

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE FERHAT ABBAS SETIF1

THESE

présentée à l'Institut d'Optique et de Mécanique de Précision
pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCES

en Optique et Mécanique de Précision
par

Mohamed CHARIFI

Le 21 /07/ 2019

Titre :

*Etude des problèmes de conduction thermique avec changement de
phase solide/liquide*

Jury

Président	Professeur Messaoud Guellal	Université Ferhat Abbas Sétif1
Rapporteur	Professeur Ferhat Djeddou.	Université Ferhat Abbas Sétif1
Examineur	Professeur SI ameur Mohamed	Université de Batna
Examineur	Professeur Benmoussa Hocine	Université de Batna
Invité	Professeur Rabah Zegadi	Université Ferhat Abbas Sétif1

DEDICACES

A

Mes parents,

Ma femme,

Tous mes enfants,

Tous mes amis,

Tous ceux qui m'ont aidé et encouragé

REMECIMENTS

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur **FERHAT. DJEDDOU** professeur à l'institut d'optique et de mécanique de précision université Sétif-1 pour son ses conseils, et son aide dans ce travail.

Mes remerciements s'adressent à **M. GUELLAL**, professeur et chercheur à l'université de Sétif1, d'avoir accepté la présidence du jury.

Je suis très sensible à l'honneur que me fait monsieur **SI AMEUR MOHAMED**, professeur à l'université de Batna en acceptant de participer à ce jury.

J'ai vivement apprécié la considération que m'a témoigné Monsieur, **BENMOUSA HOCINE** professeur à l'université de Batna en acceptant de faire partie de ce jury.

Je remercie particulièrement et j'exprime ma profonde gratitude envers Monsieur **R. ZEGADI** Professeur à l'institut d'optique et de mécanique de précision université Sétif-1 pour son aide précieuse, conseils et encouragements au cours de ma préparation de cette thèse

SOMMAIRE

SOMMAIRE	i
LISTES DES FIGURES	vi
LISTES DES TABLEAUX	ix
NOMENCLATURE.....	x
INTRODUCTION	1
CHAPITRE I : GENERALITE	3
I.1 Objet de l'étude	3
I.1.1 Problème de Stefan.....	6
I.1.2 Problème de Stefan a deux phases.....	6
I.1.3 Problème de Stefan à une phase	7
I.2 Détermination expérimentale de la position de l'interface	8
I.3 Modélisation directe du problème de changement de phase.....	9
I.3.1 Méthodes analytiques.....	9
I.3.2 Méthodes numériques.....	9
I.4 Discrétisation et maillage	10
I.4.1 Méthode à maillage mobile	10
I.4.2 Méthode à maillage fixe	10
I.4.3 Discrétisation :.....	11
I.5 Problèmes inverses.....	13
I.5.1 Problèmes inverses appliques à l'équation de la chaleur.....	13
I.5.2 Méthodes non-itératives	15
I.5.3 Méthodes itératives	15
I.6 Méthodologie de résolution d'un problème inverse	16
I.6.1 Difficultés dans la solution inverse	17
I.6.2 Régularisation au sens de Tikhonov.....	18
I.6.3 Construction de l'opérateur inverse régularisé	19
I.7 Problèmes concernant cette étude	20
I.7.1 Contrôle de l'évolution du front de solidification.....	21
I.7.2 Modélisation de la solidification par la méthode enthalpique.....	22
I.7.3 Etude de la convection naturelle	23

CHAPITRE II	CONTRÔLE DE L'ÉVOLUTION DU FRONT DE SOLIDIFICATION	25
II.1	Introduction	25
II.2	Description du système physique	26
II.3	Formulation du problème direct	27
II.3.1	Equations définissant le problème direct dans la phase solide	27
II.3.2	Equations définissant le problème direct dans la phase liquide	27
II.3.3	Condition de Stefan à l'interface solide/liquide	28
II.4	Problème inverse	29
II.4.1	Formulation du problème inverse	29
II.4.2	Méthode de résolution	30
II.5	Calcul de variations	31
II.5.1	Définition de la dérivée directionnelle	31
II.5.2	Définition du gradient d'une fonctionnelle	31
II.5.3	Les équations de variations	32
II.5.4	Problème de variation	33
II.5.5	Variation du critère	33
II.6	Gradient du critère et problème adjoint	34
II.6.1	Construction du gradient du critère	34
II.6.2	Problème adjoint	37
II.6.3	Minimisation du critère par la méthode du gradient conjugué	38
II.6.4	Étapes de l'algorithme	39
II.7	Discrétisation et résolution numérique	39
II.7.1	Transformation de la variable d'espace par la méthode de Landau	40
II.7.2	Résolution numérique du problème direct	42
II.7.3	Résolution numérique du problème de variation	43
II.7.4	Résolution numérique de l'équation adjointe	44
II.7.5	L'algorithme de Thomas	45
II.8	Résultats	46
II.8.1	Précision du modèle numérique direct	46
II.9	Validation du problème de contrôle	47
II.9.1	Cas des données exactes non bruitées	47
II.9.2	Cas de données exactes bruitées	51
II.9.3	Cas de données filtrées	54
II.9.4	Cas du problème régularisé	57
II.10	Conclusion	62
CHAPITRE III	MODELISATION DE LA SOLIDIFICATION PAR LA METHODE ENTHALPIQUE	64

III.1	Introduction	64
III.2	Description du problème	65
III.3	Formulation mathématique du problème	65
III.3.1	Définition de l'enthalpie	65
III.3.2	Hypothèses.....	66
III.3.3	Modèle mathématique	67
III.4	Solution analytique	68
III.4.1	Solution analytique de Newman.....	68
III.4.2	Résultats de la solution analytique de Newman	71
III.5	Résolution numérique	74
III.5.1	Discrétisation et Résolution numérique	74
III.5.2	Résultats numériques et validation	76
III.6	Conclusion.....	79
CHAPITRE IV : ETUDE DE LA CONVECTION NATURELLE.....		80
IV.1	Introduction	80
IV.2	Modèle physique.....	81
IV.2.1	Convection dans les enceintes :.....	81
IV.2.2	Description du problème physique.....	82
IV.3	Formulation mathématique du problème	83
IV.3.1	Equation de continuité.....	84
IV.3.2	Equation de quantité de mouvement.....	84
IV.3.3	Equation d'énergie	84
IV.3.4	Hypothèses simplificatrices :.....	85
IV.4	Equations simplifiées.....	85
IV.4.1	Equations de conservations simplifiées.....	85
IV.4.2	Conditions aux limites	86
IV.5	Equations adimensionnelles	87
IV.5.1	Nombres adimensionnels	88
IV.5.2	Conditions aux limites adimensionnelles.....	89
IV.6	Discrétisation des équations différentielles.....	90
IV.6.1	Maillage et volume de contrôle	91
IV.6.2	Discrétisation des équations de conservation	91
IV.7	Difficultés du champ dynamique.....	94
IV.7.1	Algorithme SIMPLE :.....	95
IV.7.2	Equation de correction de pression	97

IV.8	Résolution des équations.....	99
IV.8.1	La sous relaxation.....	99
IV.8.2	Critère de convergence	100
IV.9	Validation numérique.....	101
IV.9.1	Champ Thermique.....	104
IV.9.2	Champs Dynamique	107
IV.9.3	Champs de vitesses :	110
IV.9.4	Nombre de Nusselt	114
IV.9.5	Profils de vitesse, température.....	116
IV.10	Conclusion.....	121
	CONCLUSION GENERALE	122
	BIBLIOGRAPHIE	124

LISTES DES FIGURES

Figure (I-1) Classification du changement de phase de solidification.....	5
Figure (I-2): Représentation de l'enthalpie massique H et de la chaleur spécifique C.....	8
Figure (I-3) Schéma d'un problème inverse de contrôle	14
Figure (I-4) Schéma d'un problème inverse d'identification dans	15
Figure (II-1) Schéma du processus de solidification d'un matériau pur en géométrie 1D sphérique	26
Figure (II-2) Contrôle exact et calculé (données exactes).....	48
Figure (II-3) Contrôle exact et calculé (données exactes)	49
Figure (II-4) flux exact et calculé (données exactes)	49
Figure (II-5) erreur relative sur le contrôle exact et calculé (données exactes)	50
Figure (II-6) erreur relative sur le flux à la frontière fixe (données exactes) .	50
Figure (II-7) Valeur du critère (données exacte)	51
Figure (II-8) Contrôle exact et calculé.....	52
Figure (II-9) flux exact et calculé	53
Figure (II-10) erreur relative sur le contrôle	53
Figure II-11 erreur relative sur le flux à la frontière fixe	54
Figure (II-12) Contrôle exact et calculé (données filtrées)	55
Figure (II-13) flux exact et calculé (données filtrées)	56
Figure (II-14) erreur relative sur le contrôle	56
Figure (II-15) erreur relative sur le flux à la frontière fixe	57
Figure (II-16) Contrôle exact et calculé	59
Figure (II-17) flux à la frontière fixe.....	60
Figure (II-18) erreur relative sur le contrôle	60
Figure (II-19) erreur relative sur le flux à la frontière fixe	61
Figure (II-20) Erreur relative sur le contrôle.....	61
Figure (II-21) erreur relative sur le flux à la frontière fixe	62
Figure (III-1) Solidification d'une substance pure dans	65
Figure (III-2) propriétés thermophysique de l'eau à l'état solide et liquide.....	71

Figure (III-3) Distribution de températures dans le temps.....	72
Figure (III-4) Profils de températures au cours du temps	72
Figure (III-5) profils de température pour différentes positions	73
Figure (III-6) Position du front (Solution exactes)	73
Figure (III-7) Vitesse du front de solidification.....	74
Figure (III-8) Maillage spatio-temporelle	75
Figure (III-9) profils de températures (exacte et calculée).....	77
Figure (III-10) Position du front (exacte et calculée).....	77
Figure (III-11) Erreur relative sur la température	78
Figure (III-12) Erreur relative sur la position du front.....	78
Figure (IV-1) configuration Rayleigh-Bénard	81
Figure (IV-2) enceinte avec gradient de température horizontal	82
Figure (IV-3) Schéma du modèle physique	83
Figure (IV-4) Volume de contrôle	91
Figure (IV-5),(a) volume de contrôle, (b) maillage décalé pour u, (c) maillage décalé pour v.	95
Figure (IV-6) Etapes de l'algorithme SIMPLE.....	98
Figure (IV-7) Comparaison des isothermes ($Ra=10^3-10^7$).....	105
Figure (IV-8) Comparaison des isothermes ($Ra=10^3-10^7$).....	106
Figure (IV-9) Comparaison des isothermes ($Ra=10^3-10^7$).....	107
Figure (IV-10) lignes de courant pour $Ra=10^3-10^7$ (Résultats obtenus au moyen du code)	108
Figure (IV-11) lignes de courant pour $Ra=10^3-10^7$ (Résultats de la référence [71].....	109
Figure (IV-12) lignes de courant pour $Ra=10^3-10^6$ (Résultats de la référence [90] ..	110
Figure (IV-13) Vitesse horizontale ($Ra=10^3-10^7$) Résultats obtenus au moyen du code	111
Figure (IV-14) Vitesse horizontale ($Ra=10^3-10^6$) Résultats de la référence [71]	112
Figure (IV-15) Vitesse verticale ($Ra=10^3-10^7$) (Résultats obtenus au moyen du code)	113
Figure (IV-16) Vitesse verticale ($Ra=10^3-10^6$)(Résultats de la référence [71].....	114
Figure (IV-17) Evolution du nombre de Nusselt au niveau de la paroi chaude ($Ra=10^3-$ 10^7) (Résultats obtenus au moyen du code	115
Figure (IV-18) comparaison du nombre de Nusselt au niveau de la paroi chaude.....	116
Figure (IV-19) Profils de vitesses horizontales sur le plan médian vertical ($x=0.5$) ($Ra=10^3-10^7$) Résultats obtenus au moyen du code	117

Figure (IV-20) Profils de vitesses horizontales sur le plan médian vertical ($x=0.5$)
 ($Ra=10^6-10^7$) Résultats de la référence [92] 117

Figure (IV-21) Profils de vitesses verticales sur le plan médian horizontal ($y=0.5$)
 (Résultats obtenus au moyen du code)..... 118

Figure (IV-22) Comparaison des profils de vitesses verticales sur le plan médian
 horizontal ($y=0.5$) (Résultats de la référence [92]) 118

Figure (IV-23) Profils de température sur le plan médian horizontal ($y=0.5$)..... 119

Figure (IV-24) Comparaison des profils de vitesses horizontales sur le plan médian
 vertical ($x=0.5$)..... 120

Figure (IV-25) Comparaison des profils de vitesses verticales sur le plan médian
 horizontal ($y=0.5$)..... 120

Figure (IV-26) Profils de température sur le plan médian horizontal ($y=0.5$)..... 121

LISTES DES TABLEAUX

Tableau II-1 Erreur relative sur le flux au front.....	46
Tableau II-2 Valeur du critère J aux itérations n (données exactes).....	47
Tableau (II-3) valeurs du critère J aux itérations n. (données exactes bruitées)	52
Tableau (II-4) valeurs du critère J aux itérations n. (données filtrées).....	55
Tableau II-5) valeurs du critère J aux itérations n. (Problème régularisé)	59
Tableau (IV-1) Coefficients de diffusion et termes de sources.....	90
Chapitre 1 Tableau (IV-2) Comparaison des vitesses verticales et horizontales maximales.	102
Tableau (IV-3) Comparaison des magnitudes centrales et maximum de la fonction de courant.....	103
Tableau (IV-4) comparaison des valeurs moyennes, maximales et minimales	104

NOMENCLATURE

Nomenclature du chapitre II et III			
b	Bruit aléatoire	α	Diffusivité thermique, [m ² /s]
C_p	Chaleur spécifique	δ	Différentielle, variation
d	Direction de déplacement	ε	Nombre réel
E	Ecart de flux	ϕ	flux thermique
F	Espace des données	η	Paramètre de régularisation
g	Accélération de la pesanteur	λ	Conductivité thermique, W/mK
H	Enthalpie	ρ	Densité, kg/m ³
J	Critère	γ	Variable aléatoire
L	Latent heat, J/kg	ω	fonction stabilisatrice
P	Variable adjointe	INDICES	
R	Opérateur direct	0	initial
R^{-1}	Opérateur inverse	f	final
S	Position du front	i	Indice spatial
Ste	Nombre de Stefan	k	Indice du pas de temps
T	Température °K	l	liquide
t	temps	s	solide
U	Contrôle (condition de température à la frontière)	n	Nombre d'itération
V	Ensemble des solutions admissible	ξ	Coordonnée spatiale dans le domaine transformé
W	Fonction de pondération	*	Optimal
x	Coordonnée d'espace	Δt	Pas de temps

Nomenclature du chapitre IV			
L_x L_y	Dimensions de la cavité [m]	: y	Coordonnée verticale adimensionnelle
Nu	Nombre de Nusselt moyen		
P	Pression [N/m ²]		
P'	Correction de pression		
Pr	Nombre de Prandtl	α	Diffusivité thermique, [m ² /s]
Ra	Nombre de Rayleigh	α_p	Coefficient de sous relaxation
S_φ	Terme source	β	Coefficient d'expansion thermique [K ⁻¹]
S_c	Partie constante du terme source linéarisé	μ	Viscosité dynamique [kg m ⁻¹ s ⁻¹]
S_p	Coefficient de φ_p du terme source linéarisé	ϑ	Viscosité cinématique [m ² s ⁻¹]
u	: Composante adimensionnelle horizontale du vecteur vitesse	ΔT	Différence de température
u'	Correction de la vitesse u	φ	Fonction généralisée
v	Composante adimensionnelle verticale du vecteur vitesse	θ	Température adimensionnelle
v'	Correction de la vitesse v	Γ	Coefficient de diffusion
Pe	Nombre de Peclet	δx	Distance dans la direction x entre deux nœuds consécutifs
t	Temps [s]	δy	Distance dans la direction y entre deux nœuds consécutifs
T	Température	Δx	Longueur dans la direction x du volume de contrôle
x	Coordonnée horizontale adimensionnelle	Δy	Longueur dans la direction y du volume de contrôle

Indices	
c	Paroi froide
h	Paroi chaude
i,, j	ième et jème composantes
P	Nœud principal ou central du volume de contrôle considéré
e	Face Est du volume de contrôle considéré
w	Face Ouest du volume de contrôle considéré
n	Face Nord du volume de contrôle considéré
s	Face Sud du volume de contrôle considéré
E	Nœud considéré du côté Est du nœud principal P
W	Nœud considéré du côté Ouest du nœud principal P
N	Nœud considéré du côté Nord du nœud principal P
S	Nœud considéré du côté Sud du nœud principal P
Min	Minimum des valeurs
Max :	Maximum des valeurs
*	Valeur estimée
‘	Valeur corrigée
[a, b]	Maximum entre les deux valeurs de a et b

INTRODUCTION

Les phénomènes de changement de phase solide-liquide sont fréquemment présents dans des processus naturels (les icebergs ou l'éruption de magma) et dans un grand nombre d'applications industrielles tels que le traitement de matériaux, la croissance de cristaux, le stockage de l'énergie, la production et stockage de la glace, la conservation des aliments, gel. L'étude des transferts de chaleur et de masse au cours de la fusion ou de la solidification est indispensable. En effet la cinétique du changement d'état et plus précisément, la géométrie de l'interface de transition de phase et son évolution temporelle conditionnent la structure et les propriétés du matériau final. Une solidification dirigée réduit le coût énergétique et améliore certaines applications la qualité du produit fini. Une solidification mal conduite peut engendrer la formation de vide, des hétérogénéités, des déformations et des fissurations. La détermination par des mesures directes de cette interface de transition de phase (frontière mobile) est en général très difficile à réaliser. Il faut modéliser le processus de changement de phase à partir des données disponibles.

