



HAL
open science

Modélisation du changement de phase en mécanique des milieux discrets

Jean-Paul Caltagirone

► **To cite this version:**

Jean-Paul Caltagirone. Modélisation du changement de phase en mécanique des milieux discrets. 2016. hal-01320994

HAL Id: hal-01320994

<https://hal.science/hal-01320994>

Preprint submitted on 24 May 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Modélisation du changement de phase en mécanique des milieux discrets

Jean-Paul Caltagirone

Université de Bordeaux
Institut de Mécanique et d'Ingénierie
Département TREFLE, UMR CNRS n° 5295
16 Avenue Pey-Berland, 33607 Pessac Cedex
calta@ipb.fr

Résumé

La modélisation du changement d'état solide-liquide ou liquide-vapeur est abordée à partir des concepts de mécanique des milieux discrets. Un certain nombre de notions de la mécanique des milieux continus sont abandonnées au profit d'une approche basée sur des relations de saut implicites et de méthodes issues de la géométrie différentielle. Le problème de la discontinuité de contact associé à un changement d'état est abordé par la résolution d'une équation de conservation du flux de chaleur hyperbolique complétée par la conservation de l'énergie pour remonter la température. C'est l'équation vectorielle sur le flux de chaleur qui intègre la chaleur latente de fusion/condensation.

Le problème de Stefan à masse volumique constante est d'abord résolu et le résultat comparé à la solution analytique en une dimension d'espace. Afin de représenter le phénomène de condensation où les masses volumiques de la vapeur et du liquide sont différentes, l'équation du mouvement discrète est résolue en incluant une autre discontinuité. Les conservations des quantités vectorielles, flux de chaleur et quantité de mouvement sont assurées exactement de même que celles de l'énergie et de la masse.

Mots clés

Mécanique des milieux discrets, mécanique des milieux continus, décomposition de Hodge-Helmholtz, problème de Stefan, changement d'état, fusion, condensation.

Modeling of Phase Change in Discrete Mechanics

Abstract

The modeling of the change of state solid-liquid or liquid-vapor is approached starting from the concepts of the discrete mechanics. Several idea of the continuum mechanics are discarded with the advantage of an approach based on implicit relations of jump and methods coming from the differential geometry. The problem of the discontinuity of contact associated with a change of state is tackled by the solution of a hyperbolic heat flux conservation equation of the completed by the energy conservation law for upgrade the temperature. It is the vectorial equation on the heat flux which integrates the latent heat of fusion/condensation.

The problem of Stefan with constant density is initially solved and the result compared to the analytical solution in a one dimension of space. In order to represent the phenomenon of condensation where the densities of the vapor and the liquid are different, the discrete equation of the movement is solved by including another discontinuity. The conservations of the vector quantities, heat flux and momentum are exactly assured just as those energy and the mass.

Keywords

Discrete Mechanics, Continuum Mechanics, Hodge-Helmholtz decomposition, Stefan problem, phase change, melting, condensation.

1 Introduction

La mécanique des milieux discrets initiée en 2013 a été formalisée depuis dans un ouvrage [3]. Elle correspond à une vision différente de celle établie sur la base du concept de milieu continu et qui est aujourd'hui ce que l'on désigne par la mécanique des milieux continus. Même si ces deux approches sont différentes et les équations très différentes elles donnent les mêmes solutions pour des problèmes simples uniquement si les propriétés physiques sont constantes.

Le cas des écoulements multiphasiques traités ici induisent des variations discontinues des propriétés physiques qui mettent en défaut le formalisme de milieu continu. La différentiation et l'intégration comme les autres résultats de l'analyse ont été de considérables outils dans la description des lois de la Nature. Même si le calcul infinitésimal a été développé dès le moyen âge ce sont les savants d'Oxford et de Cambridge au XVII siècle et en particulier Isaac Newton qui développa l'analyse et Gottfried Leibniz qui le formalisa et qui introduisit les notations encore utilisées aujourd'hui. En mécanique, le paradigme dominant depuis plus de deux siècles est le milieu continu.

D'une part le problème de la dérivation d'une quantité discontinue pose un réel problème qui n'a pas été résolu en écrivant des équations aux discontinuités ou en considérant des sauts de propriétés aux interfaces. Mais le problème le plus important est relatif à la confusion entre propriétés physiques et variables, notamment la masse volumique peut être les deux mais pas dans la même équation. L'adoption d'une loi d'état comme une équation susceptible d'obtenir le même nombre d'équations que d'inconnues a introduit une incohérence supplémentaire. Ces difficultés et bien d'autres sont liées à la notion de milieu continu où toutes les quantités sont réduites en un point matériel. Pour retrouver la notion de direction celle de référentiel a d'emblée pris une importance abusive. Les conséquences du choix de milieu continu sont nombreuses et ont favorisé l'adoption des outils de l'analyse ou de la géométrie différentielle qui apparaissent aujourd'hui comme surabondants pour une description cohérente de la mécanique. C'est ainsi que le concept de tenseur n'est absolument pas utile à cette description et conduit à des conditions de compatibilité supplémentaires à respecter. Les problèmes évoqués ici comme d'autres relatés dans [3] conduisent à l'abandon de cette hypothèse de milieu continu au profit d'une description essentiellement basée sur des concepts simples de géométrie différentielle.

L'objet de la mécanique des milieux discrets est la dérivation d'équations représentatives de la physique à partir de principes parfaitement établis comme le principe fondamental de la dynamique présenté par Isaac Newton dans ses *Principia*. A cette époque Newton avait une vision discrète de la force représentée par un bipoint et une orientation. En restant dans le champ d'une mécanique classique une équation du mouvement doit pouvoir représenter fidèlement un certain nombre de phénomènes ou d'effets comme la viscosité, l'inertie, la dissipation, la propagation des ondes, la gravité, les effets capillaires, la rotation, etc. Il a été exceptionnel que des résultats scientifiques d'importance aient pu être établis à partir de considérations physiques et d'intuitions. La voie la plus simple reste l'utilisation de principes parfois associés à des postulats pour établir une équation dont il est illusoire vouloir en comprendre le sens sans sa résolution. Les interactions entre les phénomènes physiques décrits par les différents termes qui composent cette équation sont effectivement complexes à appréhender sans le recours à des applications concrètes et incontournables. Ainsi bâtir une équation est le moyen de comprendre la réalité.

L'équation reprise ici a déjà permis de retrouver tous les résultats issus de l'équation de Navier-Stokes lorsque celle-ci est utilisée dans le cadre d'écoulements à propriétés constantes. Mais le champ couvert par l'équation du mouvement de la mécanique discrète est beaucoup plus large. La mécanique des fluides et des solides sont maintenant qu'une seule et même mécanique, seules les propriétés physiques changent; ainsi une formulation en vitesse permet de

calculer les vitesses et déplacements mais aussi les contraintes de pression et de cisaillement de manière simultanée [4], [2]. Cette formulation sans tenseur n'est assortie d'aucune condition de compatibilité pour passer des contraintes aux déplacements.

