



# MODELISATION DU REFROIDISSEMENT ET DE LA CRISTALLISATION DES CERAMIQUES ISSUES DE LA VITRIFICATION DES DECHETS AMIANTES

# MEMOIRE POUR L'OBTENTION DU MASTER EN INGENIERIE DE L'EAU ET DE L'ENVIRONNEMENT OPTION : ENERGIE ET GENIE DES PROCEDES

-----

Présenté et soutenu publiquement le 17 Juin 2010 par :

**KERE Amelie Christiane** 

Travaux dirigés par : Xavier PY, Professeur, PROMES, Perpignan

Régis Olivès, Maître de conférences, UPVD, Perpignan

Antoine MEFFRE, Doctorant, PROMES

Equipe Stockage pour Helioprocédés Photochimique et Energétique (SHPE)

Laboratoire Procédés Matériaux et Energie Solaire (PROMES)

Jury d'évaluation du stage :

Président : Pr. Yezouma COULIBALY

Membres: Pr. Xavier PY

Dr. Yao AZOUMAH

Promotion [2009/2010]

# **REMERCIEMENTS**

Ce travail a été réalisé au sein de l'équipe Stockage pour Helioprocédés Photochimique et Energétique (SHPE) du Laboratoire Procédés Matériaux et Energie Solaire (PROMES) en collaboration avec l'Institut International de L'Ingénierie de l'Eau et de l'Environnement (2iE).

Avec tout mon enthousiasme, je voudrais rendre mérite à tous ceux qui ont contribué, chacun à sa manière, à mener à bien ce mémoire. Que tous ceux qui m'ont permis d'être là, reçoivent le témoignage de ma reconnaissance.

Je voudrais tout d'abord, exprimer mes vifs remerciements et ma reconnaissance au **Pr. Xavier PY**, qui m'a accueilli et encadré pour mon stage au laboratoire PROMES.

Mes remerciements vont aussi, à Monsieur **Régis OLIVES**, Maître de conférences, UVPD pour sa disponibilité.

J'adresse également mes sincères remerciements au **Pr. Yezouma COULIBALY**, et au **Dr. Yao AZOUMAH**.

Je remercie également Antoine MEFFRE, doctorant, PROMES.

J'aimerai remercier, très chaleureusement tous les membres du laboratoire pour leur collaboration.

Finalement mes remerciements s'adressent également à tous mes enseignants.

# DEDICACES

Je dédie ce travail à :

Mes parents :

M.KERE Antoine et Mme KERE/OUEDRAOGO Azèta

A mes frères Arnaud, Severin, Lionel

A ma grande mère

A mon bien aimé

A toute ma famille.

# NOMENCLATURE

**C**<sub>p</sub> : capacité calorifique (J/Kg/K)

**C**<sub>ps</sub> : capacité calorifique de la phase solide (J/Kg/K)

 $\mathbf{C}_{\mathbf{pl}}$  : capacité calorifique de la phase liquide (J/Kg/K)

**C**<sub>eff</sub> : capacité thermique apparente (J/Kg/K)

DSC : Differential Scanning Calorimetry (calorimétrie différentielle à balayage)

**DRX** : Diffractométrie de Rayons X

*e<sub>l</sub>*: épaisseur de la lingotière (m)

E: effusivité thermique (J/K/m<sup>2</sup>/s<sup>-1/2</sup>)

**Gr** : nombre de Grashof

**h** : coefficient global d'échange thermique convection  $(W/m^2/K)$ 

 $\mathbf{h_c}$  : coefficient d'échange thermique par convection (W/m<sup>2</sup>/K)

 $\mathbf{h_r}$  : coefficient d'échange thermique par rayonnement (W/m<sup>2</sup>/K)

H1 : largeur de la plaque de cofalit (m)

H2 : largeur de la lingotière (m)

 $L_c$  : chaleur latente de cristallisation

L1 : longueur de la plaque de cofalit (m)

L2 : longueur de la lingotière (m)

**Pr** : nombre de Prandtl

 $\mathbf{R}$  : coefficient de sur relaxation

**R**<sub>c</sub> : vitesse critique de cristallisation (K/s)

**R**<sub>th</sub> : résistance thermique de la lingotière

**t**:temps(s)

**T** : température (K)

**T**<sub>air</sub> : température de l'air (K)

T<sub>c</sub> : température critique de cristallisation (K)

T<sub>i</sub> : température initiale (K)

**x** : axe des abscisses

y : axe des ordonnées

# Lettres grecques

α : diffusivité thermique (m<sup>2</sup>/s)λ : conductivité thermique (W/m<sup>2</sup>/K)λ<sub>c</sub>: conductivité thermique du cofalit (W/m<sup>2</sup>/K)λ<sub>l</sub>: conductivité thermique de la lingotière (W/m<sup>2</sup>/K)ρ : masse volumique (Kg/m<sup>3</sup>)ε: émissivitéσ : constante de Stefan-Boltzmann 5,675 10-8 W/m<sup>2</sup>/T<sup>-4</sup>μ : viscosité dynamique de l'air (Pa.s)Δ**x**: pas d'espace suivant l'axe x (m)Δ**y**: pas d'espace suivant l'axe y (m)Δ**t**: pas de temps (s)

## Indices

- $\boldsymbol{i}: indice \ suivant \ x$
- **j** : indice suivant y
- **p** : paroi

# Sommaire

REMERCIEMENTS	ii
DEDICACES	iii
NOMENCLATURE	iv
I-INTRODUCTION	3
I .1.Contexte de l'étude	3
I .2. Présentation du cofalit	4
I .3.Cadre de l'étude	4
I .4. Objectif de l'étude	5
I .5. Présentation de l'étude	5
II-ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE	6
II .1. Etat de l'art	6
II .2. Principe du stockage par chaleur sensible	9
II .3. Propriétés thermophysiques du cofalit	10
1. II .3. 1. Diffusivité thermique	
2. II .3. 2. Chaleur spécifique	11
3. II .3. 3. Masse volumique	11
4. II .3. 3. Conductivité thermique	11
II .4. Comportement thermique du cofalit	12
II .5. Changement de phase	13
III-MODELISATION NUMERIQUE	15
III .1. Introduction	15
III .2. Modèle physique	15
III .3. Formulation mathématique	16
5. II .3. 1. Hypothèses	16
6. II .3. 2. Equations de transfert	16
7. II .3. 3. Conditions initiale et aux limites	16
III .4. Modélisation des transferts radiatifs	19
III .5. Modélisation du changement de phase	19
III .6. Méthodologie numérique	
8. II .6. 1. Introduction	
9. II .6. 2. Maillage du domaine d'étude	
10. II .6. 3. Discrétisation	21

11. II .6. 4. Discrétisation des équations de transferts	
12. II .6. 5. Algorithme de résolution	24
13. II .6. 6. Critère de convergence	25
14. II .6. 7. Organigramme de programmation	
15. II .6. 8. Procédure de calcul	27
16. II .6. 9. Validation	27
IV-RESULTATS ET DISCUSSION	
V-CONCLUSION ET PERSPECTIVES	53
VII-BIBLIOGRAPHIE	55
VIII-ANNEXES	57
RESUME	62
SUMMARY	63

# **I-INTRODUCTION**

# I .1.Contexte de l'étude

Dans le contexte énergétique et climatique actuel, de nombreux procédés industriels envisagés et développés au cours des années 80 comme les centrales électrosolaires thermodynamiques retrouvent un fort regain d'intérêt. Cependant, pour que ces procédés puissent offrir des performances acceptables et/ou simultanément puissent être en phase avec la demande, un stockage d'énergie thermique s'avère indispensable. Dans la gamme de températures considérées (200 à 1000°C), il s'agit en fait aujourd'hui pour ces procédés d'un verrou scientifique et technique limitant.

En effet, les contraintes économiques, règlementaires et environnementales mettent à mal aujourd'hui les solutions de stockage d'hier souvent héritées des industries chimiques ou métallurgiques.

La réalisation de stockages d'énergie thermique industriels de l'ordre du GWh suppose la mise en œuvre de plusieurs dizaines de milliers de tonnes de matériaux de stockage ainsi que d'échangeurs coûteux.

Cette étude se situe dans le cadre d'un projet, centré sur la valorisation d'un matériau issu de vitrification des déchets amiantés et nommé Cofalit. Ce matériau en fin de vie, a été identifié par le programme Solstock, en cours. Il présente toutes les qualités thermophysiques pour stocker l'énergie thermique sous forme de chaleur sensible, est très bon marché et peut être mis en forme en sortie du procédé de vitrification par moulage à partir de la coulée.