L'objet de cette étude consiste à résoudre un problème de solidification d'un matériau pur. Dans le premier chapitre, on décrit l'importance et l'implication du phénomène de changement dans la vie quotidienne. On présente par la suite une étude bibliographique sur les différentes approches de modélisation de phénomène de changement de phase.

Dans le second chapitre, on applique une méthode d'optimisation de problèmes inverses de conduction thermique associée à un processus de changement de phase solide/liquide. Le problème traité est le contrôle de cette interface solide/liquide pour le cas d'un matériau pur dans une géométrie unidimensionnelle (1-D) sphérique. Le système thermique du problème est gouverné par l'équation de la chaleur. Pour résoudre ce problème, on introduit un critère de moindres carrés qui caractérise l'écart entre le comportement dynamique du système objet et celui du modèle mathématique décrivant ce système. On introduit ensuite une équation adjointe pour chacun des problèmes afin de déterminer de façon exacte le gradient du critère. L'utilisation d'un l'algorithme itératif basé sur la méthode du gradient conjugué permet le calcul de la solution optimale. On décrit les équations du problème en variables continues d'espaces et de temps, ainsi que la procédure pour déterminer le gradient du critère et les équations adjointes

correspondantes. La résolution numérique est menée par l'utilisation d'une méthode de différences finies classique dans un maillage mobile du fait que le domaine physique est variable puisque l'une des frontières est mobile au cours du temps.

On présente les résultats dans le cas d'une solution exacte construite. Les méthodes globales d'optimisation mènent un état final nul induisant une erreur importante vers la fin de l'horizon du temps. Par ailleurs, on constate que la solution est sensible aux bruits introduit dans les données. Par conséquent ces problèmes sont mal-posés. Pour rétablir le caractère bien-posé et garantir une solution stable et unique, deux techniques ont été utilisées. On filtre d'une part, les données et d'autre part, introduit une technique de régularisation de la solution.

Le chapitre III, est consacré à la modélisation de la solidification d'un matériau pur en géométrie (1-d) par la méthode enthalpique. Les équations gouvernantes, sont résolue numériquement dans un maillage uniforme à l'aide d'un schéma de différences finis explicite pour calculer l'enthalpie, la température et la position du front de solidification. Les résultats obtenus par le code de calcul ont été validés par la comparaison à la solution analytique de Newman.

On présente l'étude de la convection naturelle en vue de l'appliquer pour un problème inverse de solidification d'un matériau pur. La configuration géométrique du modèle physique est une cavité carrée, soumise à un gradient de température horizontal. Les conditions aux frontières sont de type Dirichlet (températures imposées).

Le phénomène de la convection naturelle est gouverné par les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie. La résolution des équations décrivant ce système et les conditions aux limites sont discrétisées et résolue numériquement par la méthode des volumes finis basée sur l'algorithme SIMPLE pour le couplage pression-vitesse. Ce modèle est ensuite mis en œuvre par un code matlab. Les caractéristiques du phénomène d'écoulement, telles que les champs, de températures, dynamique, de vitesses et le nombre de Nusselt calculés pour des valeurs de nombre de Rayleigh de 10^3 - 10^7 . Les résultats obtenus seront comparés avec la littérature.

CHAPITRE I : GENERALITE

I.1 Objet de l'étude

Le phénomène de changement de phase solidification/fusion est un phénomène le plus répandu dans la nature. Au point de vue macroscopique, il se caractérise par l'apparition d'une interface mobile qui sépare les deux phases (liquide et solide). On les appelle problèmes à frontière mobile. Ils possèdent une frontière mobile (frontière mobile au cours du temps, connue ou bien à déterminer) ou une frontière libre (frontière inconnue, mobile ou stationnaire) [1, 2]. A cause de leur implication, il suscite un très grand intérêt non seulement dans les phénomènes naturels mais aussi dans les technologies de pointe, la sûreté nucléaire et l'industrie.

Les applications du processus du changement de phase sont très nombreuses :

- Dans le domaine des énergies renouvelables et non polluantes, le stockage d'énergie sous forme de chaleur latente est beaucoup moins coûteux que sous forme électrique. On exploite la chaleur latente d'un Matériau à Changement de Phase (MCP), c'est-à-dire la capacité à passer de l'état solide à l'état liquide (fusion) sous l'effet de la chaleur. L'énergie de changement de phase est absorbée lors de la fusion du MCP et est restituée lors de sa solidification [1] .
- En géologues, on s'intéresse à la solidification de la lave volcanique et son influence sur l'activité des plaques tectoniques. La solidification des coulées, en contact de la surface de la terre et de l'atmosphère. [2, 3].
- Le Processus de changement de phase intervient dans de la fusion des glaces polaires et pose le problème réchauffement de la planète [4].
- La fabrication des cristaux, nécessite aussi la maîtrise du processus de fusion/solidification [5].

- On rencontre le phénomène de changement de phase pendant le freinage d'un véhicule spatial (fusée et navette) lorsque rentre dans l'atmosphère et risque de subir le phénomène d'ablation [6] [7].
- La pose de peinture et des soudures [5, 8, 9].
- la fabrication des composants électroniques [6] [38], la fabrication de microstructures à l'aide de petites impulsions laser [10],
- la correction des matériaux par solidification après refusion au laser [11].
- la conservation des cellules biologiques (cellules sanguines, îlots pancréatiques, hépatocytes, etc..) [12].
- la production d'air frais [13] par circulation de ce dernier sur une surface de glace, etc...

Le changement de phase des matériaux représente un défi majeur dans différents domaines (métallurgie, coulé continue). Chaque année, plus d'un milliard de tonnes de métaux sont solidifiés dans le monde, principalement des alliages ferreux (acier, fonte) et de l'aluminium.

Dans le cas de la solidification des matériaux, la cinétique de l'état change et plus précisément, la géométrie de la transition de phase de l'interface et son évolution dans le temps déterminent la structure et les propriétés de l'état final. La détermination par mesure directe de l'interface mobile est généralement très difficile à réaliser. Les méthodes inverses sont les plus couramment utilisées pour simuler de tels phénomènes de changement de phase. Le contrôle du front de solidification d'un matériau par simulation, en métallurgie, par exemple, permet de modifier ses propriétés mécaniques (dureté, ténacité ou force mécanique). Ces propriétés dépendent principalement des paramètres utilisés dans la simulation (température, flux thermique, géométrie de l'interface solide/liquide et évolution de la vitesse). Il est donc nécessaire de contrôler l'interface solide/liquide pour obtenir des propriétés particulières souhaitées.

Dans cette étude, on s'intéresse à l'utilisation des méthodes inverses pour la résolution des problèmes de conduction thermique avec changement de phase solide/liquide.

Un processus de changement de phase est caractérisé par la libération (solidification) ou l'absorption (fusion) de la chaleur latente au voisinage de l'interface solide/liquide. La résolution d'un tel problème nécessite la résolution d'une équation d'évolution (l'équation de la diffusion) dans un domaine physique variable.

Les propriétés mécaniques du matériau solidifié dépendent largement de la cinétique de changement d'état c'est à dire de la géométrie de l'interface solide/liquide et de sa vitesse d'évolution. Par conséquent, il est nécessaire de contrôler ou d'identifier cette interface solide/liquide afin d'obtenir un matériau ayant des propriétés mécaniques particulières.

La nature d'un changement de phase de solidification peut prendre plusieurs formes. Une possibilité de classification est présentée sur la figure (I.1). Cette classification est basée sur l'état d'une petite partie du matériau dans la région de changement de phase. Trois classes de changement de phase sont identifiées [14].

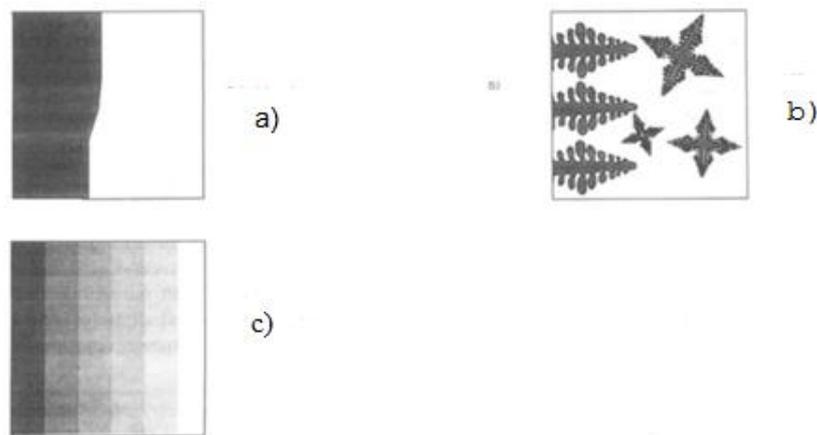


Figure (I-1) Classification du changement de phase de solidification

Cas a) le changement de phase se fait suivant une isotherme : La région de changement de phase est constituée de phases solides et liquides distinctes séparées par un front continu lisse. Ils se caractérisent par une température de fusion bien définie, à laquelle correspond une chaleur latente de fusion. (Exemple la solidification de l'eau ou de substances pures et d'alliages eutectiques).

Cas b) La région de changement de phase a une structure cristalline constituée de grains cylindriques et/ou équiaxiaux et l'interface solide/liquide a une forme complexe qui n'est pas nécessairement lisse ou continue, par exemple la solidification de la plupart des alliages métalliques. Dans ce cas de mélanges et d'alliages non-eutectiques, le changement de phase s'étend sur une plage de température où les phases solide et liquide coexistent.

Cas c) Les phases liquide et solide sont entièrement dispersées dans toute la zone de changement de phase et à l'échelle choisie, il n'y a pas d'interface distincte entre les phases solide et liquide (exemple la solidification des polymères ou des verres).

Notre étude concerne principalement l'étude d'un matériau pur où Les phases solide et liquide sont bien différenciées par une interface franche).

I.1.1 Problème de Stefan

La libération ou l'absorption de la chaleur latente pendant les transformations de solidification ou de fusion caractérise le changement de phase. A l'interface, on a une variation brusque de l'enthalpie massique "H". Dans le cas où le changement de phase est isotherme, le problème est appelé problème de Stefan. Sa résolution consiste à modéliser les transferts de chaleur dans chacune des phases avec un couplage à l'interface.

I.1.2 Problème de Stefan a deux phases

La formulation du problème de Stefan est déduite de la conservation d'énergie exprimée séparément pour les deux phases solide et liquide avec un couplage à l'interface. Les équations à résoudre dans les deux phases d'après [15] sont respectivement pour les phase solide et liquide :

$$(\rho c)_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \nabla(\lambda_s T_s) \quad \text{I.1}$$

$$(\rho c)_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = \nabla(\lambda_l T_l) \quad \text{I.2}$$

où ρ est la masse volumique, C la chaleur spécifique et λ la conductivité thermique du matériau

Le bilan thermique à l'interface où les deux champs de températures sont liés par la condition d'équilibre d'énergie est défini par l'expression

$$\rho_1 L \frac{ds}{dt} = \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right]_s - \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right]_l \quad \text{I.3}$$

Cette équation exprime la libération ou l'absorption de la chaleur latente due au changement de phase.

Où T est la température de changement de phase T_f , L : chaleur de latente du changement de phase, \vec{n} la normale locale dirigée vers l'extérieur du domaine solide et $\frac{ds}{dt}$ la vitesse normale locale de l'interface solide/ liquide.

Il est à noter que dans le cas où le transfert de chaleur dans la phase liquide est purement conductif, le problème est un problème de Stefan à deux phases. Il est nécessaire de résoudre en même temps les trois équations d'énergie indiquées ci-dessus.

I.1.3 Problème de Stefan à une phase

Lorsque le flux de chaleur transmis par la phase liquide est connu, le problème devient un problème de Stefan à une phase défini dans le domaine solide. On est amené à résoudre l'équation (1) avec la condition de Stefan suivante :

$$\rho_1 L \frac{ds}{dt} = \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right] - \phi(t) \quad \text{I.4}$$

Où le flux $\phi(t)$ est connu.

Dans le cas où la phase liquide est maintenue à la température de changement de phase, le flux $\phi(t)$ est nul. Alors la condition de Stefan devient :

$$\rho_1 L \frac{ds}{dt} = \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right] \quad \text{I.5}$$

Lorsque la frontière mobile est susceptible de disparaître et de réapparaître (discontinuité du gradient de température), il est préférable d'utiliser l'enthalpie massique H pour résoudre ce problème. Cette fonction non linéaire de la température exprime la somme de la chaleur sensible et la chaleur latente dans l'unité de masse à une température donnée. L'équation à résoudre est :

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = \nabla(\lambda \nabla T) \quad \text{I.6}$$

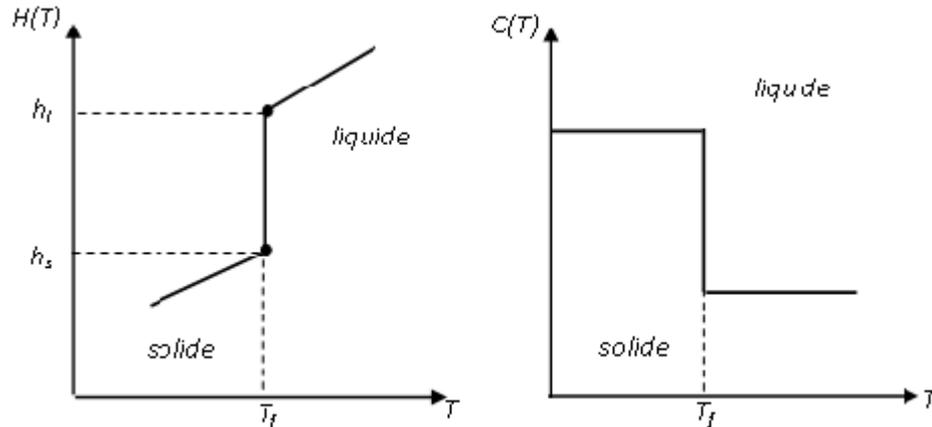


Figure I-2) : Représentation de l'enthalpie massique H et de la chaleur spécifique C

I.2 Détermination expérimentale de la position de l'interface

La position de l'interface solide/liquide peut être directement déterminée expérimentalement en utilisant des mesures de température [16], de surveillance optique [17], de rayons X [18], d'ultrasons [19] et [20], de courants de Foucault [21], thermoélectriques [22], et les diagnostics de résistance électrique. Bien que ces techniques expérimentales soient largement utilisées pour identifier l'interface solide/liquide dans un problème de changement de phase, elles restent coûteuses et difficiles à mettre en œuvre. Moravčík et al. ont traité expérimentalement les conditions de solidification de l'acier à outils fortement allié travaillé à froid par rapport aux aciers de construction en état de quasi-équilibre [23].

La détermination expérimentale directe de la position de l'interface solide/liquide peut être difficile et même impossible à réaliser expérimentalement particulièrement pour les matériaux non transparents. Les techniques de photographies manquent de précision. Les autres techniques (rayon x, ultra-sons) sont difficiles à appliquer et s'avèrent aussi coûteuses. La détermination indirecte passe par une modélisation du problème et sa résolution. On doit pouvoir relier les grandeurs physiques observées et la position de l'interface.

I.3 Modélisation directe du problème de changement de phase

I.3.1 Méthodes analytiques

Les méthodes analytiques ont pour objet de déterminer les inconnues (la position du front, champs de température et flux) comme des fonctions analytiques explicites des variables de temps et d'espace. Le problème de changement de phase le plus connu pour lequel une solution exacte existe est le problème de Newman, elle sera détaillée dans le chapitre (III). Parmi les méthodes analytiques appliquées au problème de changement de phase, nous pouvons citer la méthode d'intégrale de T. Goodman [24] où l'équation de chaleur est intégrée par rapport à la variable d'espace en supposant que la répartition de température suit une loi polynomiale. Celle de Rogers [25] utilise une transformation réciproque de « Baclaud » pour réduire le problème de Stefan d'une équation non linéaire à une forme qui admet une classe de solution exacte analogue à la solution classique de Newman.

Tsirel et Rykchev [26] ont aussi développé une solution analytique pour un problème inverse de conduction thermique pour identifier les conditions frontières sur des composant d'une partie de conduite d'écoulement d'une turbine à gaz. Morihat et al [27] ont appliqué, quant à eux, deux méthodes (analytique et impulsionnelle) pour déterminer la température et la contrainte thermique sur la paroi interne d'une conduite à partir des mesures effectuées sur la paroi externe.

A cause de la non-linéarité de ces problèmes, le principe de superposition ne peut être appliqué. Les méthodes analytiques ont un champ d'application restreint. La plupart des problèmes pratiques sont multidimensionnels et exigent la prise en compte de conditions aux limites incompatibles avec ces méthodes. Pour ces raisons, le développement de schémas d'approximation numériques s'impose.

I.3.2 Méthodes numériques

On distingue deux grandes classes, les méthodes explicites et les méthodes implicites.