L'équation du mouvement se présente comme un extracteur naturel de Hodge-Helmholtz d'un vecteur en composantes solénoïdale et irrotationnelle. Elle a permis d'apporter une cohérence aux méthodes de projection vectorielle et scalaire [1], [5] sur le relèvement de la pression à partir d'un champ de vitesse solénoïdal obtenu à l'issue d'un processus purement cinématique.

Cette cohérence se retrouve aussi dans la prise en compte de termes sources intégrés à l'équation du mouvement discrète notamment pour les écoulements induits par les effets capillaires à travers un terme capillaire en adéquation avec la notion d'accélération sur un segment.

L'objectif de cette note est de montrer qu'une approche vectorielle du transfert de chaleur permet de supprimer certains *artefacts* dus à l'utilisation de la seule équation de l'énergie et de représenter correctement le transfert avec changement de phase. La dérivation d'une équation vectorielle sur le flux en mécanique des milieux discrets [3] permet en effet de résoudre cette variable vectorielle et de remonter simplement la température (énergie interne, enthalpie, entropie) considérée comme un accumulateur. La conservation du flux de chaleur peut intégrer naturellement, au bon niveau, des termes sources tels que ceux dus aux changements de phase. Cette équation hyperbolique supprime le paradoxe induit par l'équation de la chaleur au temps initial où le flux est infini lorsqu'une température est appliquée sur un milieu à température différente.

Le modèle présenté représente les écoulements (incompressibles, compressibles), les ondes (acoustiques ou ondes de choc), le comportement des solides élastiques ou à rhéologies complexes, ... sans modification du système d'équations ; seules les propriétés sont évaluées par ailleurs, par exemple avec une base de données.

Le premier cas test utilisé dans cette note correspond au problème de Stefan où un solide, initialement à la température de fusion, de la glace d'eau par exemple, est fondu sous l'impact d'un flux de chaleur dans un milieu semi-infini. Les premières expériences menées par Lamé et Clapeyron [7] ont été suivies par la formalisation de ce problème par Stefan en 1891 [8]. La solution de ce problème a été obtenue pour la première fois par F.E. Neumann (voir [9]). On se reportera à la thèse de T. Jonsson pour un historique plus complet [6].

Le problème possède une solution autosimilaire qui réduit le système d'équations aux dérivées partielles en une équation sur la seule variable de similitude dépendant elle-même de l'abscisse et du temps. Les équations du modèle discret [3] sont présentées brièvement et appliquées au problème de Stefan. La comparaison entre solution numérique et solution théorique est ensuite réalisée.

Le changement d'état associé à un changement de masse volumique dans l'un ou les deux états doit être appréhendé en résolvant, en plus d'une équation sur le flux de chaleur, une équation du mouvement pour calculer la vitesse des deux milieux.

2 Concept de milieu discret

2.1 Topologies

La mécanique discrète est basée sur la topologie élémentaire représentée sur la figure (1). Celle-ci est composée de segments Γ en nombre quelconque mais définissant un plan Σ ; si ce n'était pas le cas cette surface serait décomposée en triangles. Les vecteurs unitaires du segment orienté est \mathbf{t} et celui de la normale au plan orienté désigné par \mathbf{n} , ils sont orthogonaux par définition $\mathbf{t} \cdot \mathbf{n} = 0$. Le segment est aussi défini par ses extrémités (a, b) . Une discontinuité peut être attribuée au point c sur un ou plusieurs segments de cet assemblage élémentaire. On comprend que certaines opérations s'effectueraient dans l'espace même si l'on considère qu'un problème plan, comme le rotationnel de la vitesse par exemple. Cette topologie permet de construire tout type de topologies 2D de polygones ou 3D de polyèdres à nombre de côtés ou de faces quelconques.

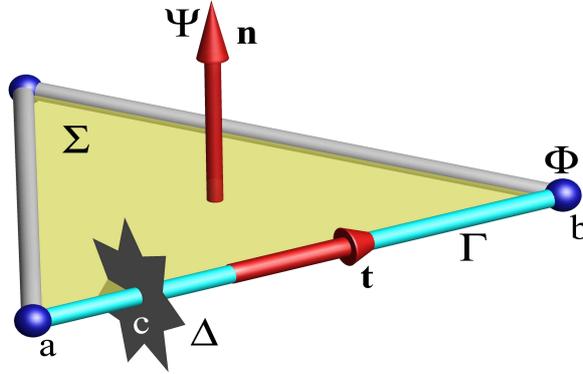


FIGURE 1. Topologie élémentaire de la mécanique des milieux discrets : trois segments rectilignes Γ délimités par des points définissent une face plane Σ . Les vecteurs unitaires de la normale à la face \mathbf{n} et du vecteur porté par Γ sont orthogonaux, $\mathbf{t} \cdot \mathbf{n} = 0$. Les localisations associées aux points (a, b) sont $(p, \rho, \chi_\Gamma, \nabla \cdot \mathbf{V})$, respectivement la pression, la masse volumique, la compressibilité et la divergence de la vitesse. Celles associées aux segments sont la composante de vitesse, le gradient de pression et le rotationnel dual du rotationnel Ω ($\mathbf{V}, \nabla p, \nabla_d \times \Omega$). Celles relatives aux faces sont $(\omega, \mu, \Omega = \nabla_p \times \mathbf{V})$ le potentiel vecteur, la viscosité et le rotationnel primal de la vitesse. Le segment Γ peut être intercepté par une discontinuité Δ située en c sur celui-ci.

La longueur du segment $d = [a, b]$ peut être aussi petite que nécessaire et tendre vers zéro mais en aucun cas cette topologie n'est réductible à un point contrairement à la notion de milieu continu. Cette réduction est homothétique et conserve les angles ; ainsi les notions de rotationnel et de circulation sur le contour conservent tout leur sens. Par contre la réduction ne conserve pas la courbure de l'espace ce qui est un élément essentiel de la mécanique des milieux discrets.

Le vocabulaire de discret introduit ici n'a pas de lien avec la structure de la matière composée de molécules, atomes, ... ; l'équation du mouvement restera valable tant que le libre parcours moyen des molécules est petit devant la longueur d du segment Γ . La mécanique discrète se différencie par contre de la mécanique des milieux continus en un sens où la topologie élémentaire n'est jamais réductible à un point. Les principes même de la mécanique des milieux continus ne sont plus applicables comme la différentiation par exemple. La notion de référentiel galiléen est remplacée par un référentiel local. Toutes ces notions sont développées dans l'ouvrage sur ce concept [3].

Comme l'objet de cet article est l'application de ces notions aux écoulements dominés par la capillarité celles-ci seront étendues aux discontinuités Δ introduites par le changement de milieu en c sur le segment. Cette singularité peut être une discontinuité de contact ou une onde de choc. Dans le cas des écoulements diphasiques à interfaces séparées c'est une discontinuité de contact, seules les propriétés, la masse volumique ρ , la viscosité μ et le coefficient de compressibilité isotherme χ_T sont discontinues au point c . Pour ce type d'écoulements la vitesse est continue au voisinage et sur l'interface. La composante de la vitesse sur le segment Γ est ainsi supposée constante sur toute la longueur du segment, seules les propriétés subissent une discontinuité. Pour une onde de choc il en est autrement, les propriétés du fluide mais aussi la composante de la vitesse sont discontinues de part et d'autre du choc.