Le cofalit présente une hétérogénéité structurale visible à l'œil nu. Or, le programme SESCO en cours, a montré que la structure idéale de ce matériau pour le stockage thermique par chaleur sensible est la céramique. A priori, cette différence de microstructure est la conséquence d'une vitesse de refroidissement hétérogène au sein du matériau.

Ce travail rend compte de l'évolution du matériau vitrifié, qui initialement liquide à haute température, se solidifie en se refroidissant. Il s'agit d'une modélisation numérique du refroidissement et du changement de phase.

# I .2. Présentation du cofalit

Le cofalit est un matériau issu du procédé de vitrification de déchets amiantés par torche à plasma.



Figure1 : Etape de traitement des déchets amiantés

Il se présente comme un verre noir ou une roche basaltique et possède d'excellentes qualités chimiques, physiques et mécaniques. Nombreuses études scientifiques ont montré l'innocuité de ce vitrifiât, qui lui donnent aujourd'hui le statut d'un sous produit valorisable. Actuellement, il est valorisé en tant que granulat, après concassage en sous couche routière.

Ce matériau, composé majoritairement de SiO2 et CaO (70 à 80 % en pourcentage massique), de métaux lourds retrouvés à l'état de trace et de non lixiviables est analogue à certains types de basaltes (silicate de calcium).

# I .3.Cadre de l'étude

Notre stage s'est déroulé au laboratoire PROMES (PROcédés, Matériaux et Energie Solaire). Ce laboratoire est une unité propre de recherche du CNRS, il est dirigé par G. Flamant, et est localisé sur deux sites : à Odeillo-Font Romeu, site du Four Solaire Félix Trombe et à Perpignan, site de Tecnosud.

Axe 1 :	Axe 2 :
<i>Matériaux et conditions extrêmes</i>	Conversion, stockage, transport de l'énergie
<ul> <li>Equipe Matériaux Hautes Températures</li></ul>	<ul> <li>Equipe Vecteurs Energétiques Durables</li></ul>
pour l'Espace et l'Energie (MHTE2) <li>Equipe Traitements de Surface et Matériaux</li>	(VED) <li>Equipe Thermodynamique, Energétique et</li>
pour applications thermomécaniques et	Systèmes réactifs (TES) <li>Equipe Stockage pour Hélioprocédés</li>
photovoltaïques (TSM)	Photochimiques et Energétiques (SHPE)

Globalement, la recherche est structurée en deux axes reparties en équipe:

Figure 2 :	Organigramme	du laboratoire	PROMES

C'est précisément dans l'équipe Stockage pour hélioprocédés photochimiques et énergétiques (SHPE) que ce travail a été effectué.

# I .4. Objectif de l'étude

L'objectif de notre travail est la **«Modélisation du refroidissement et de la cristallisation des céramiques issues de la vitrification des déchets amiantés.»** 

Plus précisément, il s'agira de :

- Simuler numériquement les transferts thermiques autour du matériau en refroidissement;
- Déterminer les conditions de refroidissement optimum pour obtenir un matériau homogène en céramique.

# I .5. Présentation de l'étude

La première partie de ce travail, présente une étude bibliographique sur les technologies solaires, la deuxième partie consiste à la modélisation des transferts thermiques et du phénomène de changement de phase. Puis les résultats sont présentés et discutés. La dernière partie est dédiée à la conclusion.

# **II-ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE**

# II .1. Etat de l'art

A ce jour, les systèmes de stockage d'énergie thermique pour centrales électrosolaires peuvent être déclinés selon les types principaux de centrales actuellement industrialisées.

Les centrales cylindroparaboliques (type ANDASOL, figure 3) sont reconnues aujourd'hui comme industriellement les plus matures (les centrales Luz fonctionnent depuis les années 80 aux USA). Elles sont composées d'un champ solaire constitué de concentrateurs cylindroparaboliques (figure 4) chauffant une huile de synthèse circulant dans un tube en acier recouvert d'un absorbeur sélectif lui-même isolé d'un tube sous vide.

L'huile chaude en sortie de champ (la température maximale de 400°C est imposée par la décomposition de l'huile) permet via des échangeurs de chaleur de préchauffer, évaporer et surchauffer de la vapeur d'eau alimentant un bloc électrique. La variation du flux solaire au cours de la journée imposerait que l'installation soit dimensionnée aux conditions crête et ne fonctionne la plupart du temps qu'en sous régime. Un stockage d'énergie thermique permet de dimensionner le bloc électrique aux conditions moyennes de puissance, de le faire fonctionner en régime nominal et donc d'accroître sa durée de vie. Par ailleurs, le stockage permet aussi d'isoler le bloc électrique des variations dynamiques soudaines de l'ensoleillement dues aux nuages et de mettre en phase la production et la demande en électricité.



Figure 3 : centrale électrosolaire cylindroparabolique



Figure 4 : concentrateurs cylindroparaboliques

Actuellement, la seule solution de stockage reconnue mature [2,5,6] est la technologie dénommée « deux cuves sels fondus ». Un sel fondu (un binaire NaNO<sub>3</sub>/KNO<sub>3</sub> ou un ternaire Ca(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>/NaNO<sub>3</sub>/KNO<sub>3</sub> ou NaNO<sub>2</sub>/NaNO<sub>3</sub>/KNO<sub>3</sub>) est utilisé en chaleur sensible. Il transite d'une cuve dite froide à une cuve dite chaude via un échangeur selon que l'on stocke ou déstocke l'énergie. La mise en œuvre de grandes quantités de sel classifié comme comburant (28 000 tonnes pour Andasol) couplées à l'huile de synthèse hautement inflammable du champ solaire conduit actuellement le procédé à une classification SEVESO. En termes d'acceptabilité (autorisation pour l'implantation du site industriel, acceptation par la population locale, avantage concurrentiel commercial d'une électricité « verte »,..), il est clair qu'une centrale électrosolaire ne peut se satisfaire aujourd'hui d'une telle image.

Par ailleurs, les sels de nitrates sont essentiellement produits par les mines du Chili qui ont déjà leurs marchés bien identifiés (70% industrie chimique, 30% agriculture). Dès les années 80, les opérateurs de la centrale Solar Two (USA) avaient calculé que la réalisation d'une tranche de 300MWe de centrale solaire suffirait chaque année à absorber toute la production [7]. Considérant les nombreux projets en cours [1], on constate que ce type de stockage conduirait à une concurrence dangereuse entre le développement des centrales électrosolaires et les activités agricoles liées à l'alimentation.

En termes d'analyse du cycle de vie [8] ce type de stockage représente 42 à 56 % (selon qu'il s'agit d'une centrale cylindroparabolique ou à tour) de la contribution au réchauffement global en g  $CO_2$  equi/kWh. On conçoit ainsi combien il est important de concevoir d'autres types de stockage pour améliorer l'éco-bilan de ces procédés.

Enfin, cette technologie représente financièrement un coût d'investissement initial important, entre 15 et 20% du coût de la centrale.

Des technologies alternatives ont été envisagées dans les années 80. Il s'agit de stockage en chaleur sensible sur roches mises en œuvre en lits granulaires de type thermoclines. Cette solution n'a jamais dépassé le stade pilote, le thermocline n'ayant pas réellement convaincu de sa réelle efficacité et les matériaux naturels de leur fiabilité.

Plus récemment, les spécialistes Allemands [9] ont proposé et testé le stockage en chaleur sensible mettant en œuvre du béton haute température ou des céramiques réfractaires. Le béton est disponible partout, facilement mis en œuvre et présente un

coût raisonnable (80 euros la tonne). Néanmoins, sa faible conductivité a conduit les investigateurs à noyer un échangeur de chaleur multitubulaire dans les blocs (échangeur perdu). Par ailleurs, le fort contenu initial en eau du béton impose un protocole de mise en service très pénalisant. Les risques d'explosion des blocs, par formation de poche de vapeur, présentent des dangers importants. Enfin, l'industriel en charge de commercialiser le système a estimé sa durée de vie à 10 ans, ce qui est rédhibitoire pour des centrales destinées à durer 25 ans. Cette solution est donc actuellement rejetée par les industriels des centrales électrosolaires.

Des matériaux plus élaborés ont aussi été considérés. Il s'agit par exemple des composites de matériaux à changement de phase (PCM) et de graphite développés par le laboratoire PROMES [10-11]. Ces matériaux très performants (fortes capacités de stockage, forte conductivité) sont beaucoup trop coûteux pour être envisagés en stockage de production et ne répondent pas mieux aux critères de sécurité ou environnementaux que les sels fondus. Ils doivent être éventuellement limités à de petites quantités pour des utilisations sensibles telles que la protection des récepteurs solaires.