- **Méthodes numériques "a suivi de l'interface mobile"**

Ce sont des méthodes numériques explicite ou méthodes à deux phases, elles permettent une résolution séparée du problème dans les domaines solide

et liquide. La position de l'interface entre les deux phases constitue une partie indispensable de la solution et doit être connue ou déterminée à chaque pas de temps à partir de condition de Stefan (équation (I.3)). Le problème peut être résolu dans un maillage fixe ou mobile

- **Méthodes numériques à domaine fixe**

Lorsque le front de changement de phase présente des irrégularités, la méthode "A suivi de l'interface solide/liquide" est difficile à appliquer. On reformule le problème de telle manière à faire intervenir l'enthalpie massique H . On obtient ainsi la méthode d'enthalpie basée sur l'équation (I.6). Cette équation s'applique dans tout le domaine (phase solide + phase liquide).

I.4 Discrétisation et maillage

I.4.1 Méthode à maillage mobile

Un problème de changement de phase peut être résolu dans un maillage mobile (un domaine transformé). La méthode à maillage mobile permet de s'affranchir les difficultés liées à la mobilité de frontière entre le domaine liquide et solide. On effectue une transformation pour la variable d'espace permettant ainsi de fixer le front. La transformation la plus utilisée est connue sous le nom de transformation de Landau (1950) [28]. La discrétisation des équations près de l'interface ne pose pas de difficultés particulières. Cette méthode est très largement utilisée pour la résolution des problèmes à frontière mobile à une dimension et peut s'appliquer aussi pour un problème à deux dimensions. Cette méthode sera appliquée dans le chapitre (II).

I.4.2 Méthode à maillage fixe

Dans la méthode à maillage fixe, les nœuds qui décrivent la frontière mobile peuvent bouger alors que les autres restent immobiles. A chaque pas de temps, la position de l'interface ne coïncide pas en général avec les nœuds du maillage. Les équations discrétisées et la distribution obtenue au pas de temps précédent doivent être modifiés au voisinage de la frontière mobile. Cette méthode sera utilisée dans les chapitres (III) et (IV).

I.4.3 Discrétisation :

La discrétisation est la transposition d'un état continu (fonction, modèle, variable, équation) en un état équivalent discret. Ce procédé constitue en général une étape préliminaire à la résolution numérique d'un problème il existe trois grandes familles de méthodes :

- **La méthode des différences finies**

La méthode de différences finies consiste à remplacer les dérivées partielles par des différences divisées. Une discrétisation des opérateurs différentiels (dérivées premières, secondes, etc..) peut être obtenue par les formules de Taylor. Cette méthode a comme avantage une grande simplicité d'écriture et un faible coût de calcul.

- **La méthode des volumes finis** : La méthode des volumes finis intègre, sur des volumes élémentaires de forme simple les équations écrites sous forme de loi de conservation. Elle fournit ainsi de manière naturelle des approximations discrètes conservatives et donc particulièrement bien adaptée aux équations de la mécanique des fluides

- **La méthode des éléments finis** :

La méthode des éléments finis consiste à approcher, dans un sous-espace de dimension finie, un problème écrit sous forme variationnelle dans un espace de dimension infinie. La solution approchée est dans ce cas une fonction déterminée par un nombre fini de paramètres comme, par exemple, ses valeurs en certains points (les nœuds du maillage).

- **La méthode spectrale** : On remplace, dans les équations modèles l'inconnue par des développements tronqués sur des bases de fonctions orthogonales (polynômes Chebychev, Legendre, Fourier) et en utilisant leur propriété d'orthogonalité on se ramène à des systèmes d'équations différentielles ordinaires plus simples à résoudre.

Toutes ces méthodes permettent en général la résolution de problèmes formalisés par des équations différentielles aux dérivées partielles sur un domaine D déterminé. Le domaine discrétisé sera caractérisé par un certain nombre de points nodaux où les fonctions inconnues seront évaluées.

Dans un processus de changement de phase, les deux phases solide et liquide possèdent des propriétés thermophysiques différentes. Le transfert de chaleur dans la phase solide est purement conductif. Par contre dans la phase liquide, on peut distinguer deux situations :

- Un transfert de chaleur sera purement conductif si la phase liquide est maintenue à la température de changement de phase.
- La contribution de différents transferts de chaleur (diffusion, convection naturelle et mouvements de convectifs) lorsque la température de la phase liquide est supérieure à la température de changement de phase. La convection naturelle est liée à la différence de la densité des phases au niveau de l'interface. Les mouvements convectifs sont d'origine artificielle telle que la coulée continue, injection du matériau en fusion....

D'autres phénomènes peuvent intervenir par exemple, dans le cas du soudage à l'arc, outre la conduction thermique et la convection naturelle il faut tenir compte des forces électromagnétiques, la tension superficielle et l'effet de Marangoni (les conditions aux limites sont mal définies)

Dans le cas où le transfert de chaleur dans la phase liquide est purement conductif, le processus de changement de phase sera modélisé physiquement. Mais dans les situations réelles où il y a existence des mouvements de convection associés à d'autres phénomènes en plus d'un transfert conductif, la modélisation physique du processus de changement de phase est difficile. Les difficultés proviennent de la connaissance approximative des paramètres régissant les transferts de chaleur et les phénomènes qui se produisent dans la phase liquide.

L'utilisation des modèles physiques simplifiés ont été considérés.

Les simplifications concernent essentiellement l'effet de la convection dans la phase liquide. Bonacina & al [29] ont supposé une conduction pure dans la phase liquide. Ces modèles ne peuvent en aucun cas représenter des situations réelles car la perte de précision est importante. D'autres auteurs ont résolu en simulation le problème de changement de phase en considérant la phase solide comme un liquide ayant une viscosité infinie [30] .

L'utilisation des méthodes inverses pour la résolution d'un problème de conduction thermique avec changement de phase permet de contourner les difficultés rencontrées tout en se rapprochant de la réalité.

I.5 Problèmes inverses

L'importance des méthodes inverses est considérable dans beaucoup de domaines d'application de la physique de la mécanique et de la géophysique comme la reconnaissance des gisements des hydrocarbures [31]. Ces méthodes trouvent aussi leur application dans d'autres domaines que ceux cités. Par exemple, en mécanique des solides les méthodes inverses sont utilisées pour l'identification des singularités en mécanique de la rupture, l'identification des lois de comportement [31] et la détermination des constantes d'élasticité [32]. En mécanique des fluides, elles sont utilisées pour estimer le profil de température des écoulements dans les conduites [33]. L'application de ces méthodes permet aussi la détermination des fonctions de réaction dans les modèles de vulcanisation [34]. Depuis quelques années, l'intégration des méthodes numériques par les grands groupes verriers est une solution efficace adoptée pour la résolution des problèmes liés à la fabrication d'un produit en verre [35, 36] Ces méthodes sont appliquées pour :

- L'identification de propriétés (détermination de la température initiale du verre et l'échange avec l'air ambiant, identification de la viscosité du verre en fonction de la température pendant son écoulement).
- Optimisation de formages industriels (rechercher une équation mathématique de la paraison et ses paramètres qui servent à concevoir une moule ébauche)
- Optimisation de trempes industrielles (modélisation du jet air sur le produit trempé, détermination des contraintes de trempe)

I.5.1 Problèmes inverses appliqués à l'équation de la chaleur

Il existe plusieurs types de problèmes inverses appliqués à l'équation de la chaleur et qui sont définis suivant les paramètres à déterminer. Parmi les paramètres traités on distingue :

- a) les paramètres thermophysiques caractérisant le matériau [37]
- b) Les conditions aux frontières [38]
- c) Les termes intervenant dans l'équation ou dans le processus ((source de chaleur ou résistance thermique) [39]
- d) Coefficient local de transfert de chaleur [40, 41]

Dans notre cas, on se limite aux problèmes inverses de catégories b). On s'intéresse alors à contrôler la position de l'interface solide/liquide (frontière mobile d'un domaine solide) dans un processus de solidification.

- **Problèmes inverses de contrôle de la position d'interface solide/liquide**

Dans ces types de problèmes, on détermine les conditions aux frontières (température ou flux) de telle manière que l'interface mobile solide/liquide (front de solidification) ait une position voulue.

On utilise comme données la position du front $S(t)$, le flux prescrit au front $\phi_s(t)$ et la température de changement de phase T_f . Les inconnues (contrôle) sont la température $T(0,t)$ et/ou le flux $\phi(0,t)$ à la frontière fixe du domaine solide (figure I.3).

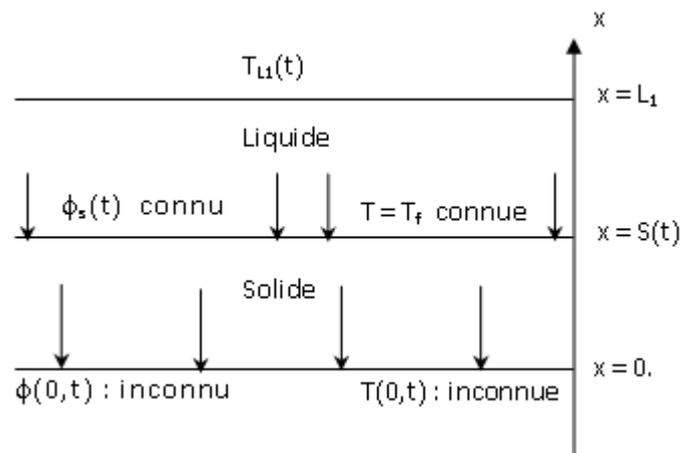


Figure (I-3) Schéma d'un problème inverse de contrôle dans un processus de solidification

- **Problèmes inverses de suivi de l'interface mobile solide/liquide**

Les problèmes inverses de suivi de l'interface mobile solide/liquide consistent à déterminer la position du front $S(t)$ et/ou le flux $\phi_s(t)$ pénétrant dans le solide. Ces grandeurs ne sont pas accessibles à la mesure. En utilisant comme données d'une part la température de changement de phase T_f et d'autre part, la température $T(0,t)$ et le flux $\phi(0,t)$ à la frontière fixe du domaine solide (fig. I.4).

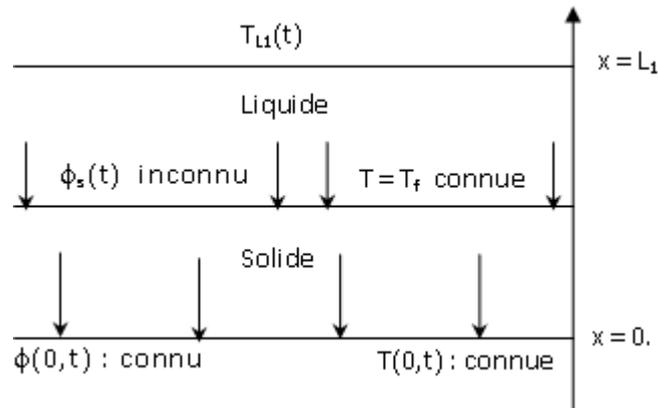


Figure (I-4) Schéma d'un problème inverse d'identification dans un processus de solidification

On distingue deux méthodes de résolution des problèmes inverses qui sont :
Les méthodes non-itératives et les méthodes itératives.

I.5.2 Méthodes non-itératives

Des méthodes non-itératives ont été développées pour la résolution de certains problèmes inverses sur l'équation de la chaleur en une dimension spatiale. Soltz [42] est le premier à développer une solution numérique d'un problème de conduction de chaleur en utilisant le théorème de Duhamel. Cependant cette solution était instable pour des petits pas de temps et également très sensible aux erreurs de mesure. La méthode de « spacing marche » de Raynaud et al [43] consiste à résoudre l'équation transitoire de la chaleur en avançant dans la direction spatiale au lieu du temps. Les méthodes non-itératives sont caractérisées par leur sensibilité au bruit de données.

I.5.3 Méthodes itératives

Les méthodes itératives font intervenir la notion du modèle directe et minimisent itérativement l'écart objet/modèle. L'intérêt essentiel de ces méthodes réside dans la possibilité d'incorporer, simplement et explicitement, des informations a priori sur la solution par la pénalisation du critère.

Il existe deux méthodes qui sont classées selon le domaine de temps sur lequel est résolu le problème inverse (méthodes séquentielles et méthodes globales).

a) Méthodes séquentielles

L'inconvénient de l'utilisation des méthodes non-itératives précédemment évoquée a été résolu par le concept de données futures. La valeur du paramètre inconnu à l'instant t est le résultat d'une minimisation d'un critère objet/modèle de l'instant t à l'instant $t + dt$. Reinhardt et al [44] ont proposé une méthode séquentielle de gradient conjugué pour une solution numérique stable au problème inverse de conduction thermique.

b) Méthodes globales

Les méthodes globales itératives découlent de la théorie générale de l'optimisation qui utilise le concept du contrôle optimal. Elles sont les plus utilisées pour la résolution des problèmes de conduction thermique. La minimisation itérative du critère objet/modèle sur la totalité de l'intervalle considéré aux cours de déroulement du processus thermique, permet d'ajuster la valeur « optimale » du paramètre inconnu. Les avantages de ces méthodes par rapport aux deux autres évoquées précédemment est qu'on puisse utiliser des petits pas de temps et le fait qu'elles sont moins sensibles aux erreurs de mesure. Ces méthodes ont été utilisées par plusieurs auteurs. El-bagdouri et al (1986)[45] ont déterminé le contrôle optimal dans un domaine fixe, le cas d'un domaine variable a été abordé par [38]. Alivanov [46] conclut lorsque le gradient est calculé analytiquement, ces méthodes itératives non-numériques avec régularisation sont plus efficaces.

Dans[47] , on trouve une comparaison, des résultats obtenus en simulation et pour un cas expérimental d'un problème d'identification du front de solidification en géométrie 1-D, de la méthode « space marching » et celle du gradient. Les meilleurs résultats sont obtenus par la méthode du gradient dans le cas de données bruitées et qu'on peut estimer un état final. Ces méthodes globales seront appliquées à la résolution de notre problème.

I.6 Méthodologie de résolution d'un problème inverse

Le principe de résolution d'un problème inverse consiste à déduire les paramètres inconnus d'un modèle théorique décrivant le modèle physique à

partir des grandeurs observables (données disponibles). [48] a démontré l'existence d'un domaine optimal dans le cas de problèmes elliptique.

Prenons le schéma du problème du suivi de l'interface mobile fig. (I.3) :

Si on connaît les données de la position du front $S(t)$, on peut déduire le flux ϕ à la frontière fixe du domaine solide en utilisant la relation suivante :

$$\phi = R.S \quad \text{I.7}$$

Où R est l'opérateur linéaire qui lie ϕ et S dans le sens direct. Ce problème est dit problème direct. Comme il manque des données sur $S(t)$, alors c'est un problème mal-posé. Pour se rapprocher de la solution, nous devons faire des hypothèses sur ces données. Il faut que l'écart entre le flux ϕ calculé par le problème direct et le flux $\hat{\phi}$ mesuré soit minimal, on introduit un critère à minimiser.

$$J(S) = \int_0^{t_f} (\phi - \hat{\phi})^2 dt \quad \text{I.8}$$

Par contre, si ϕ est connu et qu'on veuille déterminer S , la solution sera donnée par l'équation :

$$S = R^{-1}\phi \quad \text{I.9}$$

R^{-1} est l'opérateur inverse. Le problème est appelé problème inverse.

I.6.1 Difficultés dans la solution inverse

La difficulté principale dans la solution des problèmes inverses résulte du fait que ces problèmes sont mal-posés.

On considère deux espaces métriques V et F . V est l'espace des paramètres inconnus (S) et F l'espace des données (ϕ).

Un problème est dit mal-posé, (Hadamard) [49], s'il ne vérifie pas les trois conditions suivantes :

- a) La solution $S \in V$ existe pour tout $\phi \in F$
- b) La solution est unique
- c) La solution est continue par rapport aux données ou bien la solution est stable par rapport aux petites variations des données.

Le problème inverse pour déterminer la solution S est généralement mal-posé. Le non-respect des conditions a, b et c provient de causes diverses telles que :

- Données fausses
- Données incompatibles $\phi \notin F$
- Erreurs de modélisation ou de calcul
- Choix inadéquats des topologies

Il est possible de rendre le problème inverse bien-posé par le choix approprié des espaces V et F .

Pour rendre le problème inverse bien-posé Weber [50] a remplacé l'équation parabolique de la conduction de la chaleur par une équation hyperbolique approchante. Par ailleurs, pour s'approcher de la solution et rendre le problème stable, Alivanov [51] a minimisé un critère de moindres carrés en utilisant une information sur la précision de la mesure (ou de la donnée). Il a pris comme test d'arrêt des itérations :

$$\|RS - \hat{\phi}\|^2 \cong \delta^2 \quad \text{I.10}$$

Où δ est l'erreur de mesure ou de la donnée, connue à l'avance.

Cette méthode n'est pas très répandue. Nous verrons plus tard que la méthode de régularisation de Tikhonov est la plus utilisée puisqu'elle donne de meilleurs résultats.

I.6.2 Régularisation au sens de Tikhonov

Pour obtenir une solution stable et rétablir le caractère bien-posé du problème inverse dans le cas où les données sont entachées d'erreurs. Tikhonov et al [52] ont réduit l'ensemble des solutions à un impact en

utilisant une information sur la nature de la solution. Elle est suffisante pour rendre le problème bien-posé et la solution est stable pour des petites variations des données. Alors, Tikhonov suppose les trois conditions suivantes :

- 1) On sait qu'il existe une solution dans un sous-espace fermé F' de F pour une certaine classe de données assez régulières (connaissances à priori).
- 2) La solution est unique dans une classe de modèle appartenant à V .
- 3) La solution dépend continuellement de ϕ .