Dans les deux cas il ne peut y avoir de conservation de la quantité de mouvement $\rho \mathbf{V}$ sur Γ , ce n'est pas un principe fondamental de la mécanique. Lorsque ce pseudo-principe est évoqué c'est pour associer la loi de la dynamique à une conservation de la quantité de mouvement alors qu'elle exprime la conservation de l'accélération ; si on multiplie toute l'équation par la masse volumique on peut appeler celle-ci conservation de la quantité de mouvement. Il est à remarquer que la masse volumique dont il s'agit est liée à la masse inertie et à la masse grave qui sont égales (Principe d'Equivalence) et dont elle est issue.

2.2 Théorèmes généraux

Alors que la mécanique a été établie principalement en s'appuyant sur le théorème de la divergence pour l'affectation d'un flux sur une surface au volume puis à un point, la mécanique des milieux discrets dérive l'équation du mouvement à partir du théorème fondamental de l'analyse et de ses conséquences, le théorème de Stokes en particulier.

Ces théorèmes fondamentaux sont rappelés brièvement.

Si $\mathbf{F}(x)$ est uniformément et continument différentiable sur $[a, b]$ le théorème fondamental de l'analyse ou théorème fondamental du calcul différentiel et intégral s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{F}'(x) = \mathbf{f}(x) \\ \int_a^b f(t) dt = F(b) - F(a) \end{array} \right. \quad (1)$$

Le théorème de Stokes qui découle de théorème précédent permet de calculer le rotationnel lié à une surface comme la circulation sur son contour :

$$\int_{\Gamma} \mathbf{V} \cdot \mathbf{t} dl = \iint_{\Sigma} \nabla \times \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} ds \quad (2)$$

Ce théorème est d'une portée considérable, il permet de calculer le rotationnel sur une surface sans connaître explicitement la vitesse elle-même, il suffit de connaître ses composantes sur un contour fermé. La notion de référentiel pour définir un vecteur vitesse en un point devient moins indispensable. Par ailleurs comme le rotationnel n'est pas défini en un point ou sur une ligne, cet opérateur n'est défini que comme un passage à la limite en continu.

Le théorème de la divergence ou de Green-Ostrogradski qui découle du théorème de Stokes permettra de calculer le relèvement des quantités définies au point :

$$\iint_{\Sigma} \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} ds = \iiint_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{V} dv \quad (3)$$

La dérivation de l'équation discrète du mouvement étant réalisée sur un segment Γ il est indispensable de savoir comment interpréter le produit de deux fonctions sur celui-ci. Une version

du théorème des accroissements finis est le théorème de la valeur moyenne généralisé (conséquence du théorème de Rolle) pour les intégrales : $\exists c \in [a, b]$ tel que :

$$\int_a^b f(x) g(x) dx = f(c) \int_a^b g(x) dx$$

Ce théorème valable qu'en dimension un est particulièrement adapté à l'approche développée. Pour les écoulements diphasiques la valeur de la masse volumique sur le segment pourra ainsi être encadrée à partir de ses valeurs aux extrémités a et b .

Deux propriétés importantes en continu, $\nabla \times \nabla p = 0$ et $\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{V} = 0$ s'avèrent indispensables en milieu discret. Si l'on désigne par l'indice h les quantités discrètes il est aisé de montrer, sur la topologie primale, que le rotationnel discret d'un gradient discret est nul :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_a^b \nabla p \cdot \mathbf{t} dl = p_b - p_a \\ \int_{\Gamma} \nabla p \cdot \mathbf{t} dl = 0 \\ \iint_{\mathcal{S}} \nabla \times (\nabla p) \cdot \mathbf{n} ds = 0 \\ \nabla_h \times (\nabla_h p) = 0 \end{array} \right. \quad (4)$$

De même la divergence discrète du rotationnel primal discret calculée sur le volume dual est bien nulle :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n \Gamma_i = \sum_{i=1}^n \iint_{\mathcal{S}} \nabla \times \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} ds = 0 \\ \iint_{\mathcal{S}} (\nabla \times \mathbf{V}) \cdot \mathbf{n} ds = 0 \\ \iiint_{\mathcal{V}} \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{V}) ds = 0 \\ \nabla_h \cdot (\nabla_h \times \mathbf{V}) = 0 \end{array} \right. \quad (5)$$

Ces propriétés confèrent à l'équation du mouvement discrète la capacité à représenter l'accélération comme la somme d'un gradient et d'un rotationnel c'est à dire d'écrire formellement une décomposition de Hodge-Helmholtz.

2.3 Equations de la mécanique des milieux discrets

Le modèle décrit succinctement ci-dessous est issu de la mécanique des milieux discrets [3]. Celle-ci abandonne l'hypothèse de milieux continus et introduit la notion de vecteur comme un bipoint orienté. La loi fondamentale de la mécanique de Newton devient de fait une relation entre l'accélération γ et la somme des forces par unité de masse. Elle s'écrit formellement comme une décomposition de Hodge-Helmholtz. Par ailleurs une équation vectorielle sur le flux de chaleur est élaborée, le flux se conserve pour l'énergie comme l'accélération pour le mouvement.

Le système issu de la mécanique discrète utilisé se présente sous la forme de deux équations vectorielles à résoudre et de potentiels à mettre à jour à partir de $\nabla \cdot \mathbf{V}$ et $\nabla \times \mathbf{V}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\nabla \left(\frac{p^o}{\rho_v} - \frac{dt}{\rho_v \chi T} \nabla \cdot \mathbf{V} \right) + \nabla \times \left(\frac{\boldsymbol{\omega}^o}{\rho_v} - \frac{\mu}{\rho_v} \nabla \times \mathbf{V} \right) + \sigma \kappa \nabla \xi + D \nabla \xi + \mathbf{g} \\ \varepsilon \frac{d\Phi}{dt} = -k \nabla \left(T^o - \frac{dt k}{\rho c_v} \nabla \cdot \Phi \right) - \Phi + \rho L v \xi \\ p = p^o - \frac{dt}{\chi T} \nabla \cdot \mathbf{V} - \frac{dt \beta}{\rho c_v \chi T} \nabla \cdot \Phi + \frac{dt \beta}{\rho c_v \chi T} (q + \phi_d) \\ \rho = \rho^o - \rho^o dt \nabla \cdot \mathbf{V} \\ T = T^o - \frac{dt \beta T}{\rho c_v \chi T} \nabla \cdot \mathbf{V} - \frac{dt k}{\rho c_v} \nabla \cdot \Phi + \frac{dt}{\rho c_v} (q + \phi_d) \\ \boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}^o - \mu \nabla \times \mathbf{V} \end{array} \right. \quad (6)$$

où $v = ds/dt$ la célérité de l'interface solide-liquide et $\boldsymbol{\xi} = d \nabla \xi$ où ξ est la fonction de phase ($\xi = 1$ dans le liquide et $\xi = 0$ dans le solide) ; d est la longueur du bipoint Γ . σ est la tension de surface (massique) et κ la courbure de l'interface solide-liquide. β est le coefficient d'expansion thermique local du milieu. La quantité L est la chaleur latente de changement de phase. La quantité D est un débit surfacique injecté (ou soustrait) localement au sein du domaine ; ce terme permet notamment de rendre compte des phénomènes de changement de masse volumique lors du changement de phase (fusion, évaporation, ...). D'autres quantités correspondant à des discontinuités de contact ou de choc peuvent être introduits soit dans les équations vectorielles, soit dans les remontées des quantités scalaires.

