of general-purpose finite element methods for the Stefan problem. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 27(4) :417–435, 1995.
- [132] J. Bransier. Stockage periodique par chaleur latente aspects fondamentaux liés a la cinétique des transferts. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 22(6) :875 – 883, 1979.
- [133] Shimin Wang, Amir Faghri, and Theodore L. Bergman. A comprehensive numerical model for melting with natural convection. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, 53(9-10) :296–2000, 2010.
- [134] G. Comini and S. Del Giudice. Thermal aspects of cryosurgery. *J. Heat Transfer*, 98(4) :543–550, 1976.
- [135] E. C. Lemmon. Phase change techniques for finite element conduction codes. In R. W. Lewis and K. Morgan, editors, *Numerical methods in thermal problems*, pages 149–158. Pineridge Press, Swansea, 1979.
- [136] C.-J. Ho and C.H. Chu. Numerical simulation of heat penetration through a vertical rectangular phase change material/air composite cell. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39(9) :1785 – 1795, 1996.
- [137] M. Costa, D. Buddhi, and A. Oliva. Numerical simulation of a latent heat thermal energy storage system with enhanced heat conduction. *Energy Conversion and Management*, 39(3-4) :319 – 330, 1998.
- [138] JM Khodadadi and Y Zhang. Effects of buoyancy-driven convection on melting within spherical containers. *Int J Heat Mass Transf*, 44 :1605–1618, 2001.
- [139] R. Velraj, R.V. Seeniraj, B. Hafner, C Faber, and K Schwarzer. Heat transfer enhancement in a latent heat storage system. *Solar Energy*, 65 :171–180, 1999.
- [140] S.A Fomin and T.S Saitoh. Melting of unfixed material in spherical capsule with non-isothermal wall. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42(22) :4197 – 4205, 1999.
- [141] KEI Omari, T Kouksou, and YL Guer. Impact of shape of container on natural convection and melting inside enclosures used for passive cooling of electronic devices. *Appl. Therm. Eng*, 31 :3022–3035, 2011.
- [142] Gunter H. Meyer. Multidimensional Stefan problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 10(3) :522–538, 1973.

- [143] N. Shamsundar and E. M. Sparrow. Analysis of multidimensional conduction phase change via the enthalpy model. *Journal of Heat Transfer*, 97(3) :333–340, 1975.
- [144] N. Shamsundar and E. M. Sparrow. Effect of density change on multidimensional conduction phase change. *Journal of Heat Transfer*, 98(4) :550–557, 1976.
- [145] A.B. Crowley. Numerical solution of Stefan problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 21(2) :215 – 219, 1978.
- [146] R. E. White. A modified finite difference scheme for the Stefan problem. *Math. Comp.*, 41(164) :337–347, 1983.
- [147] Gunter H. Meyer. The numerical solution of phase change problems. In David E. Loper, editor, *Structure and Dynamics of Partially Solidified Systems*, volume 125 of *NATO ASI Series*, pages 141–156. Springer Netherlands, 1987.
- [148] B. Basu and J. A. Sekhar. Modeling of multidimensional solidification of an alloy. *Metallurgical Transactions A*, 20(9) :1833–1845, 1989.
- [149] Curtis M. Oldenburg and Frank J. Spera. Numerical modeling of solidification and convection in a viscous pure binary eutectic system. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34(8) :2107 – 2121, 1991.
- [150] C.-J. Ho and C.H. Chu. Periodic melting within a square enclosure with an oscillatory surface temperature. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36(3) :725 – 733, 1993.
- [151] C.-J. Ho and C.H. Chu. The melting process of ice from a vertical wall with time-periodic temperature perturbation inside a rectangular enclosure. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36(13) :3171 – 3186, 1993.
- [152] R. Velraj, R. V. Seeniraj, B. Hafner, C. Faber, and K. Schwarzer. Experimental analysis and numerical modelling of inward solidification on a finned vertical tube for a latent heat storage unit. *Solar Energy*, 60(5) :281–290, 1997.
- [153] Anirban Bhattacharya, Apoorva Kiran, Shyamprasad Karagadde, and Pradip Dutta. An enthalpy method for modeling eutectic solidification. *Journal of Computational Physics*, 262(0) :217 – 230, 2014.