I.6.3 Construction de l'opérateur inverse régularisé

Pour régulariser le problème inverse, on introduit la fonctionnelle suivante :

$$J(S) = \int_0^{t_f} (\phi - \widehat{\phi})^2 dt + \eta \omega(S) \quad \eta > 0 \quad \text{I.11}$$

où $\omega(S)$ est une fonction stabilisatrice d'ordre un (suivant l'ordre de la dérivée de U), elle contrôle la douceur de la solution.

$$\omega(S) = \eta \int_0^{t_f} p(t) \left[\frac{dS}{dt} \right]^2 dt \quad \text{I.12}$$

η est le paramètre de régularisation et $P(t)$ est une fonction de pondération. Si $P(t)$ est constante, $\omega(S)$ est appelé stabilisateur d'ordre un à coefficient constant.

Le choix du coefficient η n'est pas arbitraire. Il peut être de façon optimale. Une très grande valeur de η fournit une solution proche de la connaissance à priori, stable, mais peut ne pas satisfaire à certaines exigences des lois physiques. Par contre, une faible valeur de η produit des instabilités numériques. Nous avons choisi sa valeur heuristiquement pour répondre aux conditions de précision et stabilité.

Les problèmes de changement de phase solide/liquide ont été largement traités par plusieurs auteurs en utilisant des méthodes directes ou inverses.

Zabaras, et Ruan [53] ont séquentiellement résolu un problème de solidification inverse de Stefan unidimensionnel. Ils ont utilisé une méthode par éléments finis déformable pour calculer la position et la vitesse de déplacement de l'interface et des informations sur la température mesurée par deux ou plusieurs capteurs situés dans la phase solide. Zabaras, and Kang [54] résolvent itérativement en simulation numérique, un problème de contrôle d'un front de congélation dans un cas linéaire. Samai et Jarny [38] ont identifié la position du front de solidification en utilisant une méthode de descente itérative. Jiang, al [55] ont résolu un problème inverse par la méthode du gradient conjugué en utilisant des différences finies pour déterminer le flux thermique historique et la distribution finale de la température. La méthode de régularisation de Tikhonov d'ordre zéro a été introduite pour stabiliser la solution inverse. Hetmaniok and Słota [56] ont déterminé les conditions aux limites dans le processus de solidification de l'alliage binaire lorsque les mesures de température des points sélectionnés du plâtre sont connues. Dans ce modèle de Stefan, la température du liquide varie avec la concentration du composant d'alliage.

Diverses méthodes directes ont également été utilisées par certains auteurs pour déterminer la température à une frontière fixe, connaissant la position d'une interface mobile solide/liquide [57] ou pour évaluer la position d'une ou plusieurs interfaces mobiles pour une température donnée [58] à [59]. D'autres étudient le changement de phase sur matériaux (PCM), ils les ont traitées en utilisant des coordonnées cylindriques ou sphériques [60] à [61], en fixant le front mobile en présence de convection [62] et en augmentant l'énergie stockage [63].

Dans cette étude, on s'intéresse à la détermination de cette frontière mobile dans le cas d'un processus de changement de phase liquide/solide avec transition franche où le front de changement de phase constitue la frontière mobile.

I.7 Problèmes concernant cette étude

Dans cette étude, trois problèmes seront traités :

- Contrôle de l'évolution du front de solidification sans présence de convection
- Modélisation de la solidification par la méthode enthalpique
- Etude de la convection naturelle.

I.7.1 Contrôle de l'évolution du front de solidification

Dans le chapitre suivant, on traite le problème de contrôle de l'évolution du front de solidification par les méthodes inverses de conduction thermique. Le système étudié est gouverné par l'équation de conduction de la chaleur unidimensionnelle pour le cas d'un matériau pur.

Concernant la résolution de problèmes inverses en présence d'un changement de phase, on peut citer, M. Samaï [38] qui a résolu, itérativement dans un maillage mobile, un problème linéaire de contrôle d'un front de solidification par un algorithme de gradient. Il a pris comme variable de contrôle la température à la frontière fixe du domaine solide en utilisant comme données, l'évolution désirée du front de solidification, la température de changement de phase et le flux pénétrant à l'interface solide-liquide déduit d'un bilan thermique.

Zabaras. et al [54], résolvent aussi itérativement en simulation numérique, un problème de contrôle d'un front de congélation dans un cas linéaire, les propriétés thermique du matériau sont fonction des variables d'espace et temps et non de la température. Ils développent deux méthodes alternatives pour déterminer le flux de chaleur à la frontière fixe du domaine solide comme variable de contrôle. La première utilise une approximation à dimension finie de la fonction du flux inconnue par contre, la seconde emploie la méthode adjointe pour calculer dans l'espace L_2 le gradient du fonctionnel coût. Ce même problème avait été résolu par [38] itérativement par la méthode de gradient

. Dans ce problème, on prend comme variable de contrôle la température U à la frontière fixe du domaine solide. L'évolution désirée du front de solidification est considérée comme une donnée. Deux autres données utilisées sont d'une part la température de l'interface mobile solide-liquide et d'autre part le flux de chaleur à cette interface, déduit d'un bilan thermique.

Ce problème est formulé comme un problème d'optimisation où on introduit un critère de moindre carré J entre le modèle et l'objet. Le modèle étant représenté par le flux calculé au front de solidification ϕ_s et l'objet un flux ϕ_p prescrit au front et déduit d'un bilan thermique du fait que l'évolution désirée du front est $S_d(t)$ donc connue. L'introduction d'une équation adjointe permet le calcul exact du gradient du critère. La minimisation du critère J est basée sur un algorithme de gradient conjugué permettant la détermination de la température U comme une solution optimale du problème de contrôle.

On présente les résultats numériques du problème de contrôle dans le cas de données exactes ainsi que ceux obtenus après l'introduction d'un état final. On présente les résultats de données bruitées et ceux dus à des données filtrées ainsi que les résultats en utilisant la technique de régularisation.

I.7.2 Modélisation de la solidification par la méthode enthalpique

Le troisième chapitre est consacré à la résolution numérique d'un problème de solidification d'un matériau en géométrie unidimensionnelle en utilisant la méthode enthalpique. Les équations gouvernant le transfert de chaleur par conduction dans la région liquide et la région solide sont résolues simultanément malgré la discontinuité du gradient de la température à l'interface. L'avantage de ces méthodes réside dans la simplicité et la facilité de mettre en œuvre même dans le cas tridimensionnel. Le modèle enthalpique est considéré comme le plus efficace et le plus précis des méthodes à maillage fixe.

Bonacina et al [29] ont résolu numériquement un problème non-linéaire de changement de phase dans un schéma de différences finies implicite. La fonction enthalpique était écrite sous la forme suivante :

$$H(T) = \int_{T_f}^T \{C(T)\rho(T) + L\rho(T)\delta(T - T_f)\} dt \quad \text{I.13}$$

δ : impulsion de dirac

Lorsque $T=T_f$, l'équation (I.13) présente des difficultés de discontinuités du gradient de la température.

D'un autre côté, Cezari [64] a modifié l'équation (I.13) avec l'utilisation de grosses mailles et de larges pas de temps. Il a ainsi résolu le problème de discontinuité du gradient de la température à l'interface d'après l'équation suivante :

$$H(T) = \begin{cases} \rho_s c_s T & \text{si } T < T_f \\ \rho_l c_l (T - T_f) + \rho_l L + \rho_s c_s T_f & \text{si } T > T_f \end{cases} \quad \text{I.14}$$

Durant la même période, Date [65] a donné une nouvelle formulation enthalpique en différences finies pour les problèmes de changement de phase multidimensionnel nécessitant une température unique de changement de phase. Il a résolu ainsi le problème des oscillations de température rencontrées avec les formulations enthalpiques conventionnelles.

Dans cette étude, un problème de conduction thermique avec changement de phase est résolu en prenant une température constante imposée à une extrémité, tandis que l'autre extrémité est constante. La phase liquide est maintenue à une température initiale. La forme finale discrète des équations gouvernantes et des conditions limites, sont résolue numériquement sur un maillage uniforme à l'aide d'un schéma entièrement implicite pour calculer l'enthalpie et la température en chaque point la maille et la position de l'interface.

Pour valider le code de calcul, les résultats obtenus seront comparés à la solution analytique de Newman.

I.7.3 Etude de la convection naturelle

La convection naturelle dans laquelle le mouvement du fluide est produit par les différences de densité entre les particules chaudes et celles froides existant dans un fluide, situé dans un champ de forces massiques. Cette différence de densité, qui est la plupart du temps provoquée par une différence de température, avec la force de gravité, crée une force de flottabilité, qui par conséquent crée une différence de quantité de mouvement.

L'étude de la convection naturelle en cavité confinée à une importance majeure dans de nombreux domaines d'application (fours, capteurs solaires, fenêtres à double paroi, réservoirs d'eau chaude, refroidissement des circuits, croissance de cristaux, industrie métallurgique, ...) notamment la solidification des matériaux. On s'intéresse à

la simulation numérique de la convection naturelle dans une cavité carré en vue de l'appliquer pour à un problème inverse avec changement de phase.

On trouve une quantité impressionnante de publications scientifiques portant sur l'étude de la convection naturelle dans des enceintes de forme carré et rectangulaire, parmi ces études celle de Ostrach Bejan en 1980 [66-75]. Ils sont traité l Le comportement général du nombre de Nusselt moyen en fonction du rapport de forme de l'enceinte pour différents nombres de Rayleigh.

De nombreuses études se sont largement concentrées sur les écoulements convectifs entraînés par l'inversion de densité [76-79]. Les rapports d'aspects sur la convection naturelle dans les enceintes rectangulaires sont particulièrement intéressants pour les études d'inversion de densité. D'autre auteurs [80, 81] se sont intéressé à la convection naturelle oscillatoire pour un nombre faible de Prandtl dans les enceintes rectangulaires.

Les études analytiques ont apporté plusieurs éclaircissements dans les Limites de rapports de forme faibles ou élevés, Plusieurs résultats numériques ont ainsi confirmé l'existence d'un rapport de forme optimal dépendant du nombre de Rayleigh [82, 83].

Le problème de convection naturelle dans une enceinte carrée est devenu un point de référence afin de comparer les performances des modèles numériques. A cet égard, les références De Vahl Davis [71, 84] , Ramaswamy & al [85], Le Quree [86] & al, Markatos & al [87], Chenoweth & al [88], Hortman [89], Lo & al [90], Ghassemi & al [91] et Laaroussi [92] sont abondamment cités afin de valider les codes numériques.

Dans cette étude, on présente la résolution d'un problème de convection naturelle en vue de le préparer pour un problème inverse de solidification. Les aspects relatifs à la méthode des volumes finis sont exposés en détail, en particulier la génération du maillage de calcul, la discrétisation des équations du problème, les schémas de convection, l'algorithme et la méthode de résolution des équations algébriques finales.

Les résultats des champs thermique, dynamique et les champs de vitesses sont donnés sous forme de tableaux et diagrammes. Ils sont discutés, critiqués et sont comparés avec les données des autres auteurs afin de valider notre programme.

CHAPITRE II CONTRÔLE DE L'ÉVOLUTION DU FRONT DE SOLIDIFICATION

II.1 Introduction

Dans ce chapitre on présente la résolution numérique en différences finies avec maillage mobile du problème de contrôle de l'évolution du front de solidification d'un matériau pur. On utilise pour cela la méthode inverse du gradient conjugué appliquée à l'équation de la chaleur unidimensionnelle dans un domaine physique variable (frontière mobile).

On prend comme variable de contrôle la température U à la frontière fixe du domaine solide. Dans ce problème, l'évolution désirée du front de solidification est considérée comme une donnée. Deux autres données utilisées sont d'une part la température de l'interface mobile solide-liquide et d'autre part le flux de chaleur à cette interface, déduit d'un bilan thermique. Ce problème est formulé comme un problème d'optimisation où on introduit un critère de moindre carrés J entre le modèle et l'objet. Le modèle étant représenté par le flux calculé au front de solidification ϕ_s et l'objet un flux ϕ_p prescrit au front et déduit d'un bilan thermique du fait que l'évolution désirée du front est $S_d(t)$ donc connue. L'introduction d'une équation adjointe permet le calcul exact du gradient du critère. La minimisation du critère J est basée sur un algorithme de gradient conjugué permettant la détermination de la température U comme une solution optimale du problème de contrôle.

On présente les résultats numériques du problème de contrôle dans le cas de données exactes. On montre que lorsqu'on estime un état final et une initial guess, les résultats du contrôle seront obtenus avec une excellente précision sur tout l'horizon du temps. On présente également des résultats

dans le cas de données bruitées, ceux dus à des données filtrées et finalement les résultats en utilisant la technique de régularisation.

II.2 Description du système physique

Dans la figure (II.1), on présente un problème de solidification d'un matériau pur où le transfert de chaleur dans les phases solide et liquide est monodimensionnel purement conductif. Deux cas possibles peuvent être présentés pour la résolution de ce problème.

1^{er} CAS : La phase liquide est initialement à la température de changement de phase T_f . La frontière chaude est également maintenue à la température de changement de phase T_f . On aura les conditions frontières suivantes pour maintenir la phase liquide à la température de changement de phase $\forall t \in [0, t_f]$.

$$T(r, 0) = T_f \quad 0 < r < S_d(t) \quad \forall t \in [0, t_f]$$

$$T(R, t) = U(t)$$

2^{me} CAS : La température au centre est supérieure à la température de changement de phase. En négligeant les mouvements de convection dans la phase liquide. Le transfert de chaleur entre le centre de la sphère et le front mobile sera considéré unidimensionnel purement conductif. On aura :

$$U(t) < T_f < T_0(t)$$

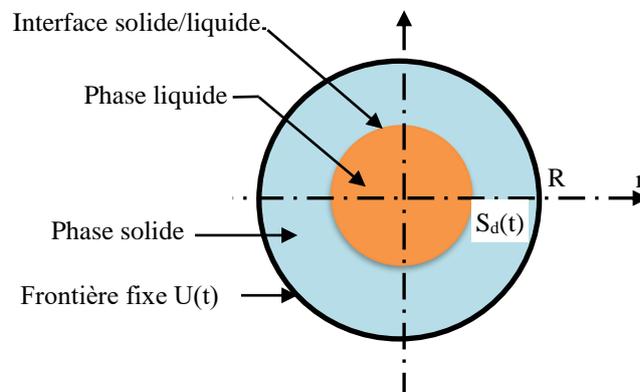


Figure (II-1) Schéma du processus de solidification d'un matériau pur en géométrie 1D sphérique

II.3 Formulation du problème direct

II.3.1 Equations définissant le problème direct dans la phase solide

La formulation mathématique du problème direct dans la phase solide est donnée par les équations suivantes :

$$\rho c_s \frac{\partial T(r,t)}{\partial t} - \frac{\lambda_s}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T(r,t)}{\partial r} \right) = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} S_d(t) \leq r \leq R \\ 0 \leq t \leq t_f \end{array} \right. \quad \text{II.1}$$

$$T(R,t) = U(t) \quad \text{II.2}$$

$$T(S_d(t), t) = 0 \quad \text{II.3}$$

$$S(t = 0) = S_0 \quad \text{II.4}$$

$$T(r, 0) = T_0(r) \quad 0 < r < S_0 \quad \text{II.5}$$

$$\phi_s(t) = \lambda_s \frac{\partial T(S_d(t), t)}{\partial r} \quad r \in [S_d(t), R] \quad \text{II.6}$$

II.3.2 Equations définissant le problème direct dans la phase liquide

Dans la phase liquide, le problème direct est défini par les équations suivantes :

$$\rho c_l \frac{\partial T(r,t)}{\partial t} - \frac{\lambda_l}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T(r,t)}{\partial r} \right) = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} 0 \leq r \leq s_d(t) \\ 0 \leq t \leq t_f \end{array} \right. \quad \text{II.7}$$

$$T(S_d(t), t) = 0. \quad \text{II.8}$$

$$\frac{\partial T(0,t)}{\partial r} = 0 \quad \text{II.9}$$

$$S(t = 0) = S_0 \quad \text{II.10}$$

$$T(r, 0) = T_0(r) \quad 0 < r < S_0 \quad \text{II.11}$$

$$\phi_l(t) = \lambda_l \frac{\partial T(S_d(t), t)}{\partial r} \quad \text{II.12}$$

Où T_f est la température de changement de phase.

$S_d(t)$	la position désirée du front à l'instant t
t_f	l'instant final.
$T_0(r)$	le champ de température initial.
S_0	l'épaisseur initiale de la couche solide.
ρ_s et ρ_l	masses volumiques du matériau respectivement de la phase solide et liquide.
c_s et c_l	chaleur spécifique du matériau respectivement de la phase solide et liquide.
λ_s et λ_l	conductivité thermique du matériau respectivement de la phase solide et liquide.

Dans ce qui suit, les variables T , r et t seront adimensionnalisées de la façon suivante.

$$r^* = \frac{r}{R} \quad t^* = \frac{t\lambda}{\rho c R^2} \quad T^* = \frac{T - T_f}{T_{ref}} \quad \text{avec} \quad T_{ref} = T(0,0) - T(0, t_f)$$

Remarque : Par commodité, nous éviterons de mettre le symbole (*) sur ces variables.

II.3.3 Condition de Stefan à l'interface solide/liquide

La solidification d'une masse de matériau est une transformation pendant laquelle se produit une libération d'énergie. Le bilan thermique à la frontière mobile est alors la somme du flux de chaleur arrivant du liquide par conduction et le flux de chaleur produit par la libération d'énergie due à la solidification de cette masse de matériau liquide.

$$\phi_p - \phi_l = \phi_L = \rho_l L \frac{dS(t)}{dt} \quad \text{II.13}$$

Où $\phi_p(t)$ est le flux de chaleur de conduction pénétrant dans le solide à l'interface, $\phi_l(t)$ le flux de chaleur de conduction arrivant du liquide à l'interface et $\phi_L(t)$ le flux de chaleur due à une solidification d'une masse de

matériau liquide. ρ_l est la masse volumique du liquide et L la chaleur latente de changement de phase.