Figure 5 : centrale électrosolaire à tour type PS10 (Abengoa



Figure 6 : centrale PS10 Séville

L'autre filière de centrales électrosolaires est celle des centrales à tour (figures 5-6) récemment réalisée à l'échelle industrielle par Abengoa Solar à Séville (PS10 et PS20). Même si ces premières centrales à tour industrielles ne fonctionnent pas (encore) à des températures élevées, le propre de cette technologie est de pouvoir potentiellement dépasser les 400°C limites des cylindroparaboliques pour aller jusqu'à 1000°C dans le cas des centrales à tour hybrides à turbine à gaz. A ce jour, les centrales à tour industrielles PS10-PS20 fonctionnent à 250°C-40 bars en évaporation directe de vapeur

avec un stockage de très courte durée (30 minutes) sous forme de vapeur surchauffée très encombrant et très coûteux.

Ces centrales sont composées d'un champ solaire d'héliostats et d'une tour au sommet de laquelle un récepteur permet de chauffer un fluide caloporteur transférant l'énergie au bloc. Pour ce type de centrale, soit la technologie des sels fondus est encore utilisée (cas de la centrale Thémis ou de Solar Two [12-13]) soit des stockages en chaleur sensible sur des céramiques réfractaires sont envisagés pour les plus hautes températures [14]. Cette technique développée dans l'industrie de la verrerie est mature mais le prix des matériaux (de 4500 à 8000 euros la tonne) est manifestement rédhibitoire. Par ailleurs, en termes d'analyse du cycle de vie, ces céramiques réfractaires présentent souvent des compositions peu respectueuses de l'environnement.

## II .2. Principe du stockage par chaleur sensible

Le stockage par chaleur sensible utilise les propriétés calorifiques d'un corps. La quantité d'énergie (variation d'enthalpie à pression fixe) stockée dépend alors de la capacité calorifique du corps, et de l'écart entre sa température initiale et la température de stockage.

Si on réchauffe (ou on refroidit) un corps de masse *m*, de la température initiale T1 à une température finale T2, l'énergie stockée donnée par sa variation d'enthalpie est :

$$\Delta H = H_{finale} - H_{initiale} \tag{1}$$

$$\Delta H = \int_{T_1}^{T_2} mc(T) dT \tag{2}$$

où c(T) est la capacité calorifique massique ou chaleur spécifique du corps en J/Kg/K. Si la chaleur spécifique peut être considérée comme constante dans l'intervalle de températures entre *T*1 et *T*2 (c(T) = cte = c) :

$$\Delta H = mc(T_2 - T_1) \tag{3}$$

On remarque que la quantité d'énergie stockée est proportionnelle à l'écart de température. Le stockage par chaleur sensible est intéressant pour des grands écarts de température. On utilise principalement des corps ayant des chaleurs spécifiques importantes.

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane

## II .3. Propriétés thermophysiques du cofalit

# II .3. 1. Diffusivité thermique

La mesure de la diffusivité thermique a été effectuée par la méthode "flash". Cette méthode, initialement développée par Parker en 1961 est une méthode couramment employée pour la mesure de la diffusivité thermique de matériaux. Elle consiste à exciter un échantillon plan cylindrique et de petites dimensions par une brève impulsion thermique sur sa face avant.



Figure 6 : schématisation de la méthode "flash"

Ces mesures réalisées par la société Netzsch ont permis d'obtenir l'évolution de la diffusivité thermique du cofalit en fonction de la température (figure 8).



Figure 8 : Evolution de la diffusivité thermique du cofalit en fonction de la température

La diffusivité thermique est décrite par l'expression suivante (T en K) :

$$\alpha(T) = -1,53.E^{-12}T^4 + 4,83.E^{-9}T^3 - 4,74.E^{-6}T^2 - 0,00108T + 0,821$$
(4)

## II .3. 2. Chaleur spécifique

De même les mesures de chaleur spécifique en DSC ont été effectuées par la société Netzsch. La DSC (calorimètre différentiel à balayage) est une technique qui mesure le flux de chaleur absorbé ou dégagé par un spécimen en fonction de la température ou du temps quand il est soumis à un programme de température contrôlé dans une atmosphère contrôlée.



Figure 9 : Evolution de la capacité calorifique du cofalit en fonction de la température

La capacité calorifique s'exprime par l'équation suivante (T en K) :

$$C_p(T) = 6,08.E^{-10}T^4 - 1,24.E^{-6}T^3 + 1,47.E^{-4}T^2 + 1,0014T + 514,78$$
(4)

## II .3. 3. Masse volumique

La variation de la masse volumique en fonction de la température dépend du coefficient de dilatation.

 $\rho(T) = \rho_{amb} \left[ 1 - \beta (T - T_{amb}) \right]$ 

 $\beta$ : Coefficient de dilation thermique

 $\rho_{amb}$  est la valeur de la masse volumique mesurée à la température ambiante

$$\rho_{amb} = 3103 \text{ g/cm}3$$

Le coefficient de dilatation thermique moyen du cofalit est de  $8.8 \times 10^{-6} K^{-1}$ .

# II .3. 3. Conductivité thermique

Les données mesurées ont été utilisées pour calculer la conductivité thermique par la relation suivante :

$$\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{C} \boldsymbol{p} \cdot \mathbf{a} \tag{5}$$



Figure 10 : Evolution de la conductivité thermique du cofalit en fonction de la température

La conductivité thermique est décrite par l'expression ci-après (T en K) :

$$\lambda(T) = 1,69. E^{-12}T^4 - 5,73. E^{-9}T^3 + 7,99. E^{-6}T^2 - 0,0057T + 3,19$$
(6)

L'annexe 1 récapitule les valeurs des propriétés thermophysiques du cofalit en fonction de la température.

# II .4. Comportement thermique du cofalit

Lors du refroidissement industriel à l'issu du procédé de vitrification, on constate que le cofalit à une structure hétérogène, on obtient du verre en surface, de la céramique au cœur. Les DRX (diffractométrie de rayons X), illustrent que ce matériau est un verre de céramique.



Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane

Figure 11 : Hétérogénéité structurale du cofalit

Des mesures effectuées par DSC et DRX entre 20 et 1000°C (figure 12), ont permis de déterminer la température  $T_c$  à laquelle se passe le changement d'état (cristallisation) du cofalit. Une transition vitreuse se produit à la température de 709°C, suivi d'un pic de cristallisation qui commence à 922°C.

La vitesse critique de cristallisation  $R_c$  est de 2°C/s. Cependant pour une vitesse de refroidissement inférieure à cette valeur et pour  $T < T_c$ , le matériau est susceptible de se cristalliser.



Figure 12 : Comportement thermique du cofalit

# II .5. Changement de phase

Les modélisations numériques des changements de phase, et plus particulièrement des changements de phase liquide-solide, ont trouvé leurs applications dans plusieurs domaines de l'industrie moderne [19]. Parmi les secteurs qui se sont intéressés à ces techniques, on trouve notamment le secteur de la métallurgie, où le besoin est de comprendre et de contrôler la fusion des métaux dans les fours et la solidification des alliages dans les moules.

La résolution des problèmes de changement de phase se caractérise par le fait qu'en plus de la détermination du champ des températures, il faut aussi déterminer la position du front de changement de phase, front qui sépare la phase liquide de la phase solide.

En ce qui concerne la plupart des corps purs, les deux phases liquide et solide sont séparées par une mince interface, d'épaisseur presque nulle. Ce n'est pas le cas des autres corps ou solutions dont les deux phases sont séparées par une région d'une certaine épaisseur dans laquelle elles cohabitent. Cette région peut avoir plusieurs centimètres d'épaisseur et présenter une microstructure très complexe.

En outre, la complexité de ce mécanisme peut être également amplifiée par d'autres phénomènes (comme la dilatation, la surfusion). Les propriétés des matériaux obtenus après un traitement thermique dépendent non seulement du niveau de température atteint mais aussi de la vitesse de refroidissement.

Les méthodes numériques de simulation des changements de phase s'appuient sur plusieurs hypothèses simplificatrices et ne s'intéressent qu'aux cas et aux géométries les plus favorables.

# **III-MODELISATION NUMERIQUE**

## III .1. Introduction

La simulation est un processus qui permet de reproduire numériquement un phénomène préalablement décrit par un modèle mathématique. Les performances des calculateurs à cet effet permettent d'envisager des calculs faisant intervenir différents phénomènes physiques couplés.

Dans ce qui suit, nous présentons une modélisation numérique des transferts thermiques conductifs, convectif et radiatifs, dominants dans le cofalit à haute température (à partir de 1673 K), et une modélisation du changement de phase.