La dissipation visqueuse est représentée par ϕ_d et la production de chaleur par q . La masse volumique ρ_v est quant à elle constante sur le segment Γ en vertu du Principe d'Equivalence. Certains termes secondaires sont omis pour des questions de simplification de la présentation mais peuvent être retrouvés dans [3].

Le paramètre ε dans l'équation de conservation du flux représente la constante de temps relative à la relaxation des phénomènes photoniques au sein du milieu. Elle est d'ordre de grandeur de $\varepsilon \approx 10^{-12}$ dans la majorité des cas. Ce terme représente néanmoins la déviation à la loi de Fourier aux petites constantes de temps.

Les potentiels scalaires et vectoriel à l'équilibre mécanique sont la pression p^o , la contrainte de cisaillement-rotation $\boldsymbol{\omega}^o$, la masse volumique ρ^o et la température T^o . Ces potentiels sont seulement remis à jour explicitement comme des lagrangiens.

A l'issue de la résolution de ce système toutes les quantités ($p, \rho, T, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{V}$) sont advectées à la vitesse du fluide.

Le système (6) est générique, il régit un bon nombre de phénomènes, les écoulements compressibles ou non, la propagation des ondes acoustiques ou non linéaires, le comportement des solides viscoélastiques ou à rhéologie plus complexe, le transfert de chaleur sans ou avec changement de phase, quel qu'il soit, fusion/solidification, évaporation/condensation, etc.

3 Problème de Stefan

3.1 Problème de Stefan pour la fusion

Le problème de Stefan est formellement identique pour la fusion d'un solide et la solidification d'un liquide. On considère un milieu semi-infini $x \in [0, \infty[$ initialement à la température de fusion $T(x, 0) = 0$. Une température différente $T_0 = 1$ est appliquée en $x = 0$; au cours du phénomène le front de fusion progresse et nous appellerons $s(t)$ la position de celui-ci.

Un certain nombre d'hypothèses attachées à ce problème sont adoptées, notamment les propriétés du liquide, masse volumique, viscosité, conductivité thermique, chaleur massique, chaleur latente de fusion, ... seront considérées comme des constantes. De plus le changement de phase n'entraîne pas de changement de volume par dilatation ou rétraction et la vitesse des deux milieux sera strictement nulle. La modification spatiale du front de fusion correspond de fait à une propagation et la dérivée de l'abscisse $s(t)$ est une célérité et non une vitesse.

On introduit la notation $a = k/\rho c_p$ pour caractériser le coefficient de diffusion de la chaleur dans le liquide, les propriétés de la phase solide ne sont pas requises. Le problème de Stefan est ainsi décrit par un système aux dérivées partielles où l'une des inconnues est la température $T(x, t)$ et la seconde inconnue l'abscisse du front de fusion :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \\ T(0, t) = T_0 = 1 \\ \rho L \frac{ds}{dt} = -k \frac{\partial T}{\partial x} \\ T(s(t), t) = 0 \\ T(x, 0) = 0 \end{array} \right. \quad (7)$$

où L est la chaleur latente de fusion.

La résolution de ce problème est réalisée à l'aide d'une variable d'auto-similarité $\xi = x/\sqrt{t}$. La solution devient la fonction de la variable ξ sous la forme $T(x, t) = F(\xi(x, t))$. La substitution de T dans l'équation de l'énergie (7) permet d'obtenir une équation non linéaire de la seule variable ξ :

$$\frac{d^2 F}{d\xi^2} + \frac{\xi}{2a} \frac{dF}{d\xi} = 0 \quad (8)$$

dont la solution générale s'écrit :

$$T(x, t) = A \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{at}} \right) + B \quad (9)$$

Les conditions aux limites fixées par le système (7) permettent de déterminer les constantes

d'intégration pour donner la solution :

$$\begin{cases} T(x, t) = T_0 - \frac{T_0}{\operatorname{erf}(\lambda)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \\ s(t) = 2\lambda\sqrt{at} \\ \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{St}{\sqrt{\pi}} \end{cases} \quad (10)$$

La dernière relation est une équation transcendante sur λ qui dépend de St , le nombre de Stefan :

$$St = \frac{k}{\rho L a} T_0 = \frac{c_p T_0}{L} = \frac{D}{a} \quad (11)$$

Ce paramètre de similitude traduit le rapport entre chaleur sensible et chaleur latente due au changement de phase ; c'est aussi le rapport des enthalpies correspondantes. Le paramètre D représente l'équivalent du coefficient de diffusion a pour le changement de phase.

Afin de montrer la solution théorique les paramètres fixés sont donnés en unités S.I. : $k = 1$ la conductivité thermique, $\rho = 1$ la masse volumique du liquide, $L = 2$ la chaleur latente de fusion, $a = k/\rho c_p = 1$ la diffusivité thermique, $c_p = 1$ la chaleur massique. Le nombre de Stefan sera ainsi égal à $St = D/a = 0.5$. On introduira aussi un paramètre équivalent $\beta = L\rho/k = 2$.

La résolution de l'équation transcendante du système (10) est réalisée avec un algorithme de type Newton-Raphson et la racine correspondant aux paramètres donnés ici est égale à $\lambda = 0.46478591807$.

La figure (2) montre la distribution de la température suivant x pour quatre temps différents. On remarque la quasi-linéarité du champ de température suivant x ce qui indique que l'évolution du transfert thermique est en bonne partie limitée par la résistance thermique du liquide qui, en augmentant, réduit la vitesse de propagation du front de fusion.