Dans le cas où la phase liquide est maintenue à la température de fusion T_f , le flux de chaleur de conduction $\phi_l(t)$ arrivant du liquide sera nul et le bilan thermique sera réduit à :

$$\phi_p = \phi_L = \rho_l L \frac{dS(t)}{dt} \quad \text{II.14}$$

Dans le problème direct de conduction thermique, on déterminera selon la phase considérée :

- ♦ **Dans la phase solide :** $T(r, t), \phi_s(t) \quad R \leq r \leq S_d(t) \quad 0 \leq t \leq t_f$

A partir des données suivantes :

$$\begin{cases} \lambda_s, \rho_s, c_s, S_0, T_f, t_f, T_0(r) & R \leq r \leq S_0 \\ U(t), S_d(t) & 0 \leq t \leq t_f \end{cases}$$

- ♦ **Dans la Phase liquide :** $T(r, t), \phi_l(t)$ et $\phi_p(t) \quad S_d(t) \leq r \leq 0 \quad 0 \leq t \leq t_f$
où $\phi_p(t)$ est le flux prescrit au front.

A partir des données suivantes

$$\begin{cases} \lambda_l, \rho_l, c_l, S_0, T_f, t_f, T_0(r) & S_0 \leq r \leq 0 \\ S_d(t) & 0 \leq t \leq t_f \end{cases}$$

II.4 Problème inverse

II.4.1 Formulation du problème inverse

On formule le problème inverse comme un problème d'optimisation défini uniquement dans la phase solide. Ceci consiste à déterminer le contrôle $U(t)$ qui assure une évolution désirée du front $S_d(t)$ pour un flux prescrit $\phi_p(t)$ à l'interface.

Ce flux prescrit à l'interface mobile sera calculé avec précision suivant les deux cas considérés :

- ♦ En effet, dans le premier cas puisque la chaleur latente (L) et la masse volumique du matériau liquide (ρ_l) sont connues, le flux $\phi_p(t)$ sera déterminé suivant l'équation (II.14).

- Dans le deuxième cas, la résolution des équations (II.6)-(II.12) dans la phase liquide permet aussi en une seule fois le calcul du flux $\phi_p(t)$ pénétrant dans la phase solide.

Dans le problème direct, lorsqu'on détermine le flux $\phi_S(t; U)$ pénétrant dans la phase solide suivant les équations (II.1) -(II.6), on peut établir une relation entre $U(t)$ et $\phi_S(t; U)$ telle que :

$$\forall U \in V, \quad V : \text{ensemble des solutions admissibles.}$$

On a :

$$\phi_S(t; U) = R U(t) \quad \text{II.15}$$

Où R est l'opérateur linéaire qui caractérise la relation entre U et $\phi_S(t; U)$ dans le sens direct. Cet opérateur résume formellement une relation causale entre $U(t)$ et $\phi_S(t; U)$ qui est la conséquence de l'évolution de l'état du système.

Le problème inverse est lié au problème direct par la relation suivante :

$$U(t) = R^{-1} \phi_S(t; U) \quad \text{II.16}$$

Où R^{-1} est l'opérateur inverse qui permet de déterminer $U(t)$ à partir de $\phi_S(t; U)$. Pour que $U(t)$ soit une solution optimale, il faut que l'écart entre le flux $\phi_S(t; U)$ calculé et le flux $\phi_p(t)$ soit minimal.

Remarque : La notation $\phi_S(t; U)$ signifie que le flux ϕ est lié au contrôle U par une relation fonctionnelle.

II.4.2 Méthode de résolution

On introduit un critère J de moindre carré qui minimisera l'écart entre le flux calculé $\phi_S(t; U)$ (calculé par le modèle direct) et le flux exact $\phi_p(t)$.

$$J(U) = \int_0^{t_f} (\phi_S(t; U) - \phi_p(t))^2 dt \quad \text{II.17}$$

Le problème inverse s'énonce comme suit :

A partir des données suivantes : $\lambda_s, \rho_s, c_s, S_0, T_f, t_f, T_0(r) \quad R \leq r \leq S_0$

$S_d(t)$ et $\phi_s(t; U)$ $0 \leq t \leq t_f$

On cherche $U^*(t) \in V \quad \forall t \in [0, t_f]$ tel que :

$$J(U^*) = \inf J(U)$$

$U \in V$ V ensemble des solutions admissibles

II.5 Calcul de variations

II.5.1 Définition de la dérivée directionnelle

Soit V un espace normé et soit J une fonctionnelle sur V . On dit que J admet une dérivée directionnelle (ou différentielle au sens de Gâteaux) en $U \in V$ dans la direction $\delta U \in V$ si

$$\frac{J(U + \epsilon \delta U) - J(U)}{\epsilon} \quad \text{II.18}$$

admet une limite quand $\epsilon \rightarrow 0$ (dans \mathbb{R}) cette limite est notée $D_{\delta U} J(U)$.

Si $\forall \delta U D_{\delta U} J(U)$ existe, alors J est différentiable au sens de Gâteaux en $U \in V$.

II.5.2 Définition du gradient d'une fonctionnelle

Soit $V = L^2(t)$ l'espace de fonctions de carrés sommables défini dans l'intervalle $]0, t_f]$ muni du produit scalaire sur V tel que :

$$(U, W)_U = \int_0^{t_f} U(t)W(t)dt \quad \text{II.19}$$

$$\|U\|_U = \int_0^{t_f} U(t)U(t)dt \quad \text{II.20}$$

On note $\| \cdot \|_U$ la norme associée :

Si la fonctionnelle J de l'équation (II.18) est différentiable au sens de Gâteaux en $U \in V$ et si $D_{\delta U}J(U)$ est une forme linéaire continue en δU , alors il existe un $\nabla J(U) \in V$ tel que :

$$\forall \delta U \in V \quad D_{\delta U}J(U) = (\nabla J(U), \delta U)_{\delta U} \quad \text{II.21}$$

Lequel est appelé gradient de J en U . Ou bien en accord avec l'équation (II.18)

$$D_{\delta U}J(U) = \int_0^{t_f} \nabla J(t; U) \delta U(t) dt \quad \text{II.22}$$

II.5.3 Les équations de variations

Dans le cas où le contrôle $U(t)$ subit une variation $\varepsilon \delta U$, la température dans le solide et le flux au front subiraient aussi des variations suivant les équations :

$$U_\varepsilon = U + \varepsilon \delta U$$

$$T_\varepsilon(r, t) = T(r, t; U + \varepsilon \delta U)$$

On aura T_ε la température variée solution de :

$$\frac{\partial T_\varepsilon(r, t)}{\partial t} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_\varepsilon(r, t)}{\partial r} \right) = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} S_d(t) \leq r \leq R \\ 0 \leq t \leq t_f \end{array} \right\} \quad \text{II.23}$$

$$T_\varepsilon(R, t) = U(t) + \varepsilon \delta U(t) \quad \text{II.24}$$

$$T_\varepsilon(S_d(t), t) = 0. \quad \text{II.25}$$

$$S(t = 0) = S_0 \quad \text{II.26}$$

$$T_\varepsilon(r, 0) = T_0(r) \quad 0 < r < S_0 \quad \text{II.27}$$

$$\phi_\varepsilon(t) = \frac{\partial T_\varepsilon(S_d(t), t)}{\partial r} \quad r \in [0, S_d(t)] \quad \text{II.28}$$

Pour ε suffisamment petit, les variations $\delta T = D_{\delta U}T(U)$ de la température et $\delta\phi_s = D_{\delta U}\phi_s(U)$ du flux au front au point U dans la direction δU sont données par :

$$D_{\delta U}T(U) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{T(U + \varepsilon\delta U) - T(U)}{\varepsilon} = \delta T \quad \text{II.29}$$

$$D_{\delta U}\phi(U) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\phi(U + \varepsilon\delta U) - \phi(U)}{\varepsilon} = \delta\phi \quad \text{II.30}$$

II.5.4 Problème de variation

Il en résulte que δT et $\delta\phi$ sont les solutions des équations suivantes :

$$\frac{\partial \delta T(r, t)}{\partial t} - \frac{2}{r} \frac{\partial \delta T(r, t)}{\partial r} - \frac{\partial^2 \delta T(r, t)}{\partial r^2} = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} S_d(t) \leq r \leq R \\ 0 \leq t \leq t_f \end{array} \right. \quad \text{II.31}$$

$$\delta T(1, t) = \delta U(t) \quad \text{II.32}$$

$$\delta T(S_d(t), t) = 0. \quad \text{II.33}$$

$$S(t = 0) = S_0 \quad \text{II.34}$$

$$\delta T(r, 0) = T_0(r) \quad 0 < r < S_0 \quad \text{II.35}$$

$$\delta\phi_s(t) = \frac{\partial \delta T(S_d(t), t)}{\partial t} \quad r \in [0, S_d(t)] \quad \text{II.36}$$

II.5.5 Variation du critère

De la même façon, la variation δJ du critère pour ε suffisamment petit est égale à la dérivée directionnelle de J au point U dans la direction δU .

$$\begin{aligned} D_{\delta U}J(U) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{J(U + \varepsilon\delta U) - J(U)}{\varepsilon} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-1} [J(t; U + \varepsilon\delta U) - J(U)] \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-1} \int_0^{t_f} [(\phi_s(t; U + \varepsilon\delta U) - \phi_p(t))^2 \\ &\quad - (\phi_s(t; U) - \phi_p(t))^2] dt \end{aligned} \quad \text{II.37}$$

Après développement de cette expression et si ε est petit, on aura :

$$\phi_s(t; U + \varepsilon\delta U) = \phi_s(t; U) + \varepsilon\delta\phi(t; U)$$

L'expression de la variation du critère devient alors :

$$\delta J(U) = 2 \int_0^{t_f} (\phi_s(t; U) - \phi_p(t)) \delta\phi(t; U) dt \quad \text{II.38}$$

Pour pondérer la sensibilité décroissante du contrôle au cours de l'horizon de temps, on introduit par la suite une fonction de pondération positive $W_1(t)$. On a remarqué que lorsque $W_1(t)$ est prise égale à 1, l'algorithme converge mais avec un nombre d'itérations plus grand et par conséquent, un temps de calcul assez grand. On prendra $W_1(t) = t$.

$$\delta J(U) = 2 \int_0^{t_f} W_1(t) (\phi_s(t; U) - \phi_p(t)) \delta\phi(t; U) dt \quad \text{II.39}$$

II.6 Gradient du critère et problème adjoint

II.6.1 Construction du gradient du critère

Pour déterminer le gradient du critère, on écrit l'équation (II.39) sous la forme de l'équation (II.22). On considère la variation $\delta T(r, t)$ solution des équations (II.31)-(II.36) et on introduit une variable adjointe $P(r, t)$ sur la contrainte (II.31).

$$\int_1^{S_d(t)} \int_0^{t_f} \left[\frac{\partial \delta T(r, t)}{\partial t} - \frac{2}{r} \frac{\partial \delta T(r, t)}{\partial r} - \frac{\partial^2 \delta T(r, t)}{\partial r^2} \right] P(r, t) dt dr = 0 \quad \text{II.40}$$

Pour simplifier cette équation, on pose :

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \int_{S_d(t)}^1 \int_0^{t_f} \frac{\partial \delta T(r, t)}{\partial t} P(r, t) dt dr & I_2 \\
 &= -\frac{2}{r} \int_{S_d(t)}^1 \int_0^{t_f} \frac{\partial \delta T(r, t)}{\partial r} P(r, t) dt dr \\
 I_3 &= - \int_{S_d(t)}^1 \int_0^{t_f} \frac{\partial^2 \delta T(r, t)}{\partial r^2} P(r, t) dt dr
 \end{aligned}$$

Du fait que S_d est une fonction de temps $S_d(t)$, la définition de la dérivée de transport permet d'écrire :

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_{S_d(t)}^1 \delta T(r, t) P(r, t) dr &= \int_{S_d(t)}^1 \frac{\partial \delta T(r, t)}{\partial t} P(r, t) dr + \int_{S_d(t)}^1 \delta T(r, t) \frac{\partial P(r, t)}{\partial t} dr \\
 &\quad + \delta T(S_d(t), t) P(S_d(t), t) \frac{dS_d(t)}{dt}
 \end{aligned}$$

En intégrant cette expression sur l'intervalle du temps $[0, t_f]$, on aura :

$$\begin{aligned}
 \int_{S_d(t_f)}^1 \delta T(r, t_f) P(r, t_f) dr - \int_{S_d(t)}^1 \delta T(r, 0) P(r, 0) dr &= \int_{S_d(t)}^1 \int_0^{t_f} \frac{\partial \delta T(r, t)}{\partial t} P(r, t) dt dr \\
 &\quad + \int_{S_d(t)}^1 \int_0^{t_f} \delta T(r, t) \frac{\partial P(r, t)}{\partial t} dt dr + \int_0^{t_f} \delta T(S_d(t), t) P(S_d(t), t) \frac{dS_d(t)}{dt} dt \\
 \int_{S_d(t)}^1 \int_0^{t_f} \frac{\partial \delta T(r, t)}{\partial t} P(r, t) dt dr &= - \int_{S_d(t)}^1 \int_0^{t_f} \delta T(r, t) \frac{\partial P(r, t)}{\partial t} dt dr + \int_{S_d(t_f)}^1 \delta T(r, t_f) P(r, t_f) dr \\
 &\quad - \int_0^{t_f} \delta T(S_d(t), t) P(S_d(t), t) \frac{dS_d(t)}{dt} dt - \int_{S_d(0)}^1 \delta T(r, 0) P(r, 0) dr
 \end{aligned}$$

L'intégration par parties de I_2 , nous donne :

$$\begin{aligned}
 I_2 = & - \int_0^{t_f} \delta T(1, t) P(1, t) dt + \int_0^{t_f} \frac{1}{S_d(t)} \delta T(S_d(t), t) P(S_d(t), t) dt \\
 & + \int_{S_d(t)}^1 \int_0^{t_f} \left[-\frac{1}{r^2} P(r, t) + \frac{1}{r} \frac{\partial P(r, t)}{\partial r} \right] \delta T(r, t) dt dr
 \end{aligned}$$

Après intégration par parties, on trouve pour I_3 :

$$\begin{aligned}
 I_3 = & - \int_0^{t_f} \frac{\delta T(1, t)}{\partial r} P(1, t) dt + \int_0^{t_f} \frac{\delta T(S_d(t), t)}{\partial r} P(S_d(t), t) dt + \int_0^{t_f} \delta T(1, t) \frac{P(1, t)}{\partial r} dt \\
 & - \int_0^{t_f} \delta T(S_d(t), t) \frac{P(S_d(t), t)}{\partial r} dt + \int_{S_d(t)}^1 \int_0^{t_f} \frac{\partial^2 P(r, t)}{\partial r^2} \delta T(r, t) dt dr
 \end{aligned}$$

En remplaçant I_1 , I_2 et I_3 dans l'équation (II-40), on aura :

$$\begin{aligned}
 & - \int_{S_d(t)}^1 \int_0^{t_f} \left[\frac{\partial P(r, t)}{\partial t} - \frac{2}{r} \frac{\partial P(r, t)}{\partial r} + \frac{\partial^2 P(r, t)}{\partial r^2} + \frac{2P(r, t)}{r^2} \right] \delta T(r, t) dt dr \\
 & + \int_{S_d(t_f)}^1 \delta T(r, t_f) P(r, t_f) dr - \int_0^{t_f} \delta T(S_d(t), t) P(S_d(t), t) \frac{dS_d(t)}{dt} dt \\
 & - \int_{S_d(0)}^1 \delta T(r, 0) P(r, 0) dr \\
 & - \int_0^{t_f} \delta T(1, t) P(1, t) dt \tag{II.41} \\
 & + \int_0^{t_f} \frac{1}{S_d(t)} \delta T(S_d(t), t) P(S_d(t), t) dt - \int_0^{t_f} \frac{\delta T(1, t)}{\partial r} P(1, t) dt \\
 & + \int_0^{t_f} \frac{\delta T(S_d(t), t)}{\partial r} P(S_d(t), t) dt + \int_0^{t_f} \delta T(1, t) \frac{\partial P(1, t)}{\partial r} dt \\
 & - \int_0^{t_f} \delta T(S_d(t), t) \frac{P(S_d(t), t)}{\partial r} dt
 \end{aligned}$$

En utilisant les conditions frontières et initiales (II.33), (II.35) sur δT , et en considérant $P(r, t)$ solution de l'équation entre crochets avec les conditions frontières $P(0, t)$ et $P(r, t_f)$, on aura :

$$\int_0^{t_f} \frac{\delta T(S_d(t), t)}{\partial r} P(S_d(t), t) dt + \int_0^{t_f} \delta T(1, t) \frac{\partial P(1, t)}{\partial r} dt = 0 \quad \text{II.42}$$

En tenant compte de l'équation de la variation de la température à la frontière fixe eq (II.29), ainsi que celle de la variation du flux au front eq (30). L'équation (II.42) sera égale :

$$\int_0^{t_f} \left[P(S_d(t), t) \delta \phi_s(t) + \frac{\partial P(1, t)}{\partial r} \delta U(1, t) \right] dt = 0 \quad \text{II.43}$$

La somme de cette équation et celle de la dérivée directionnelle de J eq. (II.39) montre alors qu'on doit prendre :

$$P(S_d(t), t) = 2W_1(t)(\phi(t, U) - \phi_p(t))$$

La variation du critère J en fonction de la variable P sera égale :

$$(\nabla J(U), \delta U)_V = - \int_0^{t_f} \frac{\partial P(1, t)}{\partial r} \delta U(t) dt \quad \text{II.44}$$

La comparaison des équations (II.44) et (II.22), montre alors que le gradient du critère est égal :

$$\nabla J(U) = - \frac{\partial P(1, t)}{\partial r} \quad \text{II.45}$$

II.6.2 Problème adjoint

Le problème adjoint sera formulé par la fonction $P(r, t)$ et ces conditions aux limites.

$$\frac{\partial P(r, t)}{\partial t} - \frac{2}{r} \frac{\partial P(r, t)}{\partial r} + \frac{\partial^2 P(r, t)}{\partial r^2} + \frac{2P(r, t)}{r^2} = 0. \quad \text{II.46}$$

$$P(1, t) = 0. \quad \text{II.47}$$

$$P(S_d(t), t) = 2W_1(t) \left(\phi(t, U) - \phi_p(t) \right) \quad \text{II.48}$$

$$P(r, t_f) = 0. \quad \text{II.49}$$

II.6.3 Minimisation du critère par la méthode du gradient conjugué

Le développement mathématique donné précédemment présente trois problèmes, qui sont définis par les équations (II.1)-(II.14), (II.31)-(II.36) et (II.46)-(II.49) appelés respectivement problème direct, problème de variation et problème adjoint pour les fonctions $T(r, t)$, $\delta T(r, t)$ et $P(r, t)$ respectivement. Le gradient du critère J est lié à $P(r, t)$ par l'équation (II.45). En utilisant la méthode du gradient conjugué, le contrôle optimal $U(t)$ est déterminé par une procédure basée sur la minimisation du critère J , suivant une approche itérative et avec un choix convenable de la direction de déplacement et de la profondeur de descente pour passer de l'itération n à $n+1$. Dans la méthode du gradient conjugué de Polak et Ribière [93] on considère le schéma itératif suivant :

$$U^{n+1} = U^n - \theta^n d^n \quad \text{II.50}$$

d : la direction de déplacement.