- [154] J. F. Ciavaldini. Analyse numérique d’un problème de Stefan à deux phases par une méthode d’éléments finis. *SIAM J. Numer. Anal.*, 12(3) :464–487, 1975.
- [155] G. E. Bell and A. S. Wood. On the performance of the enthalpy method in the region of a singularity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 19(11) :1583–1592, 1983.
- [156] Q.T. Pham. The use of lumped capacitance in the finite-element solution of heat conduction problems with phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 29(2) :285 – 291, 1986.
- [157] P. Thévoz, J. L. Desbiolles, and M. Rappaz. Modelling of equiaxed microstructure formation in casting. *Metallurgical Transactions A*, 20(2) :311–322, 1989.
- [158] Kumar K. Tamma and Raju R. Namburu. Recent advances, trends and new perspectives via enthalpy-based finite element formulations for applications to solidification problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30(4) :803–820, 1990.

- [159] N. Ahmad, Combeau, J.-L. Desbiolles, T. Jalanti, G. Lesoult, J. Rappaz, M. Rappaz, and C. Stomp. Numerical simulation of macrosegregation : a comparison between finite volume and finite element method. predictions and confrontation with experiments. *Metalurgical and materials transactions*, 29A :617–630, 1998.
- [160] Zhen-Xiang Gong and Arun S. Mujumdar. Flow and heat transfer in convection-dominated melting in a rectangular cavity heated from below. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 41(17) :2573 – 2580, 1998.
- [161] K.W. Ng, Z.X. Gong, and A.S. Mujumdar. Heat transfer in free convection-dominated melting of a phase change material in a horizontal annulus. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 25(5) :631 – 640, 1998.
- [162] Zhen-Xiang Gong, Sakamon Devahastin, and Arun S. Mujumdar. Enhanced heat transfer in free convection-dominated melting in a rectangular cavity with an isothermal vertical wall. *Applied Thermal Engineering*, 19(12) :1237 – 1251, 1999.
- [163] K. C. Chiang and H. L. Tsai. Shrinkage-induced fluid flow and domain change in two-dimensional alloy solidification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(7) :1763 – 1770, 1992.
- [164] K. C. Chiang and H. L. Tsai. Interaction between shrinkage-induced fluid flow and natural convection during alloy solidification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(7) :1771 – 1778, 1992.
- [165] Stéphane Gibout, Erwin Franquet, Jean-Pierre Bédécarrats, and Jean-Pierre Dumas. Comparison of different modelings of pure substances during melting in a DSC experiment. *Thermochimica Acta*, 538 :86, 2012.
- [166] Erwin Franquet, Stéphane Gibout, Jean-Pierre Bédécarrats, Didier Hailot, and Jean-Pierre Dumas. Inverse method for the identification of the enthalpy of phase change materials from calorimetry experiment. *Thermochimica Acta*, 546 :61–80, 2012.
- [167] Stéphane Gibout, Erwin Franquet, William Maréchal, and Jean-Pierre Dumas. On the use of a reduced model for the simulation of melting of solutions in DSC experiments. *Thermochimica Acta*, 566 :118–123, 2013.
- [168] HM Ettouney and RA Brown. Finite-element methods for steady solidification problems. *J. Comput. Phys.*, 49 :118–150, 1982.
- [169] R. L. McAdie, J. T. Cross, R. W. Lewis, and D. T. Gethin. A finite element enthalpy technique for solving coupled nonlinear heat conduction/mass diffusion problems with phase change. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 5(10) :907–921, 1995.
- [170] C. Bonacina, G Comini, A Fasano, and M Pimicerio. Numerical solution of phase-change problems. *Int J Heat Mass Transf*, 16 :1825–1832, 1973.
- [171] V.R. Voller and S. Peng. An enthalpy formulation based on an arbitrarily deforming mesh for solution of the Stefan problem. *Computational Mechanics*, 14(5) :492–502, 1994.
- [172] V.R. Voller, N. Markatos, and M. Cross. Techniques for accounting for the moving interface in a convection/diffusion phase change. volume 1, pages 595–609, Swansea, Wales, 1985. Pineridge Press, Swansea, Wa.

- [173] D Clentano, E Onate, and S Oller. A temperature based formulation for finite element analysis of generalized phase change problems. *Int J Num Meth Eng*, 37 :3441–3465, 1994.