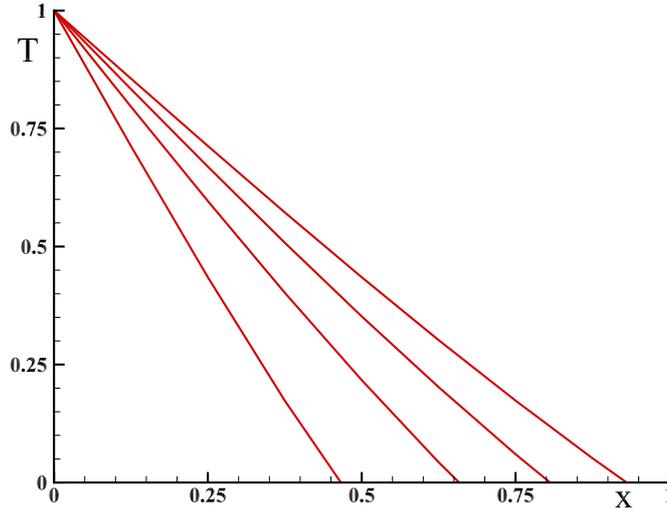


FIGURE 2. *Problème de Stefan, solution analytique, température pour les temps $t = [0.25, 0.5, 0.75, 1]$ pour $\beta = 2$*

La vitesse de l'interface tirée du système (10) est égale à :

$$v(t) = \frac{ds(t)}{dt} = \frac{\lambda\sqrt{a}}{\sqrt{t}} \quad (12)$$

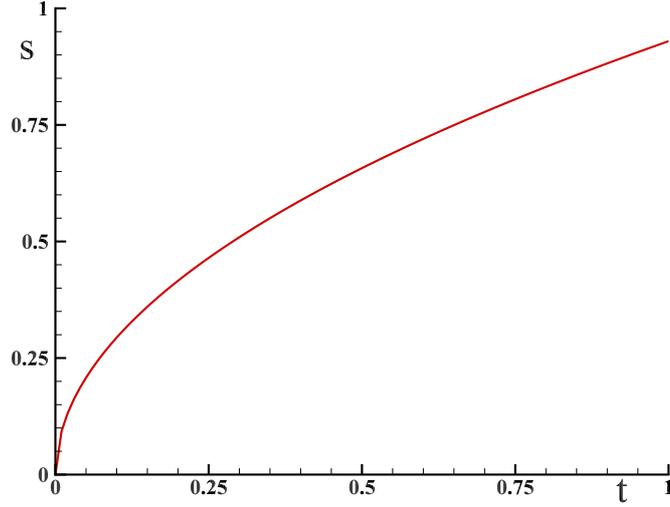


FIGURE 3. *Problème de Stefan, solution analytique de la position de l'interface au cours du temps pour $\beta = 2$*

L'évolution du front de fusion est donnée par la figure (3) Une des difficultés de cette solution est la valeur infinie du flux de chaleur en $x = 0$ à l'instant initial. Ce défaut intrinsèque du modèle basé sur la seule équation de la chaleur est aussi une difficulté numérique.

3.2 Solution simplifiée

La solution exacte du problème de Stefan montre que le profil de température $T(x, t)$ suivant l'abscisse est quasiment linéaire quel que soit le temps où il est observé. Cela suggère une approximation qui consiste à imposer un profil de température linéaire dans le liquide entre la température de la paroi et la température de fusion, toutes deux constantes. La seule inconnue reste alors la célérité de propagation de l'interface. Le fluide sera supposé initialement à la température de fusion T_f . Le front de fusion qui est une fonction du temps sera nommé $\mathbf{v}(t)$.

Si l'on exclut tout mouvement du solide ou du liquide $\mathbf{V} = 0$ l'équation de l'énergie s'écrit :

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla (k \nabla T) \quad (13)$$

Les conditions aux limites sont $\forall t, T(0, t) = T_0$ et $T(\mathbf{v}(t), t) = T_f$ où T_f est la température de fusion-solidification.

Comme la vitesse de propagation du front n'est pas connue *a priori* il est impossible de calculer $T(x, t)$ directement. Mais on sait que le flux dans le fluide est nul, le milieu ne peut se réchauffer qu'en devenant liquide.

Entre les temps t et $t + dt$ la masse de solide a augmenté de :

$$dm = \rho S v(t) dt \quad (14)$$

où $v(t) = \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{t}$. Comme la variation d'enthalpie correspondant à la solidification de la masse dm est égale à $L dm$, on peut écrire le bilan sous la forme :

$$\rho L v(t) = -k \frac{dT}{dx} \quad (15)$$

Dans un premier temps nous envisageons de simplifier le problème en admettant que les constantes de temps de la diffusion dans le solide sont beaucoup plus petites que celles de la

solidification. Si on appelle s l'abscisse du front de solidification au temps t le transfert diffusif dans le solide est décrit par une loi linéaire en température :

$$T = T_0 + \frac{x}{s} (T_f - T_0) \quad (16)$$

L'équation (15) conduit à

$$k \frac{T_f - T_0}{z} = \rho L v(t) \quad (17)$$

Comme $v = ds/dt = s'$ et en posant $D = k (T_f - T_0)/(\rho L)$ on obtient l'équation :

$$s s' = D \quad (18)$$

La condition initiale $s = 0$ pour $t = 0$ permet d'obtenir la solution : $s^2(t) = 2 D t$.

La progression du front de fusion est limitée par la résistance thermique $R = s/kS$. Si $k/\rho L \ll 1$ la solution dans le fluide est quasiment linéaire.

Cette approximation n'est donnée qu'à titre d'information ; dans la mesure où la solution exacte du problème de Stefan est facile à reproduire, la comparaison avec les résultats de la méthodologie numérique sera réalisée avec celle-ci.

Il est à noter que la solution exacte n'est valable que pour le cas d'un solide à température de fusion. Si un gradient de température est maintenu dans le solide, sans toutefois qu'il y ait fusion de sorte que la température du solide soit en tout point inférieure de fusion, le flux de chaleur sert à la fois à fondre une partie du solide et à réchauffer celui-ci jusqu'à la température de fusion.

3.3 Simulation de la fusion en milieu discret

Le modèle est mis en oeuvre sur le problème de Stefan où le solide est déjà à la température de fusion et la masse volumique sera considérée comme constante. Dans ces conditions la vitesse \mathbf{V} est nulle et l'équation du mouvement n'est pas résolue.

Les paramètres physiques choisis sont les mêmes que ceux utilisés pour la présentation de la solution analytique de Stefan : $k = 1$, $\rho = 1$, $L = 2$, $a = 1$, $c_v = 1$, $St = D/a = 0.5$, $\beta = 2$ et $\lambda = 0.46478591807$.

La figure (4) montre le profil de température obtenu numériquement comparé à la solution analytique au temps $t = 0.5$.

L'algorithme de résolution est très simple : l'équation vectorielle du flux de chaleur Φ est résolue avec une valeur fixée de la position de l'interface $s(t)$. Le terme $\rho L \mathbf{v} \cdot \xi$ n'est actif que dans la maille traversée par l'interface et le flux ne s'exprime plus sous la forme d'un gradient de température entre deux mailles voisines. La chaleur qui pénètre dans la maille ne sert qu'à fondre une partie du milieu qu'elle contient. La température est alors remontée à partir de la divergence du flux $\nabla \cdot \Phi$.

La célérité de l'interface est alors calculée à partir du flux avec :

$$\mathbf{v}(t) = \frac{\Phi}{\rho L} \quad (19)$$

La position de l'interface est alors redéfinie $s = s + v dt$ de manière lagrangienne et le processus est poursuivi pour un autre pas de temps.

Avec $N = 100$ pas de temps et un maillage grossier de $n = 64$ mailles on observe une bonne concordance entre solution numérique et analytique. L'évolution du front de fusion $s(t)$ est donnée sur la figure (5). Celle-ci est continue et ne montre pas d'instabilité dues au franchissement d'une maille. La comparaison entre solution numérique et analytique est plutôt favorable.