Au départ on prend : $d^1 = \nabla J(t; U)$

$$d^n = \nabla J^n(t; U) + \alpha^n d^{n-1} \quad \text{II.51}$$

$$\alpha^n = \frac{\int_0^{t_f} [\nabla J^n(t; U) - \nabla J^{n-1}(t; U)] \nabla J^n(t; U) dt}{\int_0^{t_f} [\nabla J^{n-1}(t; U)]^2 dt} \quad \text{II.52}$$

θ^n étant la profondeur de descente optimale à l'étape n , obtenue par une procédure de recherche par dichotomie.

II.6.4 Etapes de l'algorithme

Au début on calcule en une seule fois sur l'intervalle de temps $[0, t_f]$ et suivant le cas considéré :

- Le flux $\phi_l(t)$ solution des équations (II.7)-(II.12).
- Le flux $\phi_p(t)$ en utilisant l'équation (II.13) ou l'équation (II.14).

L'algorithme de calcul itératif basé sur la méthode du gradient conjugué consiste à calculer sur l'intervalle de temps $[0, t_f]$ et à chaque itération n

- $T(r, t)$ et $\phi_s(t; U)$ solution des équations (II.1)-(II.6).
- Le critère $J(U^n)$ suivant l'équation (II.17).
- $P(r, t)$ solution des équations (II.46)-(II.49).
- Le gradient du critère $\nabla J(t; U)$
- $\delta T(r, t)$ solution des équations (II.31)-(II.36).
- Le coefficient α^n
- La direction de déplacement d^n
- La profondeur de descente optimale θ^n
- $U^{n+1}(t)$ le nouvel itéré
- On vérifie le principe d'arrêt des itérations

$$|(U^{n-1}) - (U^n)| \leq \varepsilon \quad \text{II.53}$$

ε : est un nombre réel positif, il est choisi petit de telle façon que le critère atteigne la plus petite valeur possible.

II.7 Discrétisation et résolution numérique

La résolution numérique des problèmes direct et adjoint consiste à remplacer les différentielles par des différences finis permettant de calculer pas à pas la température $T(r, t)$ et la variable adjointe $P(r, t)$ en chaque nœud.

Le temps est discrétisé suivant le schéma de différences finies de Crank-Nicolson qui est un schéma implicite inconditionnellement stable. Pour la variable d'espace, il existe deux méthodes de résolution numérique, la méthode à maillage fixe ou mobile décrites dans la section (I.2). Nous avons utilisé la méthode à maillage mobile, elle présente des avantages du point de vue réduction de temps de calcul et précision des résultats.

II.7.1 Transformation de la variable d'espace par la méthode de Landau

Du fait que le front de solidification est mobile au cours du temps, la transformation de Landau [28] permet l'obtention d'un domaine physique de calcul à maillage mobile et le retour ensuite à la variable naturelle r .

$$\xi = \frac{r - 1}{S_d(t) - 1} \quad S_d(t) \leq r \leq 1 \quad \Leftrightarrow \quad 0 \leq \xi \leq 1 \quad \text{II.54}$$

Les dérivées des deux opérateurs de l'équation de la chaleur par rapport à t et r seront égales :

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -\frac{\xi}{(S_d(t) - 1)} \frac{dS_d(t)}{dt} \quad \text{II.55}$$

$$\frac{\partial T(r, t)}{\partial t} = \frac{\partial T(\xi, t)}{\partial t} - \frac{\xi}{(S_d(t) - 1)} \frac{dS_d(t)}{dt} \frac{\partial T(\xi, t)}{\partial \xi} \quad \text{II.56}$$

$$\frac{\partial T(r, t)}{\partial r} = \frac{1}{(S_d(t) - 1)} \frac{\partial T(\xi, t)}{\partial \xi} \quad \text{II.57}$$

$$\frac{\partial^2 T(r, t)}{\partial r^2} = \frac{1}{(S_d(t) - 1)^2} \frac{\partial^2 T(\xi, t)}{\partial \xi^2} \quad \text{II.58}$$

L'écriture des équations, (II.1)-(II.6) dans le nouveau repère (ξ, t) .

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(\xi, t)}{\partial t} - \frac{1}{(S_d(t) - 1)} \left[\xi \frac{dS_d(t)}{dt} + \frac{2}{\xi(S_d(t) - 1) + 1} \right] \frac{\partial T(\xi, t)}{\partial \xi} \\ - \frac{1}{(S_d(t) - 1)^2} \frac{\partial^2 T(\xi, t)}{\partial \xi^2} = 0 \end{aligned} \quad \text{II.59}$$

$$T(1, t) = U(t) \quad \text{II.60}$$

$$T(0, t) = 0 \quad \text{II.61}$$

$$\xi = S(t = 0) = S_0 \quad \text{II.62}$$

$$T(\xi, 0) = T_0(\xi) \quad \text{II.63}$$

$$\phi_s(t) = \frac{1}{(S_d(t) - 1)} \frac{\partial T(0, t)}{\partial \xi} \quad \text{II.64}$$

Les équations (II.31)-(II.36) du problème de variation s'écrivent dans le nouveau repère

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta T(\xi, t)}{\partial t} - \frac{1}{(S_d(t) - 1)} \left[\xi \frac{dS_d(t)}{dt} + \frac{2}{\xi(S_d(t) - 1) + 1} \right] \frac{\partial \delta T(\xi, t)}{\partial \xi} \\ - \frac{1}{(S_d(t) - 1)^2} \frac{\partial^2 \delta T(\xi, t)}{\partial \xi^2} = 0 \end{aligned} \quad \text{II.65}$$

$$\delta T(1, t) = \delta U(t) \quad \text{II.66}$$

$$\delta T(0, t) = 0 \quad \text{II.67}$$

$$\delta S(t = 0) = 0 \quad \text{II.68}$$

$$\delta T(\xi, 0) = 0 \quad \text{II.69}$$

$$\delta \phi_s(t) = \frac{1}{(S_d(t) - 1)} \frac{\partial \delta T(0, t)}{\partial \xi} \quad \text{II.70}$$

De même, les équations (II.46)-(II.49) s'écrivent dans ce nouveau repère comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\xi, t)}{\partial t} - \frac{1}{(S_d(t) - 1)} \left[\xi \frac{dS_d(t)}{dt} + \frac{2}{\xi(S_d(t) - 1) + 1} \right] \frac{\partial P(\xi, t)}{\partial \xi} \\ + \frac{1}{(S_d(t) - 1)^2} \frac{\partial^2 P(\xi, t)}{\partial \xi^2} + \frac{2}{\xi(S_d(t) - 1) + 1} P(\xi, t) = 0 \end{aligned} \quad \text{II.71}$$

$$P(0, t) = 0. \quad \text{II.72}$$

$$P(1, t) = 2W_1(t) (\phi(t, U) - \phi_p(t)) \quad \text{II.73}$$

$$P(\xi, t_f) = 0. \quad \text{II.74}$$

II.7.2 Résolution numérique du problème direct

On discrétise la variable d'espace ξ suivant le schéma de différences fines classique.

$$\left[\frac{\partial T}{\partial \xi} \right]_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{T_{i+1}^{k+\frac{1}{2}} - T_i^{k+\frac{1}{2}}}{2\Delta\xi} \quad \text{II.75}$$

$$\left[\frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} \right]_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{T_{i+1}^{k+\frac{1}{2}} - 2T_i^{k+\frac{1}{2}} + T_{i-1}^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta\xi^2} \quad \text{II.76}$$

D'après le schéma de Crank-Nicolson on a :

$$\left[\frac{\partial T}{\partial t} \right]_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{T_i^{k+1} - T_i^k}{\Delta t} \quad \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{S^{k+1} - S^k}{\Delta t} \quad \text{II.77}$$

Soit l'approximation pour une variable f .

$$f_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{T_i^{k+1} + T_i^k}{2} \quad \text{II.78}$$

En utilisant cette approximation, pour calculer $S^{k+\frac{1}{2}}$ et $T_i^{k+\frac{1}{2}}$ avec:

$$A = \left(\frac{\Delta t}{2\Delta\xi} \right) \frac{1}{\left[\frac{S_d^{k+1} + S_d^k}{2} - 1 \right]} \left[\xi \left(\frac{S_d^{k+1} - S_d^k}{\Delta t} \right) + \frac{2}{\xi \left(\frac{S_d^{k+1} + S_d^k}{2} - 1 \right) + 1} \right] \quad \text{II.79}$$

$$B = \left(\frac{\Delta t}{\Delta\xi^2} \right) \left(\frac{1}{(S_d(t) - 1)^2} \right) \quad \text{II.80}$$

$$C = \left(\frac{2\Delta t}{\xi(S_d(t) - 1) + 1} \right) \quad \text{II.81}$$

Les équations (II.59) à (II.64) prendront les formes suivantes :

Pour $i = 1, im$ et $k = 1, km$

$$\begin{aligned} T_{i+1}^{k+1}(-A - B) + T_i^{k+1}(2 + 2B) + T_{i-1}^{k+1}(A - B) \\ = T_{i+1}^k(A + B) + T_i^k(2 - 2B) + T_{i-1}^k(-A + B) \end{aligned} \quad \text{II.82}$$

$$T_1^k = U(t^k) \quad \text{II.83}$$

$$T_{im}^k = 0 \quad \text{II.84}$$

$$T_i^1 = T_0(\xi_i) \quad \text{II.85}$$

$$S(0) = S_0 \quad \text{II.86}$$

Pour calculer le flux au front, nous utilisons une dérivée décentrée à trois points.

$$\phi_s(t) = \frac{1}{(S_d^k - 1)} \left[\frac{\partial T}{\partial \xi} \right]_1^k = \frac{1}{(S_d^k - 1)} \frac{(-3T_1^k + 4T_2^k - T_3^k)}{2\Delta\xi} \quad \text{II.87}$$

Sachant que :

$$T_1^k = 0. \quad \phi_s(t) = \frac{1}{(S_d^k - 1)} \frac{(+4T_2^k - T_3^k)}{2\Delta\xi} \quad \text{II.88}$$

II.7.3 Résolution numérique du problème de variation

De la même façon, On discrétise la variable d'espace ξ suivant le schéma de différences fines classique. Les équations (II.65) à (II.70) prendront les formes suivantes :

Pour $i = 1, im$ et $k = 1, km$

$$\begin{aligned} \delta T_{i+1}^{k+1}(-A - B) + \delta T_i^{k+1}(2 + 2B) + \delta T_{i-1}^{k+1}(A - B) \\ = \delta T_{i+1}^k(A + B) + \delta T_i^k(2 - 2B) + \delta T_{i-1}^k(-A + B) \end{aligned} \quad \text{II.89}$$

$$\delta T_1^k = \delta U(t^k) \quad \text{II.90}$$

$$\delta T_{im}^k = 0 \quad \text{II.91}$$

$$\delta T_i^1 = 0 \quad \text{II.92}$$

$$S(0) = S_0 \quad \text{II.93}$$

$$\delta \phi_s(t) = \frac{1}{(S_d^k - 1)} \frac{(+4\delta T_2^k - \delta T_3^k)}{2\Delta\xi} \quad \text{II.94}$$

II.7.4 Résolution numérique de l'équation adjointe

Les mêmes approximations et les mêmes notations seront utilisées pour la résolution du problème adjoint. Les équations (II.71) à (II.74) subiront la transformation suivante :

$$\begin{aligned} P_{i+1}^{k+1}(-A + B) + P_i^{k+1}(2 - 2B + C) + P_{i-1}^{k+1}(A + B) \\ = P_{i+1}^k(-A + B) + P_i^k(2 + 2B - C) + P_{i-1}^k(-A - B) \end{aligned} \quad \text{II.95}$$

$$P_1^k = 0. \quad \text{II.96}$$

$$P_{im}^k = 2W_1(t) (\phi(t, U) - \phi_p(t)) \quad \text{II.97}$$

$$P_i^{km} = 0 \quad \text{II.98}$$

La résolution de ce système d'équation se fait à rebours à partir de la condition finale connue.

L'expression discrétisée du gradient du critère est donnée par :

$$\nabla J(t; U) = -\frac{1}{(S_d^k - 1)} \left[\frac{\partial P}{\partial \xi} \right]_{im}^k \quad \text{II.99}$$

En utilisant la dérivée décentrée à trois points, on obtient :

$$\nabla J(t; U) = -\frac{1}{(S_d^k - 1)} \frac{(3P_{im}^k - 4P_{im-1}^k + P_{im-2}^k)}{2\Delta\xi} \quad \text{II.100}$$

II.7.5 L'algorithme de Thomas

Les équations (II.80) -(II.84), (II.87) -(II.92) et (II.93) -(II.96) seront résolues par l'algorithme de Thomas défini comme suit :

$$\begin{bmatrix} \beta_0 & \gamma_0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_1 & \beta_1 & \gamma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_{imax} & \beta_{imax} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^{k+1} \\ T_1^{k+1} \\ T_2^{k+1} \\ \cdot \\ T_{imax}^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_0^{k+1} \\ D_1^{k+1} \\ D_2^{k+1} \\ \cdot \\ D_{imax}^{k+1} \end{bmatrix} \quad \text{II.101}$$

On transforme la matrice A en une matrice tridiagonale à termes diagonaux tous égaux à 1.

$$\begin{bmatrix} 1 & S_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & S_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & S_2 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^{k+1} \\ T_1^{k+1} \\ T_2^{k+1} \\ \cdot \\ T_{imax}^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_0^k \\ E_1^k \\ E_2^k \\ \cdot \\ E_{imax}^k \end{bmatrix} \quad \text{II.102}$$

Quand on y parvient on a :

$$\begin{cases} T_i^{k+1} = E_i^k - S_i T_{i+1}^{k+1} \\ T_{i-1}^{k+1} = E_{i-1}^k - S_i T_i^{k+1} \end{cases} \quad \text{II.103}$$

Par ailleurs le système (II.99) s'écrit pour la ligne i :

$$T_{i-1}^{k+1} + \beta_i T_i^{k+1} + \gamma_{i+1} T_{i+1}^{k+1} = D_i^k \quad \text{II.104}$$

après substitution de T_{i-1}^{k+1} , on obtient:

$$T_i^{k+1} = \frac{D_i^k - \alpha_i E_{i-1}^k}{\beta_i - \alpha_i S_{i-1}} - \frac{\gamma_i}{\beta_i - \alpha_i S_{i-1}} T_{i+1}^{k+1} \quad \text{II.105}$$

D'où

:

$$E_i^k = \frac{D_i^k - \alpha_i E_{i-1}^k}{\beta_i - \alpha_i S_{i-1}} \quad \text{et} \quad S_i = \frac{\gamma_i}{\beta_i - \alpha_i S_{i-1}} T_{i+1}^{k+1} \quad \text{II.106}$$

II.8 Résultats

Pour montrer la précision et la fiabilité du modèle numérique direct et ensuite l'algorithme d'optimisation, nous avons construit la solution exacte particulière suivante :

$$T_f = 0. \qquad t_f = 1. \qquad S_0 = -0.1$$

$$T_0(r) = \frac{1}{r} [\exp(-0.2r) - \exp(-0.2)]$$

$$S_d(t) = \frac{(0.4t - 0.2)}{0.2}$$

La solution exacte est :

$$U(t) = \exp(-0.4t - 0.2) + \exp(-0.2) \qquad T(r, t) = -\frac{1}{r} [\exp(-0.4t - 0.2) - \exp(-0.2)]$$

II.8.1 Précision du modèle numérique direct

La précision du modèle numérique direct a une grande influence sur le résultat final de calcul. Pour valider les résultats du modèle direct, nous avons pris les valeurs exactes suivantes : $T_f, t_f, S_0, T_0(r), S_d(t), U(t)$

$$\text{Pour déterminer : } \left. \begin{matrix} T(r, t) \\ \phi_s(t) \end{matrix} \right\} \begin{cases} 0 \leq r \leq 1 \\ 0 \leq t \leq t_f \end{cases}$$

Dans le tableau (II.1), On donne l'erreur relative du flux $\phi_s(t)$ à la frontière mobile. Le modèle numérique direct est d'une très grande précision même avec des pas d'espaces et de temps importants.