- [174] Abduljalil A. Al-Abidi, Sohif Mat, K. Sopian, M.Y. Sulaiman, and Abdulrahman Th Mohammad. Numerical study of PCM solidification in a triplex tube heat exchanger with internal and external fins. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 61 :684 – 695, 2013.
- [175] Abduljalil A. Al-Abidi, Sohif Mat, K. Sopian, M.Y. Sulaiman, and Abdulrahman. Th. Mohammad. Experimental study of melting and solidification of PCM in a triplex tube heat exchanger with fins. *Energy and Buildings*, 68, Part A :33 – 41, 2014.
- [176] K.A.R. Ismail, J.R. Henríquez, L.F.M. Moura, and M.M. Ganzarolli. Ice formation around isothermal radial finned tubes. *Energy Conversion and Management*, 41(6) :585 – 605, 2000.
- [177] K.A.R Ismail, C.L.F Alves, and M.S. Modesto. Numerical and experimental study on the solidification of PCM around a vertical axially finned isothermal cylinder. *Applied Thermal Engineering*, 21(1) :53 – 77, 2001.
- [178] M. Lacroix. Numerical simulation of a shell-and-tube latent heat thermal energy storage unit. *Solar Energy*, 50(4) :357 – 367, 1993.
- [179] Mehmet Esen, Aydin Durmuş, and Ayla Durmuş. Geometric design of solar-aided latent heat store depending on various parameters and phase change materials. *Solar Energy*, 62(1) :19 – 28, 1997.
- [180] Martin Longeon, Adèle Soupert, Jean-François Fourmigué, Arnaud Bruch, and Philippe Marty. Experimental and numerical study of annular {PCM} storage in the presence of natural convection. *Applied Energy*, 112(0) :175 – 184, 2013.
- [181] K.A.R. Ismail and M. M. Goncalves. Thermal performance of a pcm storage unit. *Energy Conversion and Management*, 40 :115–138, 1999.
- [182] K. Nithyanandam and R. Pitchumani. Computational studies on a latent thermal energy storage system with integral heat pipes for concentrating solar power. *Applied Energy*, 103 :400 – 415, 2013.
- [183] Vincent Morisson, Mohamed Rady, Elena Palomo, and Eric Arquís. Thermal energy storage systems for electricity production using solar energy direct steam generation technology. *Chemical Engineering and Processing : Process Intensification*, 47(3) :499 – 507, 2008. 10th French Congress on Chemical Engineering.
- [184] Wei-Wei Wang, Kun Zhang, Liang-Bi Wang, and Ya-Ling He. Numerical study of the heat charging and discharging characteristics of a shell-and-tube phase change heat storage unit. *Applied Thermal Engineering*, 58 :542 – 553, 2013.
- [185] X. Xiao and P. Zhang. Numerical and experimental study of heat transfer characteristics of a shell-tube latent heat storage system : Part I – Charging process. *Energy*, 79(0) :337 – 350, 2015.
- [186] Antonio Ramos Archibold, Muhammad M. Rahman, D. Yogi Goswami, and Elias K. Stefanakos. Analysis of heat transfer and fluid flow during melting inside a spherical container for thermal energy storage. *Applied Thermal Engineering*, 64(1–2) :396 – 407, 2014.

- [187] Ali F. Elmozughi, Laura Solomon, Alparslan Oztekin, and Sudhakar Neti. Encapsulated phase change material for high temperature thermal energy storage – Heat transfer analysis. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 78(0) :1135 – 1144, 2014.
- [188] J. Crank. *Free and Moving Boundary Value Problems*. Oxford Science Publications, 1984.
- [189] A. Lomonaco. *Stockage d'énergie thermique par matériaux à changement de phase adaptés aux centrales solaires thermodynamique*. PhD thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2015.
- [190] K. Morgan. A numerical analysis of freezing and melting with convection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 28(3) :275 – 284, 1981.
- [191] M Yang and WQ Tao. Numerical study of natural convection heat transfer in a cylindrical envelope with internal concentric slotted hollow cylinder. *Numer Heat Transfer Part A*, 22 :289–305, 1992.
- [192] D. K. Gartling. Finite element analysis of convective heat transfer problems with change of phase. In R. W. Lewis and K. Morgan, editors, *Numerical methods in thermal problems*, volume 4, pages 595–609. Pineridge Press, Swansea, 1980.