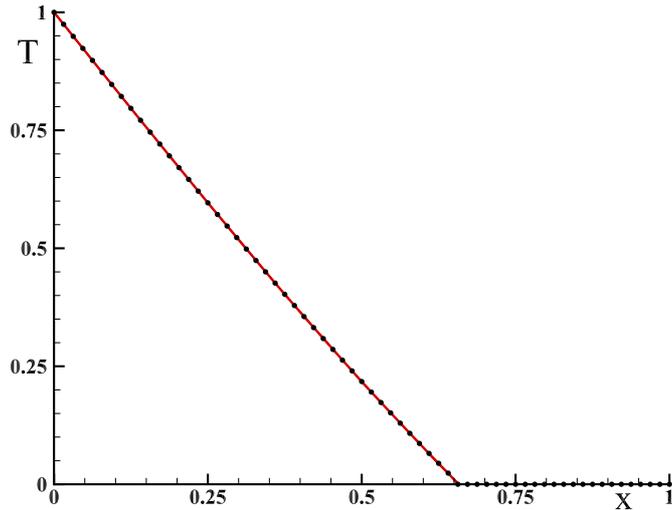


FIGURE 4. *Problème de Stefan, comparaison de la solution numérique (points) et de la solution analytique (ligne rouge) sur la distribution de température au temps $t = 0.5$ et un maillage de $n = 64$ points.*

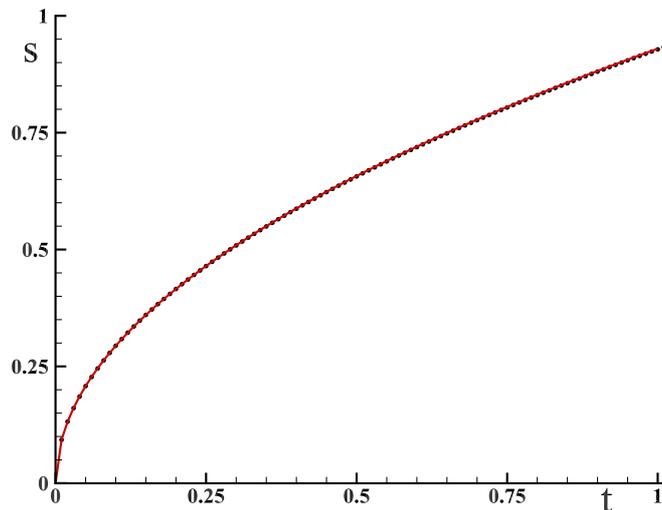


FIGURE 5. *Problème de Stefan, comparaison de la solution numérique (points) et de la solution analytique (ligne rouge) sur la position de l'interface au cours du temps $s(t)$ pour un pas de temps de $dt = 10^{-2}$ et un temps total de $t = 1$ avec maillage de $n = 64$ points.*

Ce modèle ne contient aucune itération interne, les simulations sont robustes, fiables et précises. Comme il est basé sur des opérateurs différentiels simples son utilisation ne dépend pas de la topologie du domaine, 1D, 2D, 3D, maillages structurés ou non structurés et utilise des stencils polygonaux ou polyédriques quelconques.

4 Condensation

Afin d'appréhender le phénomène de condensation dans son ensemble il est nécessaire de reprendre le système (6) pour calculer les variables vectorielles (\mathbf{V} , Φ) et remettre à jour ensuite les autres quantités scalaires (p, T, ρ, ω) à partir de $\nabla \cdot \mathbf{V}$, $\nabla \times \mathbf{V}$ et $\nabla \cdot \Phi$. Dans le cas présent l'accumulateur ω^o est nul. A l'issue de la résolution de ce système toutes les quantités (p, T, ρ) sont advectées à la vitesse du fluide. Il est à noter que la masse de vapeur condensée est entièrement pilotée par la résistance thermique du fluide sous-refroidi et donc par le flux disponible à l'interface liquide-vapeur.

Le problème général correspond à une surface maintenue à une température T_f inférieure ou égale à la température de condensation du CO_2 , $T_0 = 300 K$ sous sa pression de vapeur saturante $p_0 = 6.713078 \cdot 10^6 Pa$.

La célérité du front de condensation est calculée à partir du flux de chaleur à l'interface sous la forme :

$$\mathbf{v}_V = \frac{\Phi}{h} \quad (20)$$

où $h = \rho L$ est l'enthalpie de condensation par unité de volume.

La vitesse du liquide est nulle $\mathbf{v}_L = 0$ mais la célérité du front de condensation \mathbf{v}_L ne l'est pas et la vitesse de la vapeur au voisinage de l'interface est donnée par :

$$\mathbf{V}_V = -\mathbf{v}_L \frac{\rho_L}{\rho_V} \quad (21)$$

Cette expression est relative à une interface de condensation fixe dans l'espace. Comme la célérité est elle-même égale à \mathbf{v}_L la vitesse de la vapeur dans un référentiel fixe est ainsi égale à :

$$\mathbf{V}_V = \mathbf{v}_L \left(1 - \frac{\rho_L}{\rho_V} \right) \quad (22)$$

Il faut rappeler que \mathbf{v}_L ne représente que la composante suivant le vecteur unitaire orienté \mathbf{t} du segment Γ .

La vitesse de la vapeur au voisinage immédiat de l'interface est donnée directement par (21) mais la vitesse de la vapeur et celle du liquide dans tout le reste de l'écoulement nécessite de résoudre l'équation du mouvement du système (6). Dans le cas général tous les effets sont présents, inertie, compressibilité, viscosité, gravité, dissipation, capillaires, etc. La transformation du milieu de la phase vapeur en phase liquide s'effectue, en conservant la masse évidemment, à travers le terme $\nabla \cdot \mathbf{V}$. Cet opérateur joue un rôle considérable en mécanique et ne représente pas seulement un écart à l'incompressibilité.

Lors du changement de phase, ici la condensation de la vapeur en liquide, la masse volumique varie en général ; les variations de la masse volumique sont relativement limitées, $\rho \in [268, 698]$ pour le CO_2 à une température de $T_0 = 300 K$. Elles sont bien plus importantes pour la condensation de l'eau par exemple.

Dans ce problème la masse de vapeur qui est condensée est complètement fixée par le flux de chaleur (négatif) disponible dans le liquide sous-refroidi. Même si ces effets peuvent être modélisés, il n'existe pas *a priori* de résistance thermique du côté vapeur ou de retard à la condensation, la vapeur devient liquide dès que la température devient égale à la température de condensation T_0 .

L'écoulement dans les deux phases est résolu globalement à l'aide la seule équation du mouvement du système (6), seules les propriétés (compressibilité, coefficient de dilatation, viscosité, ...) sont variant localement en fonction de la phase. Les conditions de saut implicites dans les équations vectorielles assurent le comportement naturel des milieux et de leurs échanges. Cette approche diffère radicalement de celles où les conditions de saut doivent être satisfaites séparément de la résolution. Certaines conditions de saut peuvent être intégrées aux équations portant sur des quantités scalaires mais d'autres comme celles portant sur le flux de chaleur ou la vitesse doivent être intégrées aux équations vectorielles.