Δt \ Temps	2.E-2	1.E-2	5.E-3
2.E-1	4.05E-4	2.2E-4	1.2E-4
4.E-1	9.0E-4	4.5E-4	2.2E-4
6.E-1	1.4E-3	6.8E-4	3.5E-4
8.E-1	1.8E-3	9.1E-4	4.5E-4
1.	2.5E-3	1.2E-3	6.2E-4

Tableau (II-1) Erreur relative sur le flux au front

II.9 Validation du problème de contrôle

II.9.1 Cas des données exactes non bruitées

L'algorithme d'optimisation utilisé pour déterminer le contrôle optimal $U(t)$ assurant une évolution désirée du front $S_d(t)$ à été testé pour les deux cas suivants :

- Lorsque la fonction de pondération ($w(t) = 1.$), l'algorithme converge mais avec un grand nombre d'itérations.
- L'introduction de la fonction de pondération ($w(t)=t$), permet à l'algorithme de converger rapidement avec moins d'itérations. Voir tableau (II-2)

En conséquence, La fonction de pondération à une influence sur le temps de calcul et le nombre d'itérations.

Critère J sans fonction de pondération						
N	1	10	50	100	150	241
J_n	1.96E-2	1.50E-2	1.02E-2	7.88E-3	6.35E-3	1.64E-2
Critère J avec fonction de pondération						
N	1	10	20	30	50	54
J_n	6.03E-3	9.33E-6	6.91E-6	3.96E-6	3.94E-6	3.94E-6

Tableau (II-2) Valeur du critère J aux itérations n
(données exactes).

Dans le cas des données exactes non bruitées, un examen des valeurs des figures (II.2) à (II.7) nous révèlent que les résultats du contrôle $U(t)$ et du flux à la frontière fixe $\phi(0,t)$ sont obtenus avec une très grande précision sur 90% de l'horizon de temps. Par contre, comme il est connu pour les méthodes globales d'optimisation, lorsque t est proche de t_f l'erreur est importante. En effet, les valeurs de la variable adjointe sont nulles ($P(x,t_f) = 0.$) par

conséquent le gradient du critère au temps t_f sera aussi nul et la valeur du contrôle ne sera pas modifiée.

Dans la même figure, on remarque que l'estimation du contrôle initial (initial guess) permet de réduire le nombre d'itération.

- Contrôle initial (initial guess) non estimé (fig. II.2)
- Estimation du contrôle initial (initial guess) :

Une amélioration des résultats sur la totalité de l'intervalle considéré du processus thermique dépend non seulement de l'état final mais aussi de l'initial guess. Cette dernière ne doit pas être choisie de façon arbitraire, elle doit vérifier les conditions suivantes :

1. Appartenir au domaine des solutions admissibles.
2. Obéir aux lois de transfert de chaleur.
3. Avoir la même allure que la solution recherchée.

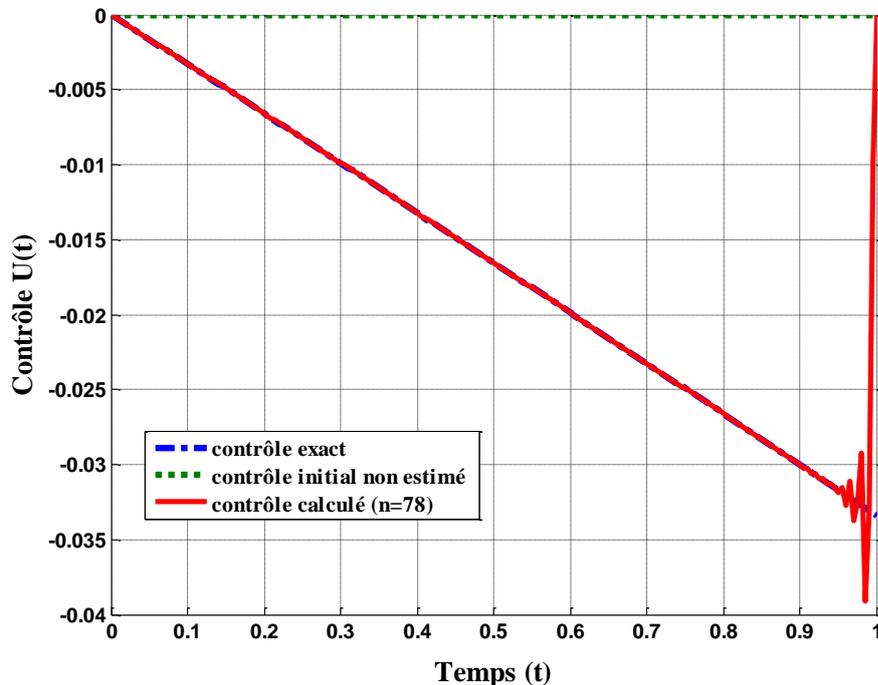


Figure (II-2) Contrôle exact et calculé (données exactes)

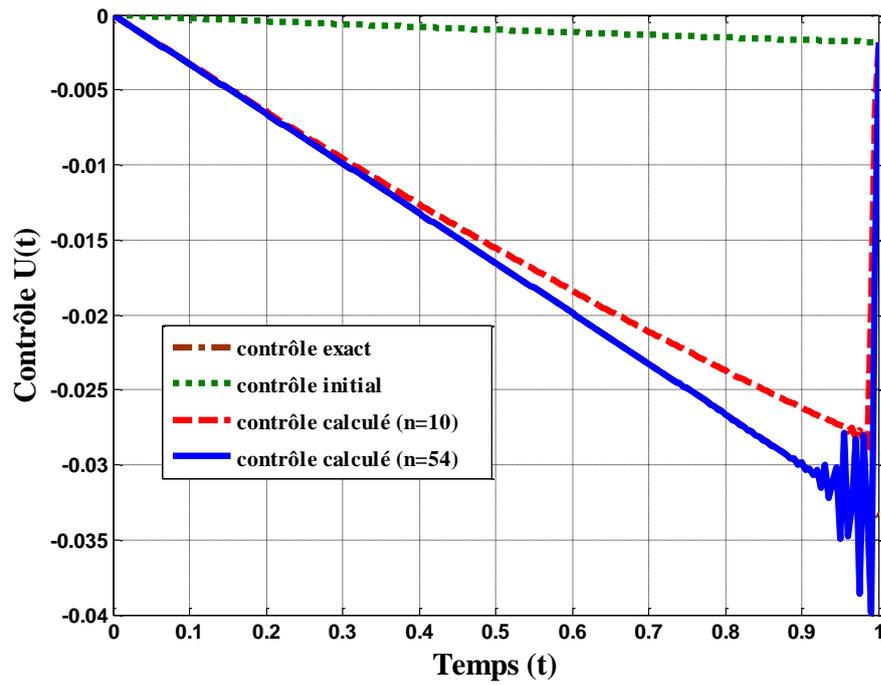


Figure (II-3) Contrôle exact et calculé
(données exactes)

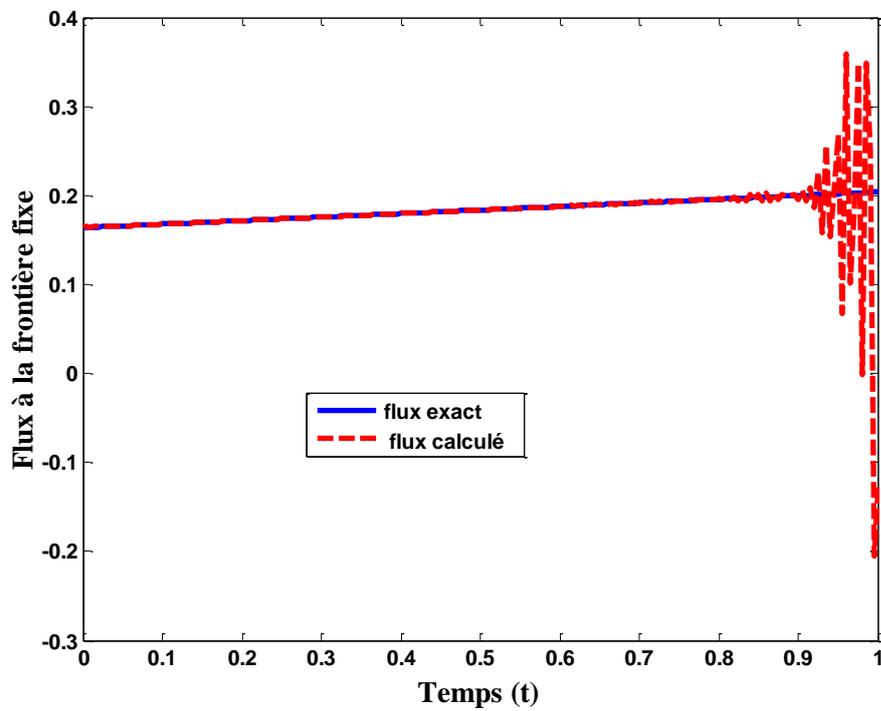


Figure (II-4) flux exact et calculé
(données exactes)

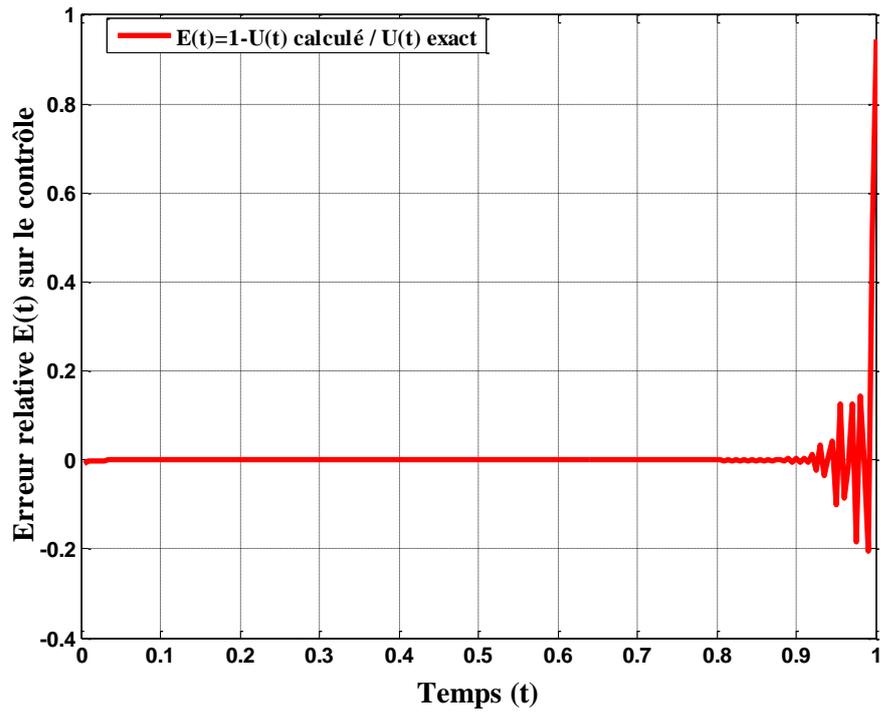


Figure II-5) erreur relative sur le contrôle exact et calculé (données exactes)

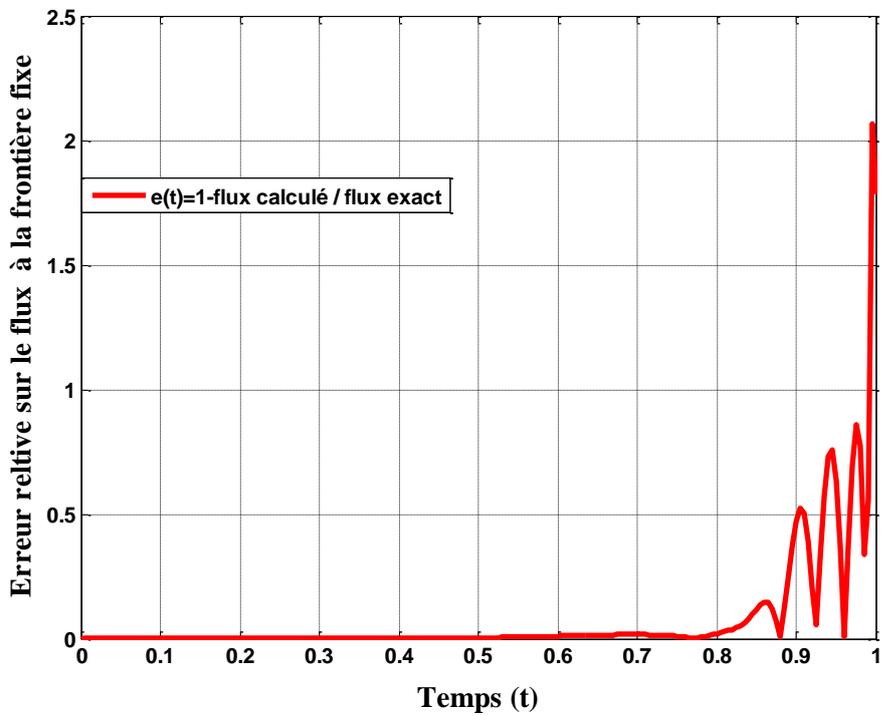


Figure (II-6) erreur relative sur le flux à la frontière fixe (données exactes)

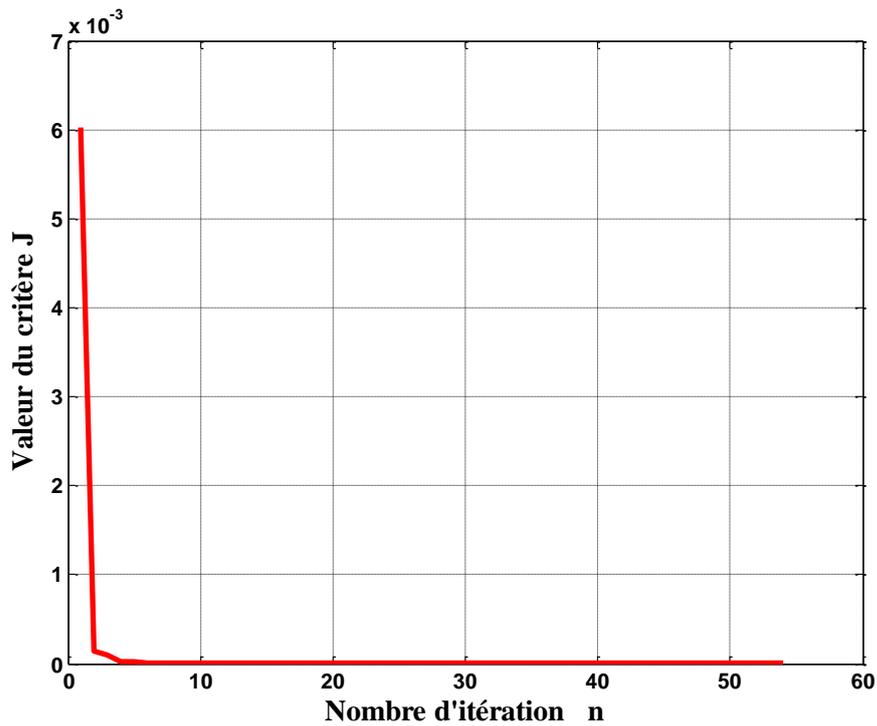


Figure (II-7) Valeur du critère (données exactes)

II.9.2 Cas de données exactes bruitées

Comme il a été montré ci-dessus, le flux $\phi_p(t)$ est généré par calcul (résolution de l'équation de la chaleur dans le domaine liquide). Il dépend de la condition frontière $T(0,t)$. En Pratique, lorsqu'on utilise cette condition frontière et le contrôle $U(t)$ pour contrôler le processus de solidification, il faudrait s'attendre à l'existence des erreurs de mesure. Le flux $\phi_p(t)$ calculé dans ce cas sera en réalité différent du flux exact. Le passage à un cas expérimental induit alors des erreurs. Pour simuler ces erreurs et générer des données de flux $\phi_p(t)$ proche de la réalité, un bruit blanc $b(t)$ est ajouté à la donnée $\phi_p(t)$ et ayant comme amplitude maximale 5% $\phi_p(t)$.

$$\phi_p(t) = \phi_p(t)_{\text{exact}} + b(t) \quad \text{avec} \quad b(t) = \gamma(t)(0.05)\phi_{\text{ref}} \quad \text{II.107}$$

$\gamma(t)$ est une variable aléatoire avec une densité de probabilité uniforme sur $[-1, 1]$ et ϕ_{ref} est tel que:

$$\phi_{\text{ref}} = \frac{\phi_p(t_f)_{\text{exact}} + \phi_p(0)_{\text{exact}}}{2}$$

Le tableau (II-3) présente les valeurs du critère J aux itérations n.