- [193] R. Mehrabian, M. Keane, and M.C. Flemings. Interdendritic fluid flow and macrosegregation; influence of gravity. *Metallurgical and Materials Transactions*, 1(5) :1209–1220, 1970.
- [194] W.D. Bennon and F.P. Incropera. A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems - I. Model formulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(10) :2161 – 2170, 1987.
- [195] Z. Ma and Y. Zang. Solid velocity correction schemes for a temperature transforming model for convection phase change. *Int. J. Numer. Meth. Heat*, 16 :204–225, 2006.
- [196] M. Okada. Analysis of heat transfer during melting from a vertical wall. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 27(11) :2057 – 2066, 1984.
- [197] D.R. Poirier. Permeability for flow of interdendritic liquid in columnar-dendritic alloys. *Metallurgical Transactions B*, 18(1) :245–255, 1987.
- [198] Biswajit Basu and AW Date. Numerical modelling of melting and solidification problems—A review. *Sadhana*, 13(3) :169–213, 1988.
- [199] M. C. Schneider, J. P. Gu, C. Beckermann, W. J. Boettinger, and U. R. Kattner. Modeling of micro- and macrosegregation and freckle formation in single-crystal nickel-base superalloy directional solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 28 :1517–1531, 1997.
- [200] Jean Pierre Dumas, Stéphane Gibout, Pierre Cézac, Erwin Franquet, and Didier Haillot. Model for the DSC thermograms of the melting of ideal binary solutions. *Thermochimica Acta*, 571 :64–76, November 2013.
- [201] E. Franquet and V. Perrier. Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for the approximation of Baer & Nunziato type multiphase model. *Journal of Computational Physics*, 231 :4096–4141, 2012.

- [202] Suhas V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. McGraw-Hill, New York, 1980.
- [203] Olivier Bertrand, Bruno Binet, Hervé Combeau, Stéphane Couturier, Yves Delannoy, Dominique Gobin, Marcel Lacroix, Patrick Le Quéré, Marc Médale, Jure Mencinger, Hamou Sadat, and Gisele Vieira. Melting driven by natural convection a comparison exercise : first results. *International Journal of Thermal Sciences*, 38(1) :5 – 26, 1999.
- [204] Dominique Gobin and Patrick Le Quéré. Melting from an isothermal vertical wall. synthesis of a numerical comparison exercise. *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, 7 :289–306, 2000.
- [205] C. Bénard, D. Gobin, and F. Martinez. Melting in rectangular enclosures : experiments and numerical simulations. *J. Heat Transfer*, 107(4) :794–803, 1985.
- [206] C.-J. Ho and R. Viskanta. Heat transfer during melting from an isothermal vertical wall. *ASME Transactions J. Heat Transfer*, 106 :12–19, 1984.
- [207] T.A. Campbell and J.N. Koster. Visualization of liquid-solid interface morphologies in gallium subject to natural convection. *Journal of Crystal Growth*, 140(3–4) :414 – 425, 1994.
- [208] F. Wolff and R. Viskanta. Melting of a pure metal from a vertical wall. *Experimental Heat Transfer*, 1(1) :17–30, 1987.
- [209] S. Weitemeyer, D. Kleinhans, T. Vogt, and C. Agert. Integration of Renewable Energy Sources in Future Power Systems : The Role of Storage. *ArXiv e-prints*, May 2014.
- [210] Francis Agyenim, Neil Hewitt, Philip Eames, and Mervyn Smyth. A review of materials, heat transfer and phase change problem formulation for latent heat thermal energy storage systems (LHTESS). *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 14(2) :615 – 628, 2010.
- [211] Prashant Verma, Varun, and S.K. Singal. Review of mathematical modeling on latent heat thermal energy storage systems using phase-change material. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 12(4) :999 – 1031, 2008.
- [212] K.A. Jackson and J.D. Hunt. Lamellar and rod eutectic growth. *Trans. Metall. Soc.*, pages 1129–1142, 1966.
- [213] W.D. Bennon and F.P. Incropera. A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems - II. Application to solidification in a rectangular cavity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(10) :2171 – 2187, 1987.