## III .2. Modèle physique

Nous considérons comme schématisée sur la figure 13, une plaque d'axe verticale contenue dans une lingotière en acier.

Les quatre côtés du modèle sont soumis au flux de convection naturelle pour une température ambiante de 293K.



Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et

#### III .3. Formulation mathématique

Lors du refroidissement des plaques de cofalit, les transferts thermiques sont supposés régis par l'équation de chaleur. Dans un premier temps, les propriétés physiques sont supposés constantes, et dans un second temps, la prise en compte de la variation des propriétés thermophysiques est considérée.

## II .3. 1. Hypothèses

Le problème est symétrique suivant l'axe (o,y).

**1<sup>er</sup> cas** : La longueur de la plaque est très supérieure à son épaisseur, par conséquent il est possible de négliger les effets de bords et considérer la plaque comme ayant une longueur infinie et de négliger les variations selon la longueur.

Le transfert de chaleur est unidimensionnel.

 $2^{eme}$  cas : Le transfert de chaleur est bidimensionnel.

## II .3. 2. Equations de transfert

> Equation de la chaleur en transfert monodimensionnel

$$\frac{\partial^2 T}{\partial X^2} = \frac{1}{a} \frac{\partial T}{\partial t}$$
(7)

> Equation de la chaleur en transfert bidimensionnel

$$\frac{\partial^2 \mathbf{T}}{\partial \mathbf{X}^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{T}}{\partial \mathbf{Y}^2} = \frac{1}{a} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{t}}$$
(8)

$$a = \frac{\lambda}{\rho C_p} \tag{9}$$

Où T est la température à l'instant t sur une distance x le long de la plaque.

## II .3. 3. Conditions initiale et aux limites

#### > Condition initiale

A l'instant initial, la température est uniforme dans tout le matériau.

$$t = 0; T = T_i$$

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane

#### > Conditions aux limites



Figure 14 : Symétrie utilisée pour la résolution numérique



$$-\lambda_C \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \tag{10}$$

Parois latérales :

> 
$$x = L2$$
;  $0 < y < H2$ 

$$-\lambda_L \frac{\partial T}{\partial x} = h \big( T_{N2,j} - T_{air} \big) \tag{11}$$

$$-\lambda_C \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_{N1,j} - T_{air}}{R_{th}}$$
(12)

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane Parois horizontales :

> 
$$0 < x < L2$$
 et  $y = 0$   
 $-\lambda_L \frac{\partial T}{\partial y} = h(T_{i,1} - T_{air})$  (13)

$$\succ$$
 0 < x < L1 et y = H2

$$-\lambda_{C}\frac{\partial T}{\partial x} = h(T_{i,M2} - T_{air})$$
(14)

$$\succ \qquad L1 < x < L2 \text{ et } y = H2$$

$$-\lambda_L \frac{\partial T}{\partial x} = h \big( T_{i,M2} - T_{air} \big) \tag{15}$$

 $\succ$  0 < x < L1 et y = H1

$$-\lambda_{\mathcal{C}}\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{y}} = \frac{T_{i,M1} - T_{air}}{R_{th}}$$
(16)

$$Rth = \frac{e_L}{\lambda_L} \tag{17}$$

N1 et M1 représentent respectivement le nombre de nœuds dans la direction horizontale x (de l'axe de symétrie jusqu'à la longueur L1) et dans la direction verticale y (de 0 à H1).

N2 et M2 représentent respectivement le nombre de nœuds dans la direction horizontale x (jusqu'à l'axe de symétrie) et dans la direction verticale y domaine délimité par le cofalit (sans la lingotière).

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane

Avec

#### III .4. Modélisation des transferts radiatifs

Par analogie avec la convection, on définit un paramètre  $h_r$ , correspondant au coefficient d'échange thermique par rayonnement.

Cependant, un corps à la température T1, placé dans une enceinte à la température T2, échange avec celle-ci la densité de flux thermique [17-page 174]:

$$-\lambda \left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_{P} = \sigma \varepsilon (T_{1}^{4} - T_{2}^{4})$$
(18)

$$-\lambda \left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_{P} = h_{r} \left(T_{1} - T_{2}\right)$$
(19)

$$h_r = \frac{\sigma \varepsilon (T_1^4 - T_2^4)}{T_1 - T_2}$$
(20)

En faisant un couplage des différents modes de transfert, on obtient

$$-\lambda \left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_{p} = (h_{c} + h_{r})(T_{p} - T_{air})$$
(21)

On voit alors apparaître un coefficient global d'échange h égal à la somme des coefficients d'échange par convection  $h_c$  et par rayonnement  $h_r$ .

$$h = h_c + h_r \tag{22}$$

## III .5. Modélisation du changement de phase

Les transferts thermiques incluant un changement d'état sont désignés sous le nom de problème de Stefan.

Le problème de Stefan, concerne le transfert de chaleur dans un milieu où se produit la fusion ou la solidification de substances absorbant ou libérant de l'énergie. Il se caractérise par l'existence d'une interface qui sépare deux phases et au travers de laquelle se transfère de la chaleur latente.

La première analyse de ce problème a été faite par NEUMANN [15] en 1860, mais les premiers résultats publiés sont dus à STEFAN [16] en 1890.

Il est alors nécessaire de prendre en compte l'existence d'une frontière mobile durant le changement d'état par l'introduction d'un terme représentatif.

# > Introduction d'un $C_p$ sous la forme d'une courbe de Gauss

La méthode utilisée pour l'introduction du terme source représentant le changement d'état est la méthode du  $C_p$  équivalent. Elle consiste à considérer la capacité calorifique  $C_p$  comme une courbe de Gauss définie par l'équation (16) ([15]).

La courbe de Gauss décrivant le  $C_p$  est centrée sur la température de changement de phase et caractérisée par un écart de température arbitraire  $\delta$ Tc.

$$C_{p=} \frac{C_{ps} + C_{pl}}{2} + \frac{L_c}{2\delta T_c \sqrt{\pi}} \exp\left[\frac{(T - T_c)^2}{2\delta T_c^2}\right]$$
(23)

## III .6. Méthodologie numérique

## II .6. 1. Introduction

Les équations (7-8) et les conditions aux limites qui leurs sont associées (10-16) sont discrétisées en utilisant une méthode explicite aux différences finies [16-pages 66-75]. Cette méthode consiste à approcher une fonction  $\Phi(\Phi = T, V)$  en un nœud du domaine par un développement en série de Taylor de cette fonction autour de ce nœud.

## II .6. 2. Maillage du domaine d'étude

Le domaine étudié est découpé par un maillage de forme et de dimensions adaptées au problème.



Figure 15 : Maillage du domaine

#### II .6. 3. Discrétisation

Les dérivées premières et secondes d'une fonction  $\Phi(x, y, t)$  sont approchées par des différences centrées et décentrées qui vérifient les relations suivantes :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_{ij}^{t+\Delta t} - T_{ij}^{t}}{\Delta t}$$
(24)

Centrée :

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_{i+1,j}^t - T_{i+1,j}^t}{\Delta x}$$
(25)

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{T_{i,j+1}^t - T_{i,j+1}^t}{\Delta y} \tag{26}$$

Décentré gauche :

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_{i,j}^t - T_{i-1,j}^t}{\Delta x}$$
(27)

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{T_{i,j}^t - T_{i,j-1}^t}{\Delta y} \tag{28}$$

Décentré droite :

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_{i,j}^t - T_{i+1,j}^t}{\Delta x}$$
(29)

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{T_{i,j}^t - T_{i,j+1}^t}{\Delta y} \tag{30}$$

Centrée :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial^2 x} = \frac{T_{i+1,j}^t - 2 T_{i,j}^t - T_{i-1,j}^t}{\Delta x^2}$$
(31)

$$\frac{\partial^2 T}{\partial^2 y} = \frac{T_{i,j+1}^t - 2 T_{i,j}^t - T_{i,j-1}^t}{\Delta y^2}$$
(32)

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane Décentré gauche :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial^2 x} = \frac{T_{i,j}^t - 2 T_{i-1,j}^t - T_{i-2,j}^t}{\Delta x^2}$$
(33)

$$\frac{\partial^2 T}{\partial^2 y} = \frac{T_{i,j}^t - 2 T_{i,j-1}^t - T_{i,j-2}^t}{\Delta y^2}$$
(34)

Décentré droite :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial^2 x} = \frac{T_{i,j}^t - 2 T_{i+1,j}^t - T_{i+2,j}^t}{\Delta x^2}$$
(35)

$$\frac{\partial^2 T}{\partial^2 y} = \frac{T_{i,j}^t - 2 T_{i,j+1}^t - T_{i,j+2}^t}{\Delta y^2}$$
(36)