La condensation nécessite ainsi de relier la masse condensée fixée par le flux thermique Φ à la quantité dynamique correspondante ici la divergence de la vitesse $\nabla \cdot \mathbf{V}$.

4.1 Condensation à température imposée

L'expérience correspond à la condensation de CO_2 initialement sous forme de vapeur à la température de $T_o = 300 K$ sous l'influence d'un débit fixé de vapeur du même fluide dans les mêmes conditions thermodynamiques. La pression initiale dans la cavité est de $p_o = 67.5 bar$ et dans ces conditions la masse volumique du liquide est de $\rho_l = 679.2$ alors que celle de la vapeur est de $\rho_v = 268.5$. Une vitesse constante de $v = -0.01$ est maintenue sur la face supérieure de la cavité. Toutes les propriétés sont évaluées par point et en fonction du temps par la base de donnée REFPROP.

La cavité de $h = 0.1 m$ de hauteur ne contient initialement que de la vapeur et le fluide se condense naturellement en fonction du déséquilibre thermodynamique résultant de la compression.

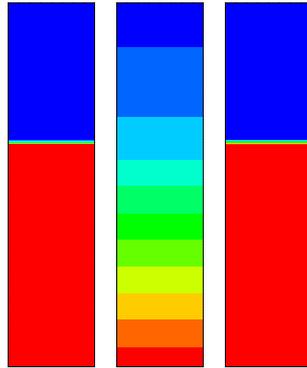


FIGURE 6. Condensation de CO_2 dans une cavité ; à gauche la masse volumique $\rho \in [268, 698]$, au centre la pression $p \in [67.1512 \cdot 10^5, 67.1564 \cdot 10^5]$ et à droite la vitesse verticale $v \in [-0.01, 0]$

Seul le système (1) est résolu et aucune procédure (VOF, Level-Set, ...) n'est utilisée pour simuler la progression de l'interface liquide vapeur.

La figure (6) présente le résultat de la simulation, les champs de masse volumique, de pression et la vitesse verticale pour le temps $t = 1500 \cdot 410^{-3}$ secondes. La masse condensée correspond au débit massique de vapeur sur le temps considéré. Comme on peut le voir la pression est continue mais pas son gradient.

Cette section présente le résultat d'une simulation directe de condensation dans une cavité isotherme alimentée par le flux d'une vapeur à débit constant. La vapeur initialement à la température T_o est comprimée et l'équilibre thermodynamique se rétablit par la condensation du liquide au fond de la cavité sous l'influence de la gravité.

4.2 Condensation dans un système anisotherme

Le phénomène global de condensation d'une vapeur sur une surface froide est abordée ici par la voie d'une simulation directe. Même si la méthodologie n'est pas contrainte par le modèle physique la simulation est réalisée en une dimension d'espace, sa généralisation aux dimensions supérieures ne pose pas de difficulté de principe.

Considérons une cavité de hauteur H dont la surface inférieure est maintenue à la température $T_0 - \Delta T$ contenant initialement que de la vapeur de CO_2 à la pression de saturation p_0 ; elle est ouverte sur sa partie supérieure et en contact avec la même vapeur. Les conditions d'équilibre mécanique n'étant pas satisfaites la vapeur se condense naturellement sur la surface froide et le liquide en contact avec celle-ci devient sous-refroidi. La vapeur continue de s'accumuler dans la cavité avec une vitesse qui dépend du flux de chaleur disponible à l'interface. Du seul point de vue thermique le cas étudié est identique au problème de Stefan simulé plus haut.

Les paramètres physiques du problème sont $H = 10^{-3} m$, la hauteur de la cavité, $T_0 = 300 K$, la température de condensation, $\Delta T = -0.1 K$, l'écart de température du sous-refroidissement, $\Delta h = \rho L = 1.03702710^6 J m^{-3}$ l'enthalpie volumique de condensation, $a_L = 1.3641410^{-8} m^2 s^{-1}$, la diffusivité thermique du liquide, $k_L = 0.08059301 W m^{-1} K^{-1}$ sa conductivité thermique, $c_{pL} = 8.697872 \cdot 10^3 J kg^{-1} K^{-1}$ sa chaleur massique à pression constante. La compressibilité de la vapeur est égale à $\chi_T = 1.035767 \cdot 10^{-6} Pa^{-1}$; ces valeurs ont été obtenues à l'aide de la base de données REFPROP (NIST).

Dans ces conditions le nombre de Stefan est égal à $St_L = 5.696992561$ ce qui permet de calculer la racine de l'équation transcendante du système (10), $\lambda = 1.097096525$.

La résolution du système (6) est réalisée en deux étapes pour chaque pas de temps, l'équation sur le flux de chaleur est résolue dans un premier temps pour obtenir Φ puis l'équation du mouvement permet d'obtenir la vitesse dans les deux phases du milieu.

L'équation vectorielle sur Φ est résolue en prenant en compte implicitement le terme de saut sur le flux $hL\mathbf{v}\xi$ où $\xi = d\nabla\xi$ est non nul sur la position courante de l'interface liquide-vapeur. La célérité de l'interface est ensuite calculée par la relation (20) $\mathbf{v}_L = \Phi/h$ et une nouvelle position de l'interface en est déduite pour un pas de temps dt .

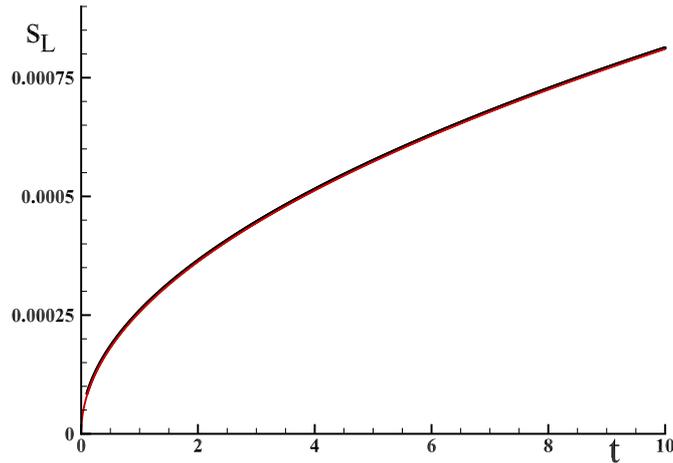


FIGURE 7. Condensation de CO_2 dans une cavité; évolution du front de condensation au cours du temps

Connaissant la masse de vapeur condensée pour le temps dt il devient alors possible d'appliquer un saut D dans l'équation du mouvement pour représenter le changement de volume engendré par les différences de masses volumiques du liquide ρ_L et de la vapeur ρ_V . Comme ici

$\rho_L > \rho_V$ un flux de vapeur à la vitesse \mathbf{V}_V vient alimenter l'interface.