- [214] P. Kumar, S. Chakraborty, K. Srinivasan, and P. Dutta. Rayleigh-benard convection during solidification of an eutectic solution cooled from the top. *Metall. Mater. Trans.*, 33B :605–612, 2002.
- [215] Nouredine Hannoun, Vasilios Alexiades, and Tsun Zee Mai. Resolving the controversy over tin and gallium melting in a rectangular cavity heated from the side. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 44(3) :253–276, 2003.
- [216] K. A. R. Ismail, O. C. Quispe, and J. R. Henríquez. A numerical and experimental study on a parallel plate ice bank. *Applied Thermal Engineering*, 19 :163–193, 1999.

- [217] S.H. Cho and J.E. Sunderland. Phase change problems with temperature-dependant thermal conductivity. *Journal of heat trnasfer*, pages 214–217, 1974.
- [218] M. Pruh'homme, T.H. Nguyen, and D.L. Nguyen. A heat transfer analysis for solidification of slabs, cylinder and spheres. *Journal of heat transfer*, pages 699–705, 1989.
- [219] Kamal A. R. Ismail, Fátima A. M. Lino, Raquel C. R. da Silva, Antonio D. de Jesus, and Louryval C. Paixão. Experimentally validated two dimensional numerical model for the solidification of PCM along a horizontal long tube. *International Journal of Thermal Sciences*, 75 :184 – 193, 2014.
- [220] Muhyiddine Jradi, Mark Gillott, and Saffa Riffat. Simulation of the transient behaviour of encapsulated organic and inorganic phase change materials for low-temperature energy storage. *Applied Thermal Engineering*, 59 :211–22, 2013.
- [221] Abdulmajed Khalifa, Lippong Tan, Abhijit Date, and Aliakbar Akbarzadeh. A numerical and experimental study of solidification around axially finned heat pipes for high temperature latent heat thermal energy storage units. *Applied Thermal Engineering*, 70(1) :609 – 619, 2014.
- [222] C. Beckermann and R. Viskanta. Effect of solid subcooling on natural convection melting of a pure metal. *Journal of Heat and Mass Transfer*, 111 :416–424, 1989.
- [223] Zhenyu Liu, Yuanpeng Yao, and Huiying Wu. Numerical modeling for solid–liquid phase change phenomena in porous media : Shell-and-tube type latent heat thermal energy storage. *Applied Energy*, 112 :1222 – 1232, 2013.
- [224] Y. Tian and C.Y. Zhao. A numerical investigation of heat transfer in phase change materials (pcms) embedded in porous metals. *Energy*, 36 :5539–5546, 2011.
- [225] V.R. Voller, A.D. Brent, and C. Prakash. The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9) :1719 – 1731, 1989.
- [226] W.D. Bennon and F.P. Incropera. Numerical analysis of binary solid-liquid phase change using a continuum model. *Numerical Heat Transfer*, 13 :277–296, 1988.
- [227] N. Ramachdran, J.P. Gupta, and Y. Jaluria. Thermal and fluid flow effects during solidification in a rectangular enclosure. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 25 :187–194, 1982.
- [228] Nitin Pathak, Arvind Kumar, Anil Yadav, and Pradip Dutta. Effects of mould filling on evolution of the solid-liquid interface during solidification. *Applied Thermal Engineering*, 29(17-18) :3669 – 3678, 2009.
- [229] M. A. Rady and A. K. Mohanty. Natural convection during melting and solidification of pure metals in a cavity. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 29(1) :49–63, 1996.
- [230] R. Viskanta, D. M. Kim, and C. Gau. Three-dimensional natural convection heat transfer of a liquid metal in a cavity. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 29 :475–485, 1986.
- [231] C. Gau and R. Viskanta. Melting and solidification of a metal system in a rectangular cavity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 27(1) :113 – 123, 1984.

- [232] H. Shmueli, G. Ziskind, and R. Letan. Melting in a vertical cylindrical tube : Numerical investigation and comparison with experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(19–20) :4082 – 4091, 2010.
- [233] L. Katsman. Investigation of phase change in cylindrical geometry with internal fins. Master’s thesis, Heat transfer laboratory, Department of mechanical engineering, 2007.
- [234] A.W. Date. Novel strongly implicit enthalpy formulation for multidimensional stefan problems. *Numerical Heat Transfer*, 21 :231–251, 1992.