Avec

$$\Delta x = \frac{1}{2N2-1}$$
;  $\Delta y = \frac{1}{2M2-1}$ 

#### II .6. 4. Discrétisation des équations de transferts

La discrétisation des équations (7-8) conduit aux systèmes d'équations algébriques suivants :

## II .6. 4. 1. Equations discrétisées

Equation de la chaleur 1D :

$$\frac{T_{i+1,j}^{t} - 2 T_{i,j}^{t} - T_{i-1,j}^{t}}{\Delta x^{2}} = \frac{1}{a} \frac{T_{i,j}^{t+\Delta t} - T_{i,j}^{t}}{\Delta t}$$
(37)

i=2,..., N-1; j=2,..., M-1

> Equation de la chaleur 2D :

$$\frac{T_{i+1,j}^{t} - 2 T_{i,j}^{t} - T_{i-1,j}^{t}}{\Delta x^{2}} + \frac{T_{i,j+1}^{t} - 2 T_{i,j}^{t} - T_{i,j-1}^{t}}{\Delta y^{2}} = \frac{1}{a} \frac{T_{i,j}^{t+\Delta t} - T_{i,j}^{t}}{\Delta t}$$
(38)

i= 2,..., N-1 ; j=2,..., M-1

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane

On a alors pour chacun des nœuds internes l'équation (32):

$$T_{i,j}^{t+\Delta t} = \frac{1}{Mx} \left( T_{i+1,j}^t + T_{i-1,j}^t \right) + \left( 1 - \frac{2}{Mx} \right) T_{i,j}^t + \frac{1}{My} \left( T_{i+1,j}^t + T_{i-1,j}^t \right) + \left( 1 - \frac{2}{My} \right) T_{i,j}^t \quad (39)$$
  
avec  $Mx = \frac{(\Delta x)^2}{a \cdot \Delta t}$  et  $My = \frac{(\Delta y)^2}{a \cdot \Delta t}$ 

L'avantage de la méthode explicite est que chaque équation ne contient qu'une seule inconnue  $(T_{i,j}^{t+\Delta t})$ . Par contre, n'importe quelle valeur des paramètres  $M_k$  reliant les incréments de temps et d'espace ne saurait convenir. En effet les coefficients  $\left(1 - \frac{2}{M_k}\right)$  de  $T_{i,j}^{t}$  ne peuvent être négatifs, car d'après l'équation ci-dessus, cela imposerait que la valeur de la température au temps  $t + \Delta t$  soit d'autant plus faible que sa valeur au temps t est grande. Cette situation fait apparaître une instabilité de calcul, qui se traduit par des oscillations des valeurs de la température, qui vont en s'amplifiant. On montre que la stabilité pour un nœud interne impose  $M_k > 2q$ , q définissant le nombre de variables géométriques.

#### II .6. 4. 2. Conditions aux limites

Axe de symétrie

$$\frac{T_{i,j}^t - T_{i-1,j}^t}{\Delta x} = 0$$
(40)

Parois latérales :

> 
$$x = L2; 0 < y < H2$$

$$-\lambda_L \frac{T_{N2,j}^t - T_{N2-1,j}^t}{\Delta x} = h \big( T_{N2,j}^t - T_{air} \big)$$
(41)

$$-\lambda_{C} \frac{T_{N1,j}^{t} - T_{N1-1,j}^{t}}{\Delta x} = \frac{T_{N1,j}^{t} - T_{air}}{R_{th}}$$
(42)

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane

#### Parois horizontales :

> 
$$0 < x < L2$$
 et  $y = 0$   
 $-\lambda_L \frac{T_{i,1}^t - T_{i,2}^t}{\Delta x} = h(T_{i,1}^t - T_{air})$  (43)

$$\rightarrow$$
 0 < x < L1 et y = H2

$$-\lambda_{C} \frac{T_{i,M2}^{t} - T_{i,M2-1}^{t}}{\Delta x} = h \left( T_{i,M2}^{t} - T_{air} \right)$$
(44)

$$\blacktriangleright \qquad L1 < x < L2 \text{ et } y = H2$$

$$-\lambda_L \frac{T_{i,M2}^t - T_{i,M2-1}^t}{\Delta x} = h \left( T_{i,M2}^t - T_{air} \right)$$
(45)

$$\succ$$
 0 < x < L1 et y = H1

$$-\lambda_{C} \frac{T_{i,M1}^{t} - T_{i,M1+1}^{t}}{\Delta x} = \frac{T_{i,M1}^{t} - T_{air}}{R_{th}}$$
(46)

## II .6. 5. Algorithme de résolution

Rappelons qu'un schéma explicite aux différences finies nécessite un calcul itératif puisqu'il permet de déterminer les valeurs des grandeurs physiques à un instant donné en fonction de variables inconnues à ce même instant et de variables connues à l'instant précédent.

Les systèmes d'équations algébriques (37-46) obtenus sont résolus par l'algorithme de Gauss Seidel. Cet algorithme consiste à :

affecter à chaque point du domaine (D) une valeur initiale de la température, égale à la température imposée sur les points du contour où la condition limite impose une température ou arbitraire ailleurs mais la plus <<réaliste possible>>. Effectuer des itérations successives qui consistent à remplacer la valeur de la température en chaque nœud du maillage par la valeur calculée par l'équation aux différences finies qui lui est associée. Une itération consiste à effectuer un balayage complet de tous les nœuds, ligne après ligne et de gauche à droite. Les valeurs recalculées sont immédiatement prises en compte pour le calcul de la valeur de la température T aux points d'ordre supérieurs.

## II .6. 6. Critère de convergence

On arrête le calcul dès que la variation la plus grande de  $T_{i,j}$  au cours d'une itération reste inférieure à une valeur donnée.

On peut éventuellement accélérer la convergence en appliquant un coefficient de relaxation R, dont la valeur est comprise entre 1 et 2 (optimum proche de 1,7) au calcul de  $T_{i,j}$  de la manière suivante :  $T_{i,j} = (1 - R)T_{i,j}{}^t + RT_{i,j}{}^{t+\Delta t}$ .

#### II .6. 7. Organigramme de programmation



Figure 16 : Organigramme de programmation

#### II .6. 8. Procédure de calcul

La fonction essentielle du programme informatique que nous avons élaboré et écrit en FORTRAN 77 est de déterminer l'évolution spatio-temporelle de la température.

A l'instant initial  $t_0$ , la température est supposée uniforme dans tout le domaine. Le matériau est instantanément exposé à l'air libre, il est donc soumis à un flux de convection naturelle. La température est déterminée en chaque point du domaine de calcul en fonction de la vitesse de refroidissement.

La convergence de l'algorithme de Gauss-Seidel est supposée atteinte lorsque le test suivant est vérifié :

$$\frac{T_{i,j}^{t+\Delta t} - T_{i,j}^t}{T_{i,j}^{t+\Delta t}} < esp \text{ avec } esp = 10^{-4}$$

## II .6. 9. Validation

Afin de valider notre code de calcul, les résultats sont comparés à ceux obtenus à l'aide du logiciel Comsol 3.2.

Comsol 3.2 est un environnement utilisé pour décrire et résoudre des équations aux dérivées partielles (EDP) couplées, non linéaires. Il met en œuvre la méthode des éléments finis et fonctionne dans l'environnement MATLAB. Il inclut un environnement de CAO, un mailleur, la définition libre des équations ou de la physique, une gamme de solveurs adaptés, ainsi que des outils de post-traitement.

# **IV-RESULTATS ET DISCUSSION**

Cette partie, présente les résultats obtenus par les différentes simulations. Les évolutions de températures de vitesses de refroidissement pour différents cas de figure sont présentées.

# 1. Modèle unidimensionnel

La figure ci-dessous (figure 17) présente l'évolution de la température en fonction du temps à différentes positions. La distribution des courbes de températures et leurs valeurs montrent que le refroidissement est d'autant plus lent que l'on se trouve au cœur (x=0m) du matériau.

La diffusivité thermique caractérise l'aptitude d'un matériau à transmettre rapidement une variation de température. Dans le cas présent, le cofalit ayant une valeur de diffusivité très faible, de l'ordre de 4.10<sup>-7</sup>m<sup>2</sup>/s, le front de chaleur met beaucoup de temps à traverser toute l'épaisseur du matériau.

La différence entre les résultats comsol et fortran peut être attribué au fait que les deux modèles n'utilisent le même pas de temps pour la résolution.



Figure 17 : Evolution de la température en fonction du temps modèle 1D

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane Considérons maintenant la vitesse de variation de la température dans le matériau. Il s'agit ici d'un refroidissement ; les vitesses sont négatives, pour plus de lisibilité sur les courbes, les valeurs ont été prises en valeurs absolues.