L'équation du mouvement du système (6) est alors résolue à son tour pour obtenir le champ de vitesse sur l'ensemble du domaine. Comme la cavité est fermée sur le fond de celle-ci la vitesse y est nulle, le liquide est donc immobile alors que la célérité du front du liquide v_V ne l'est pas. La figure (7) montre l'évolution du front de condensation au cours du temps. Comme pour le problème de Stefan la loi de condensation est en \sqrt{t} et la vitesse v_L décroît très vite.

On montre aussi (8) la distribution de température dans les deux phases pour un temps égal à $t = 10$ s. On a bien, comme pour le problème de Stefan, la continuité de la température mais le flux subit un saut défini par l'enthalpie de condensation. Un champ de vitesse instantané est

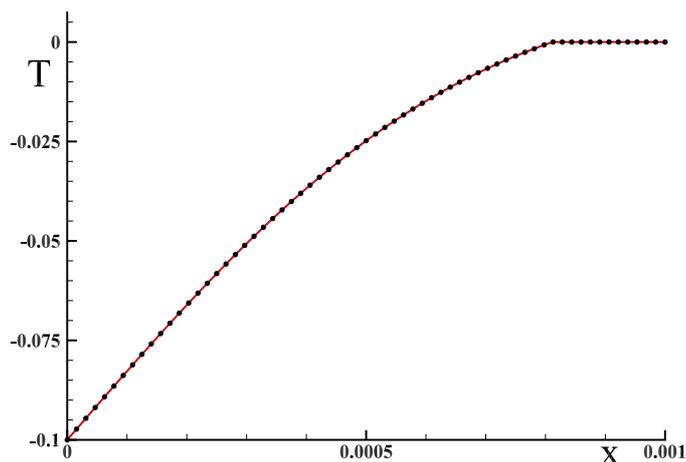


FIGURE 8. Condensation de CO2 dans une cavité; distribution de température suivant x pour un temps $t = 10$ s. Comparaison entre la solution analytique (trait rouge) et simulation (points noirs).

montré sur la figure (9) pour un temps de $t = 1$ s, l'interface est alors positionnée à l'abscisse $x_c = 2.5627 \cdot 10^{-4}$ m. La vitesse du liquide est strictement nulle et celle de la vapeur est négative. A cet instant la célérité est égale à $v_L = 1.281373 \cdot 10^{-4}$ m/s. La vitesse de la vapeur est donnée

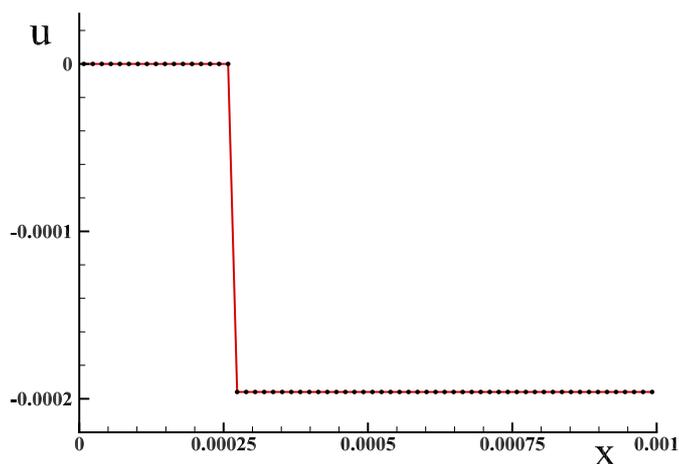


FIGURE 9. Condensation de CO2 dans une cavité; évolution de la vitesse des phases dans la cavité pour un temps égal $t = 1$ s; l'interface est située à $x_c = 0.25627 \cdot 10^{-4}$ séparant le liquide, à gauche, de la vapeur à droite.

par l'expression (22) et sa valeur est $V_V = -1.9591 \cdot 10^{-4}$ m/s.

5 Conclusions

Le modèle présenté ici a l'avantage de posséder une double représentation, en flux et en température. Notamment l'équation vectorielle sur le flux accueille naturellement le terme de changement de phase. Même si le nombre d'inconnues sur les composantes de Φ est plus grand, l'information y est aussi plus riche. La température n'est ici qu'une représentation de l'accumulation du flux comme la pression l'est pour la quantité de mouvement.

Les méthodes de représentation du changement de phase basées sur la seule équation de la chaleur présentent des inconvénients, en particulier les deux inconnues du problème y sont présentes, la température et la célérité du front de fusion. Elles nécessitent généralement des sous-itérations internes pour faire converger l'algorithme de point-fixe.

Le système (1) issu de la mécanique discrète [3] permet d'assurer les couplages cohérents avec d'autres phénomènes physiques liés aux effets capillaires, à la compressibilité, etc. Notamment le changement de phase liquide-vapeur peut être appréhendé en associant l'équation du mouvement à l'équation sur le flux ; en effet des vitesses sont générées par la condensation ou la vaporisation. Au niveau du front les seules variations des propriétés du milieu permettent par exemple de générer du liquide qui se condense sans germe préalable.

De nombreux autres problèmes peuvent être abordés par ce modèle basé exclusivement sur la compréhension de la physique. Ce problème de Stefan contribue un peu plus à établir ce modèle de comportement multiphysique comme une alternative aux équations du milieu continu.

Références

- [1] Ph. Angot, J-P. Caltagirone, and P. Fabrie. A fast vector penalty-projection method for incompressible non-homogeneous or multiphase Navier-Stokes problems. *Applied Mathematics Letters*, 25(11) :1681–1688, 2012.
- [2] S. Bordère and J-P. Caltagirone. A multi-physics and multi-time scale approach for modeling fluid-solid interaction and heat transfer. *Comput. and Struc.* <http://dx.doi.org/10.1016/j.compstruc.2015.10.009>, 164 :38–52, 2016.
- [3] J-P. Caltagirone. *Discrete Mechanics*. ISTE, John Wiley & Sons, London, 2015.
- [4] J-P. Caltagirone. Quelles différences entre un fluide et un solide? *Hal*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01187052>, 2015.
- [5] J-P. Caltagirone and S. Vincent. A Kinematics Scalar Projection Method (KSP) for Incompressible Flows with Variable Density. *Open Journal of Fluid Dynamics*, doi : [10.4236/ojfd.2015.52019](https://doi.org/10.4236/ojfd.2015.52019), 5 :171–182, 2015.
- [6] T. Jonsson. On the one dimensional stefan problem with some numerical analysis. *Department of Mathematics and Mathematical Statistics*, Thesis, 15hp, 2013.
- [7] G. Lamé and B.P. Clapeyron. Mémoire sur la solidification par refroidissement d’un globe liquide. *Ann. Chem. Phys*, 47 :250–256, 1831.
- [8] J. Stefan. Uber die theorie der eisbildung, insbesondere uber die eisbildung im polarmeere. *Ann. Physik Chemie*, 42 :269–286, 1891.
- [9] C. Vuik. Some historical notes about the stefan problem. *Nieuw Archief voor Wiskunde*, 4e serie, 11(2) :157–167, 1993.