A l'instant initial, les vitesses de refroidissement sont plus élevées à l'interface par rapport au cœur, mais au fil du temps, la vitesse à l'interface diminue tandis que celle au cœur du matériau augmente. L'interface se refroidit plus vite, ce qui entraîne une diminution du gradient de température d'où la baisse du flux de chaleur et donc de la vitesse de refroidissement.

L'allure de la courbe comsol est due à un problème résolution numérique. Pour résoudre ce problème, le calcul doit être fait avec un pas de temps très petit, ce qui n'est pas utile dans le présent cas.



Figure 18 : Evolution de la vitesse de refroidissement en fonction du temps modèle 1D

La figure suivante (figure 19) présente l'évolution de la température en fonction de la position à différents temps. Ce graphique montre également que le gradient de température est plus élevé à l'interface en x=1m.



Figure 19 : Evolution de la température en fonction de la position

La figure 20 présente l'évolution de la température en fonction de la position. A l'instant initiale, la vitesse de refroidissement est plus élevée à proximité de la paroi en effet, la lingotière en acier plus effusif que le cofalit, impose sa température à la paroi.

 $E_l = 192.35 \text{ KJ/K. m}^2 \text{ s}^{1/2} \text{ et } E_c = 21.56 \text{KJ/K. m}^2 \text{ s}^{1/2}$ 

On constate qu'au cours du temps, l'inertie thermique emporte l'effusivité et le maximum de vitesse se déplace vers l'intérieur, la température au cœur augmente et celle à l'interface diminue.



Figure 20 : Evolution de la vitesse en fonction de la position

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane

## • Influence des propriétés physiques

En tenant compte de la variation des propriétés physiques et thermodynamiques en fonction de la température, on constate une modification des résultats. La figure 21 compare les résultats à ceux obtenus avec le modèle à propriétés physiques constantes.



Figure 21 : Influence des propriétés physiques sur les résultats de la température

# Tableau comparatif des résultats du modèle propriétés physiques constantes et du modèle propriétés physiques variables

Position (m)	Température (K) Propriétés physiques constantes	Température (K) propriétés physiques variables	Ecart %
x=0	1632	1661	1.77%
x=0.25m	1606	1643	2.3%
x=0.50m	1496	1550	3.61%
x=0.75m	1245	1302	4.61%
x=1m	711	735	3.41%

Tableau 1 : Tableau comparatif des résultats du modèle propriétés physiques constantes et du modèle propriétés physiques variables

Le modèle à propriétés physiques constantes conduit à une légère sous estimation des températures par rapport au modèle à propriétés physiques variables.

#### • Influence des transferts radiatifs

Vu la variation du coefficient de transfert par rayonnement en fonction de la température, il semble nécessaire de considérer l'influence de la température sur le transfert par convection.

Les corrélations utilisées pour le calcul du coefficient de convection en fonction de la température sont décrites en annexe 4.

 $h_{alobal}$  est la somme des coefficients de transfert par convection et par rayonnement



Le coefficient global de transfert et le coefficient de convection sont donnés les expressions ci-après :

$$h_{global}(T) = 5,81. E^{-8}T^3 + 3,87. E^{-6}T^2 + 0,021T + 2,54$$
(47)

$$h_{convection}$$
 (T) = 3,11.  $E^{-9}T^3 - 1,22.E^{-5}T^2 + 0,016T + 1,15$  (48)



Figure 24 : Influence des transferts radiatifs sur les résultats de la température

On constate que l'intégration des transferts radiatifs dans le modèle, entraîne une modification sensible des résultats. La courbe ci-dessus (figure 24) compare les résultats obtenus.

Position (m)	sans transferts radiatifs	avec transferts radiatifs	Ecart %
x=0	1632	1653	1.30%
x=0.25m	1606	1626	1.29%
x=0.50m	1496	1500	0.24%
x=0.75m	1245	1183	4.97%
x=1m	711	495	30.35%

Tableau récapitulatif des valeurs moyennes des températures

Tableau 2 : Tableau comparatif des résultats sans transferts radiatifs aux résultats avec transfert radiatif

A l'interface, où a lieu le transfert par rayonnement, l'écart entre les résultats est très grand.

## 2. Modèle bidimensionnel

On présente ci-dessous l'évolution de la température en fonction du temps et à différentes positions pour le cas du transfert de chaleur en deux dimensions.

Comme pour le cas du transfert en une dimension, on constate que le refroidissement est plus rapide aux interfaces et avance vers le cœur du matériau.



Figure 25 : Modèle physique 2D

Figure 26 : Evolution de la température en 2D



Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane



Figure 27 : Evolution de la température en temps modèle 2D





Figure 28 : Evolution de la vitesse en fonction du temps modèle 2D

# 3. Changement de phase

Dans un premier temps, le but ici a été de déterminer le coefficient de convection limite applicable à cette plaque, pour former de la céramique. Cela a consisté à rechercher les points de la plaque, qui pour des températures inférieures à la température critique de cristallisation Tc, la vitesse de refroidissement reste inférieure ou égale à la vitesse critique de refroidissement Rc.

Après plusieurs simulations pour différentes valeurs de h, il a été constaté que le coefficient limite de cristallisation est  $h = 81 \text{ W/m}^2/\text{K}$ .

La cristallisation en point x donné, fait apparaître un pic de la vitesse de refroidissement due à l'élévation de la chaleur spécifique, qui est elle-même due à la chaleur latente libérée.



Figure 29 : Evolution de la température en fonction du temps, plaque d'épaisseur 2cm, h= $81W/m^2/K$ 



Figure 30 : Evolution de la vitesse en fonction du temps, plaque d'épaisseur 2cm, h=81W/m²/K  $\,$ 

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane Ensuite, il a été effectué différentes simulations avec des coefficients de transferts supérieurs à h limite de cristallisation.

Pour h compris entre 82 et 90W/m<sup>2</sup>/K, la structure n'est pas homogène, on obtient de la céramique à l'interface et du verre au cœur.

Lorsque le coefficient de transfert h est supérieure 100 W/m<sup>2</sup>/K, on obtient du verre sut toute la surface.



Figure 31 : Evolution de l'épaisseur de verre en fonction du temps

Les courbes ci-dessous présentent l'évolution de l'épaisseur de verre formé en fonction du coefficient de convection et du temps. Pour les faibles valeurs du coefficient de convection, le refroidissement est plus lent et donc il faut plus de temps pour atteindre le cœur du matériau.



Figure 32 : Evolution de l'épaisseur de verre en fonction du coefficient de convection et du temps

En intégrant les transferts radiatifs dans notre modèle, on remarque les pics de vitesse de refroidissement, n'apparaissent pas en tous les points. On pourrait conclure que le matériau formé a une structure hétérogène (céramique, verre) dans ce cas.



Figure 33 : Evolution de la température en fonction du temps, plaque d'épaisseur 2cm, h=h\_{conc}+h\_{r}

Le coefficient de convection varie très faiblement autour de +ou – 7% autour de  $9W/m^2/K\,.$ 

On constate, à l'instant départ que le coefficient de transfert dépend uniquement du rayonnement; l'influence du coefficient de convection intervient avec le temps.







Figure 35 : Evolution de la vitesse de refroidissement en fonction du temps, plaque d'épaisseur 2cm,  $h{=}h_{conc}{+}h_{r}$ 

Des simulations, avec différentes épaisseurs de plaques où nous avons pris en compte les transferts radiatifs, ainsi que la variation des propriétés physiques avec la température.

## 1. Résultats pour une plaque d'épaisseur 4cm

## > Profil de la température



Figure 36 : Evolution de la température en fonction du temps, plaque d'épaisseur 4cm

## Vitesses de refroidissement



Figure 37 : Evolution de la vitesse de refroidissement en fonction du temps, plaque d'épaisseur 4cm

uu temps, plaque u epaisseul 4el

# > Coefficients de transferts thermiques



Figure 38 : Evolution des coefficients de transfert en fonction de la température et du temps, , plaque d'épaisseur 4cm

## 2. Résultats pour une plaque d'épaisseur 20cm



# Profil de la température





#### Vitesses de refroidissement

Mémoire pour l'obtention du Master en Ingénierie de l'Eau et de l'environnement. Option : Energie et Génies des Procédés KERE Amelie Christiane



Figure 40 : Evolution de la vitesse de refroidissement en fonction

du temps, plaque d'épaisseur 20cm



## > Coefficients de transferts thermiques

Figure 41 : Evolution des coefficients de transfert en fonction de la température et du temps , plaque d'épaisseur 20cm

# 3. Résultats pour une plaque d'épaisseur 50cm



# Profil de la température









#### > Coefficients de transferts thermiques



Figure 44: Evolution des coefficients de transfert en fonction de la température et du temps, plaque d'épaisseur 50cm

# 4. Résultats pour une plaque d'épaisseur 1m



# Profil de la température





## Vitesses de refroidissement

Figure 46 : Evolution de la vitesse de refroidissement en fonction du temps, plaque d'épaisseur 1m

#### > Coefficients de transferts thermiques



Figure 47 : Evolution des coefficients de transfert en fonction de la température et du temps, plaque d'épaisseur 1m

## 5. Résultats pour une plaque d'épaisseur 1.5m



## > Profil de la température





#### Vitesses de refroidissement





#### > Coefficients de transferts thermiques

Figure 50 : Evolution des coefficients de transfert en fonction de la température et du temps, plaque d'épaisseur 1.5m

Les courbes vitesses de refroidissement sont révélatrices de problème de résolution numérique; on constate des oscillations à l'apparition des pics de cristallisation.

Pour résoudre ce problème la résolution peut être faite avec des pas de temps et d'espace plus faibles, mais l'augmentation des pas à une conséquence sur le temps de calcul qui devient plus long.

De plus, la méthode utilisée pour l'intégration de la cristallisation est approximative, le changement d'état se fait dans un intervalle de température autour de la température de cristallisation.

On constate que, pour une faible épaisseur, le gradient de température entre le cœur et l'interface est faible.

Lorsque le matériau cristallise, on observe des isothermes de coutes durées, correspondant au palier de solidification et on voit apparaître des pics de la vitesse de refroidissement.

Ces pics interviennent à l'instant où la température devient inférieure à la température critique de refroidissement. Cependant la quantité de chaleur libérée, entraine l'augmentation de la chaleur spécifique, et donc l'augmentation de la vitesse de refroidissement.

# **V-CONCLUSION ET PERSPECTIVES**

Cette étude a consisté à modéliser et simuler le refroidissement du cofalit. Les transferts sont régis par les équations classiques de la chaleur en une et deux dimensions. Le modèle tient compte des propriétés physiques et thermodynamique du cofalit et de l'air en fonction de la température.

Les équations et les conditions aux limites qui leurs sont associées sont résolues, par une méthode explicite aux différences finies et l'algorithme de Gauss Seidel.

Après avoir validé les codes numériques que nous avons élaborés par comparaison des résultats avec ceux obtenus par le logiciel comsol 3.2, des simulations sont effectués pour différentes épaisseurs de plaques afin d'analyser les profils des températures. Il a été constaté que le refroidissement est plus lent au cœur du matériau.

L'intégration des conditions de changement de phase dans le modèle unidimensionnel a montré que la structure de matériau obtenu dépend de son épaisseur et du coefficient de convection.

De cette étude numérique, les points suivants peuvent être retenus :

- L'introduction des propriétés physiques variables avec la température aboutit à des résultats légèrement différents de ceux obtenus avec les propriétés physiques constantes;
- Le transfert par rayonnement a une influence sensible sur la vitesse de refroidissement du matériau ;
- La durée du palier de solidification en un point donné s'effectue sur une courte durée (dizaines de secondes) ;
- Le changement d'état entraîne un pic de la vitesse de refroidissement ;
- La cristallisation dépend de l'épaisseur de la plaque, pour très faibles épaisseurs, le matériau cristallise uniquement en surface, contrairement aux grandes épaisseurs où la cristallise à lieu seulement en profondeur; l'interface ne cristallise pas. Pour des épaisseurs moyennes, l'ensemble du matériau se refroidit en se solidifiant;
- Le coefficient de convection à une influence directe sur la structure obtenue après refroidissement, pour des valeurs faibles, le matériau cristallise.

On constate que les valeurs des pics de la vitesse de refroidissement varient d'un point à un autre et aussi en fonction de l'épaisseur du matériau. De plus, on remarque sur les plaques de cofalit refroidit à l'issu du procédé de vitrification que la densité de cristallisation diffère d'une zone à une autre. La variation des valeurs des pics de vitesse, pourrait avoir une influence sur la densité du matériau obtenu.

# VII-BIBLIOGRAPHIE

[1] SOLARPACES site internet : www.solarpaces.org

[2] ECOSTAR. European Concentrated Solar thermal Road-Mapping. (2004) SES6-CT-2003-502578

[3] Gomez E.,Amutha rani D.,Cheeseman C.R.,Deegan D.,Wise M.,Boccani A.R. (2009) Thermal plasma technology for the treatment of wastes: a critical review. J. Hazard. Mater. 161,614-626

[4] Gualtieri A.F., Tartaglia A. (2000) Thermal decomposition of asbestos and recycling in traditional ceramics. Journal of the European Ceramic Society 20,1409-1418.

[5]Leitner A. (2002) Fuel from sky. Solar Power's potential for western energy supply.report NREL/BK-550-32160 (available at www.osti.gov/bridge).

[6]Herrmann U.,Kelly B.,Price H. (2004) Two-Tank molten salt storage for parabolic trough solar power plants; Energy, 29,883-893.

[7]Fioru cci L.C., Goldstein S.L. (1982) Manufacture, distribution and handling of nitrate salts for solar thermal applications. Olin Corporation report SAND8168186 UC-62d.

[8]Lechon Y,De la Rua C.,saez R. (2006) Life cycle environmental impacts of electricity production by solarthermal technology in spain. SolarPaces 2006 Proceeding B5-S5.

[9] Laing D ., Steinmann W.D., Tamme R., Rishter C. (2006) Solid media thermal storage for parabolic trough power plants; Solar Energy, 80, 1283-1289.

[10] Pincemin S., Olives R., Py X., Christ M., Oettinger o. Elaboration of conductive thermal storage composites made of phase change materials and graphite for solar plant. Journal of Solar Energy Engineering 2008, 130, 1-5.

[11] Pincemin S., Olives R., Py X., Christ M. Highly conductive composites made of phase change materials and graphite for thermal storage. Solar Energy Materials & Solar cells. 2008, 92, 603-613.

[12] Pacheo J. E. (2002) Final test and evaluation results from the solar Two project. Sandia National Laboratories report SAND2002-0120.

[13] Kolb G.J. (1998) Economic evaluation of solar-only and hybrid power towers using molten-salt technology. Solar Energy, 62,51-61.

[14] Fricker H.W. (2004) regenerative thermal storage in atmospheric air system soalr plants. Energy, 29,871-881.

[15] H.S. Carslaw and J.C. Jaeger, « I.C. Conduction in solids »,Oxford University Press London (1959)

[16] J. Stefan, Sitz Akad Wiss ien, 98, p.965 (1890)

[17] Pincemin S, Elaborations et caractérisations de matériaux composites à hautes performances énergétiques pour l'intégration d'un stockage thermique dans les centrales électrosolaires.

[18] Jean-François SACADURA., Initiation aux transferts thermiques

[19] Cheng K. C. and Seki N., editors. Freezing and Melting heat Transfer in Engineering. Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1991.

# **VIII-ANNEXES**

ANNEXE 1 : Propriétés thermophysiques du cofalit

ANNEXE 2 : Calcul de la température de contact

ANNEXE 3 : Les propriétés thermophysiques de l'air

ANNEXE 4 : Corrélation pour le calcul des coefficients de transferts en convection naturelle

# ANNEXE 1 :

Température /°C	Diffusivité thermique /mm²/s	Capacité calorifique /J/(g.K)	Conductivité thermique /W/(m.K)
27	0.836	0.800	2.075
100	0.718	0.853	1.901
200	0.618	0.923	1.769
301	0.557	0.968	1.673
402	0.512	0.997	1.583
502	0.480	1.018	1.516
601	0.465	1.027	1.482
701	0.454	1.028	1.449
801	0.462	1.022	1.465
900	0.455	1.034	1.460

# Propriétés physiques et thermodynamiques du cofalit

Tableau 3 : Propriétés physiques et thermodynamiques du cofalit

## ANNEXE 2

## Calcul de la température de contact entre la lingotière et la paroi

La température de contact des deux matériaux et s'obtient à partir de leurs effusivités par l'expression suivante :

$$T_{contact} = \frac{T_c E_c + T_l E_l}{E_c + E_l}$$

Où  $E_c$  et  $E_l$  sont les effusivités du cofalit et de la lingotière respectivement.

L'effusivité se définit comme l'aptitude de la surface d'un matériau à stocker ou restituer de la chaleur. Elle croît avec la conductivité thermique et la capacité thermique. Cependant, pour deux corps en contact, la température de contact est imposée par le corps qui a la plus grande valeur d'effusivité. Elle est donnée par la formule suivante :

$$E = \sqrt{\lambda \rho C_p}$$

A.N :  
$$E_c = 21.56 \text{ KJ/K. m}^2 \cdot \text{s}^{1/2}$$

$$E_l = 192.35 \text{ KJ/K. m}^2 \text{ s}^{1/2}$$

L'effusivité ne dépend que des propriétés thermiques des deux matériaux, et donc la température de contact aussi.

Pour notre cas, la température de contact est imposée par le cofalit qui a la plus grande valeur d'effusivité.

# ANNEXE 3

Propriétés de l'air à 1atm						
θ	ρ	Ср	λ	10 <sup>-5</sup> .μ	10 <sup>5</sup> α	Pr
(°C)	(Kg/m <sup>3</sup> )	(J/Kg.°C)	(W/m².ºC)	(Pa.s)	(m <sup>2</sup> /s)	
0	1.292	1006	0.0242	1.72	1.86	0.72
20	1.204	1006	0.0257	1.81	2.12	0.71
40	1.127	1007	0.0272	1.90	2.40	0.70
60	1.059	1008	0.0287	1.99	2.69	0.70
80	0.999	1010	0.0302	2.09	3.00	0.70
100	0.946	1012	0.0318	2.18	3.32	0.69
120	0.898	1014	0.0333	2.27	3.66	0.69
140	0.854	1016	0.0345	2.34	3.98	0.69
160	0.815	1019	0.0359	2.42	4.32	0.69
180	0.779	1022	0.0372	2.50	4.67	0.69
200	0.746	1025	0.0386	2.57	5.05	0.68
220	0.700	1028	0.0399	2.64	5.43	0.68
240	0.688	1032	0.0412	2.72	5.80	0.68
260	0.662	1036	0.0425	2.79	6.20	0.68
280	0.638	1040	0.0437	2.86	6.59	0.68
300	0.616	1045	0.0450	2.93	6.99	0.68

# Propriétés physiques et thermodynamiques de l'air

Tableau 4 : Propriétés physiques et thermodynamiques de l'air

## ANNEXE 4

# Corrélation pour le calcul des coefficients de transferts en convection naturelle

Corrélations valables pour tous fluides : Nu = C (Gr Pr) "				
Géométrie	Gr Pr	С	m	
Plaques et cylindres verticaux	10 <sup>4</sup> - 10 <sup>9</sup> 10 <sup>9</sup> - 10 <sup>13</sup>	0,59 0,021	1/4 2/5	
Cylindres horizontaux	10 <sup>-10</sup> - 10 <sup>-2</sup> 10 <sup>2</sup> - 10 <sup>2</sup> 10 <sup>2</sup> - 10 <sup>4</sup> 10 <sup>4</sup> - 10 <sup>7</sup> 10 <sup>7</sup> - 10 <sup>12</sup>	0,675 1,02 0,850 0,480 0,125	0,058 0,148 0,188 0,25 0,33	
Face supérieure d'une plaque chaude ou face inférieure d'une plaque froide	2.10 <sup>4</sup> - 8.10 <sup>6</sup> 8.10 <sup>6</sup> - 10 <sup>11</sup>	0,54 0,15	0,25 0,33	
Face inférieure d'une plaque chaude ou face supérieure d'une plaque froide	10 <sup>5</sup> - 10 <sup>11</sup>	0,27	0,25	
Cellule fermée rectangulaire inclinée $L$ $T_1$ $Convection$ naturelle $T_2$ $T_1 < T_2$	$Nu = 1 + 1.44 \left( 1 - \frac{1708}{Gr \operatorname{Pr} \cos \varphi} \right) \left[ 1 - \frac{1708 \left( \sin(1.8 \varphi)^{1.6} \right)}{Gr \operatorname{Pr} \cos \varphi} \right] + \left[ \left( \frac{Gr \operatorname{Pr} \cos \varphi}{5830} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right] \qquad \text{si} \qquad 0 < \varphi < \varphi^{+} \\ Nu = (\sin \varphi)^{\frac{1}{3}} \operatorname{Nu}(90^{\circ}) \qquad \text{si} \qquad \varphi^{+} < \varphi < 90^{\circ} \\ Nu = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ Nu = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ Nu = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < \varphi < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < 180^{\circ} \\ \operatorname{Nu} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad \text{si} \qquad 90^{\circ} < 180^{\circ} \\ \operatorname{rin} = 1 + \left[ \operatorname{Nu}(90^{\circ}) - 1 \right] \operatorname{rin} \varphi \qquad 10^{\circ} $			
	Avec φ*:	= tan <sup>-1</sup> (4800 Pr)		
Relations simplifiées po	ur de l'air à pression atr	nosphérique		
Géométrie	Laminaire Turbulent 10 <sup>4</sup> < Gr Pr > 10 <sup>9</sup> Gr Pr > 10 <sup>9</sup>			
Plaque ou cylindre vertical	$h = 1.42 \left(\frac{\Delta \theta}{L}\right)^{1/4}$ $h = 1.31 (\Delta \theta)^{1/3}$			
Cylindre horizontal	$h = 1.32 \left(\frac{\Delta \theta}{D}\right)^{1/4} \qquad h = 1.24 (\Delta \theta)^{1/3}$		24 (Δθ) <sup>μ3</sup>	
Face superieure d'une plaque horizontale chaude ou face inférieure d'une plaque froide	$\mathbf{h} = 1.32 \left(\frac{\Delta \theta}{L}\right)^{1/4} \qquad \qquad \mathbf{h} = 1.52 \ (\Delta \theta)^{1/3}$			
Face inférieure d'une plaque chaude ou face supérieure d'une plaque froide	$h = 0.59 \left(\frac{\Delta \theta}{L}\right)^{1/4}$	h = 0,5	$9\left(\frac{\Delta\theta}{L}\right)^{1/4}$	

Tableau 5 : Corrélation pour le calcul des coefficients de transferts en convection naturelle

# RESUME

La lutte contre le changement climatique, conjuguée aux récentes augmentations du prix des hydrocarbures, a relancé les efforts de recherche pour produire l'électricité en minimisant les émissions de CO2. Dans ce contexte, les centrales électrosolaires, développées depuis les années 80 retrouvent un fort regain d'intérêt. Un des verrous majeurs pour le déploiement de ces technologies solaires est la nature intermittente de la ressource solaire.

Le cofalit, matériau issu de la vitrification des déchets amiantés a été identifié par le programme solstock, il présente qualités thermophysiques nécessaire au stockage thermique et pourrait remplacer les technologies de stockage existantes car, présentant des contraintes environnementales, et économiques.

L'un des axes de recherches sur ce matériau est son hétérogénéité structurale.

L'objet de cette étude a été de modéliser le refroidissement et la cristallisation, du cofalit.

Le modèle est basé sur l'équation de transfert de la chaleur couplée à celle du transfert radiatif. Les équations sont discrétisées par une méthode explicite aux différences finies. Les systèmes d'équations ainsi obtenus sont résolus par l'algorithme de Gauss Seidel.

Après avoir validé le modèle, les résultats de la simulation montrent une hétérogénéité de la structure du matériau pour des plaques de très faibles et grandes épaisseurs, tandis que pour des épaisseurs moyennes comprises entre 4 et 50cm, le matériau cristallise au cours du refroidissement. Ce phénomène se traduit par un pic instantané de la vitesse de refroidissement.

On montre que, plus le coefficient de transfert est élevé, plus l'épaisseur de matériau solidifié est faible.

# Mots clés :

Modélisation - Changement de phase - différences finies - Gauss-Seidel

# SUMMARY

Global warming, conjugated to recent increases of the price of hydrocarbons, relaunched efforts of search to produce the electricity by minimizing CO2 emissions. In this context solar electric power plants, developed since the 80s find a strong renewed interest. One major bolt for the deployment of these technologies is solar intermittencies.

Cofalit, vitrified stone like materials form asbestos containing wastes was identified by the Solstock program; This material present thermophysics properties which are necessary for thermal storage and could replace the existing technologies because, presenting environmental and economic requirements.

One of the areas of search on this material is its structural heterogeneousness.

In this, object is modelling cofalit cooling and the crystallization. The model is based on heat transfer equations coupled with radiative transfer. Equations are transformed with finite difference method and resolved by Gauss-Seidel algorithm.

Having validated the model, simulation results show that material structure heterogeneousness for patches of weak and wide thicknesses. Average thicknesses included between 4 and 50cm, the material crystallizes during the cooling. Crystallization is translated by an immediate peak of cooling speed.

# Keywords :

Modeling - Phase Change - finite difference - Gauss-Seidel