N	1	3	6	9	10
J _n	6.06E-3	2.03E-4	2.34E-4	1.27E-4	1.09E-4

Tableau (II-3) valeurs du critère J aux itérations n.
(données exactes bruitées)

Les figures (II.8)-(II.11) montrent que les méthodes inverses sont sensibles aux erreurs. Le bruit blanc ajouté à la donnée $\phi_p(t)$ et ayant une amplitude maximale 5% a provoqué des oscillations importantes sur les résultats. L'erreur relative est de l'ordre de 20% et 30% respectivement sur le contrôle calculé $U(t)$ et le flux $\phi_0(t)$ (flux à la frontière fixe). Cela est dû au caractère mal-posé du problème. Par conséquent ces résultats ne sont pas satisfaisants. Selon Alivanov [51] le cas de données bruitées, le critère d'arrêt du calcul doit satisfaire la condition suivante :

$$| J(U_{n+1}) - J(U_n) | < \varepsilon \quad \text{où} \quad \varepsilon : \text{est l'amplitude maximale du bruit}$$

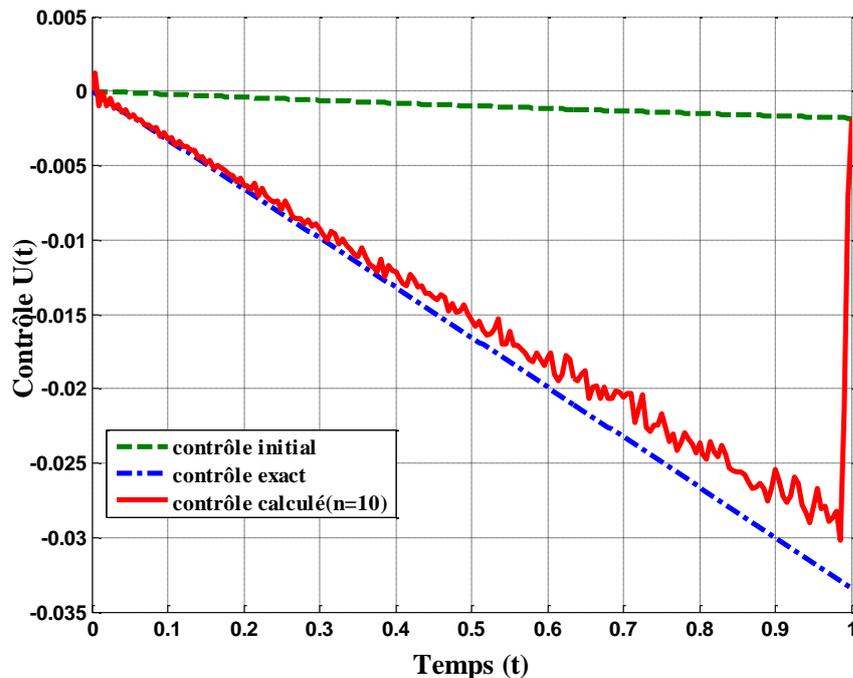


Figure (II-8) Contrôle exact et calculé
(données exactes bruitées)

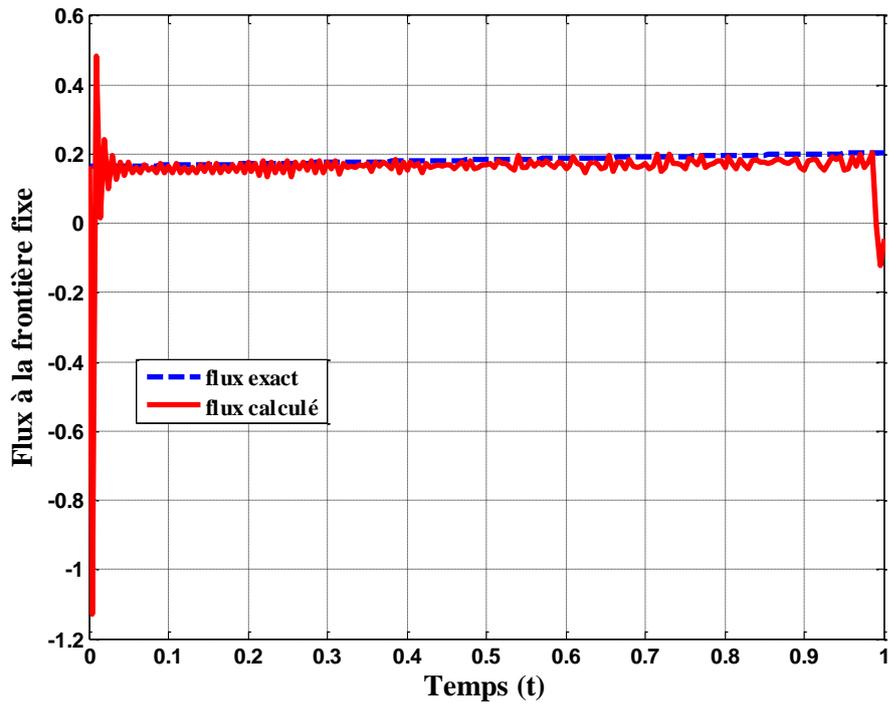


Figure (II-9) flux exact et calculé
(données exactes bruitées)

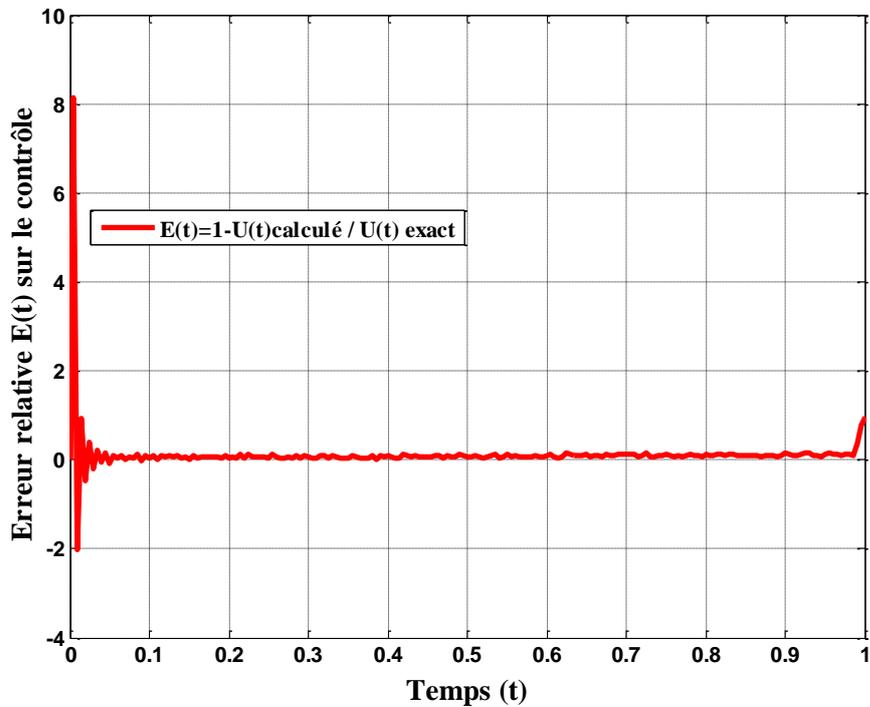


Figure (II-10) erreur relative sur le contrôle
(données exactes bruitées)

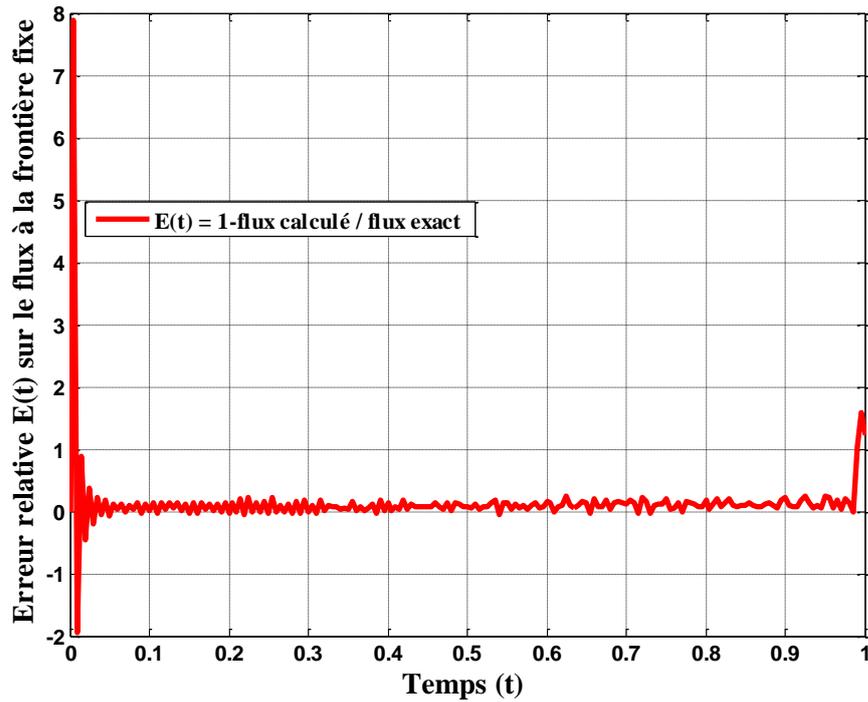


Figure II-11 erreur relative sur le flux à la frontière fixe (données exactes bruitées)

II.9.3 Cas de données filtrées

Il existe trois possibilités de filtrages.

- Le filtrage des données initiales $\phi_p(t)$.
- Le filtrage des itérés $U^n(t)$
- Le filtrage à chaque itération de l'écart $y_n(t)$ où $y_n(t)$ est donné par l'équation suivante :

$$y_n(t) = \phi_s(t, U) - (\phi_p(t)_{\text{exact}} - b(t)) \quad \text{II.109}$$

On a remarqué que le filtrage des données initiales $\phi_p(t)$ ou bien des itérés $U^n(t)$ génèrent un biais sur le résultat final du contrôle $U^n(t)$. Il est donc préférable de filtrer à chaque itération de l'écart $y_n(t)$. On utilise pour cela un filtre glissant qui permet de calculer le signal filtré $e_n(t)$ suivant l'équation récurrente.

$$e_n(t) = \tilde{e}_{n,k} + \frac{1}{k+1} (y_{n,k+1} - \tilde{e}_{n,k}) \quad \text{II.110}$$

où

$$\tilde{\epsilon}_{n,k} = \frac{\sum_{i=k-j+1}^k (y_{n,i})}{j} \quad \text{II.111}$$

j est un nombre choisi de pas de temps précédant l'instant t^k .

Les valeurs du critère J aux itérations n sont portées sur le tableau (II-4).

n	1	2	4	6	7	8
J	6.64E-3	3.77E-3	1.07E-3	3.15E-4	1.28E-4	1.10E-3

Tableau (II-4) valeurs du critère J aux itérations n .
(données filtrées)

En comparant les résultats des figures (II.12) à (II.15) et celles du cas précédent, on remarque que Le filtrage à chaque itération de l'écart $y_n(t)$ donne des résultats satisfaisants sans pour cela qu'il génère un biais. L'amplitude des oscillations a diminué relativement au cas précédent. L'erreur relative est réduite à 5% sur le contrôle calculé $U(t)$ et 20% sur le flux $\phi(0,t)$.

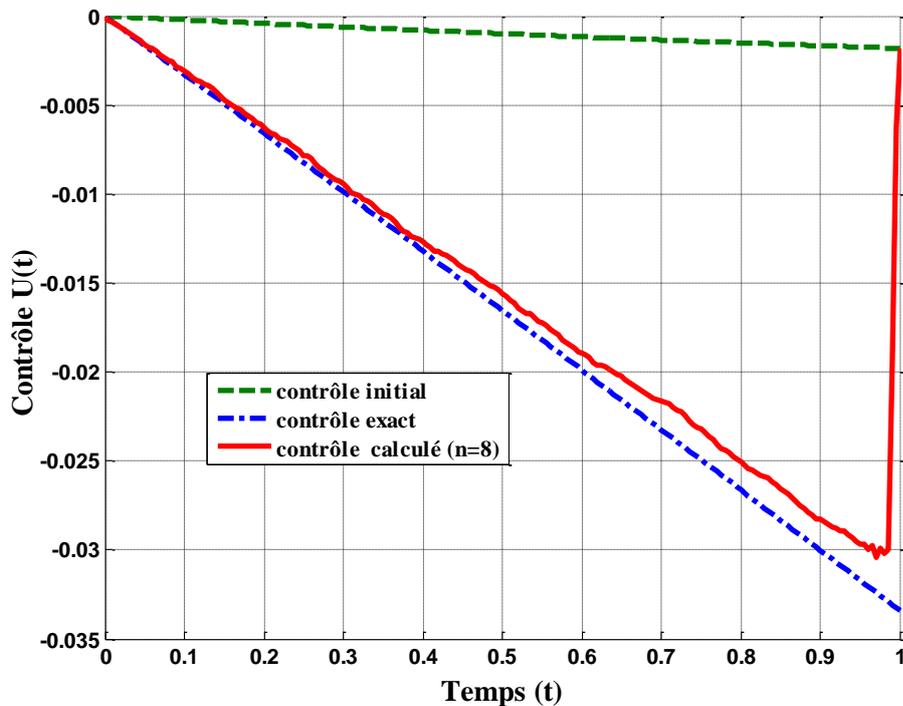


Figure (II-12) Contrôle exact et calculé
(données filtrées)

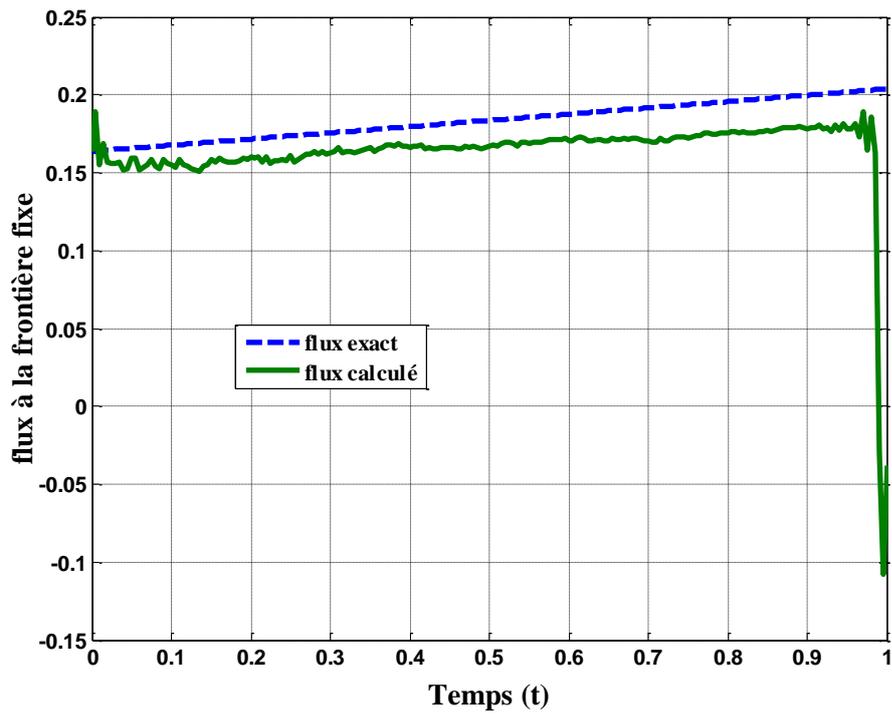


Figure II-13) flux exact et calculé
(données filtrées)

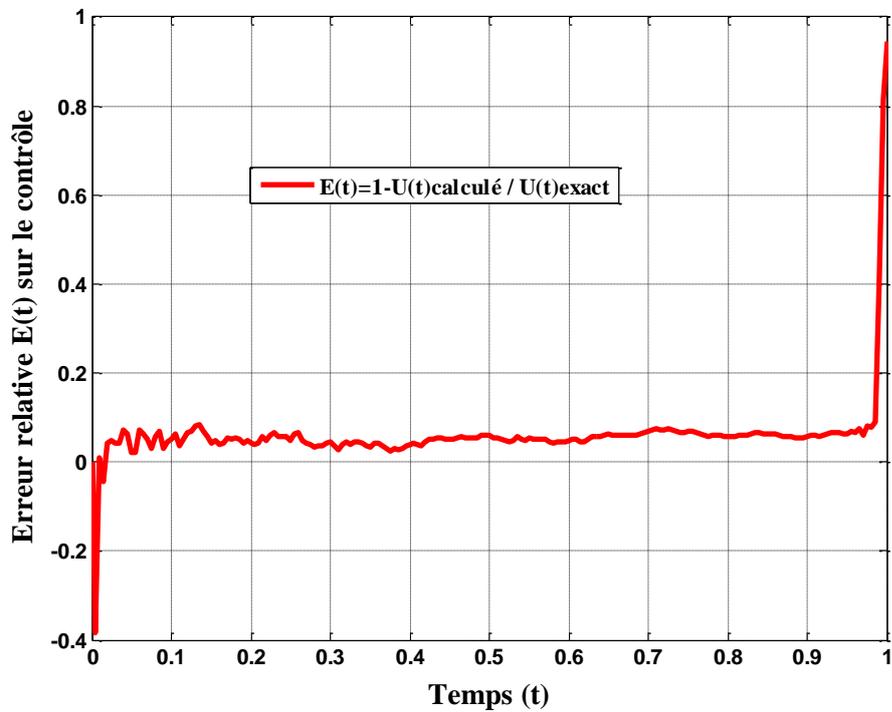


Figure (II-14) erreur relative sur le contrôle
(données filtrées)

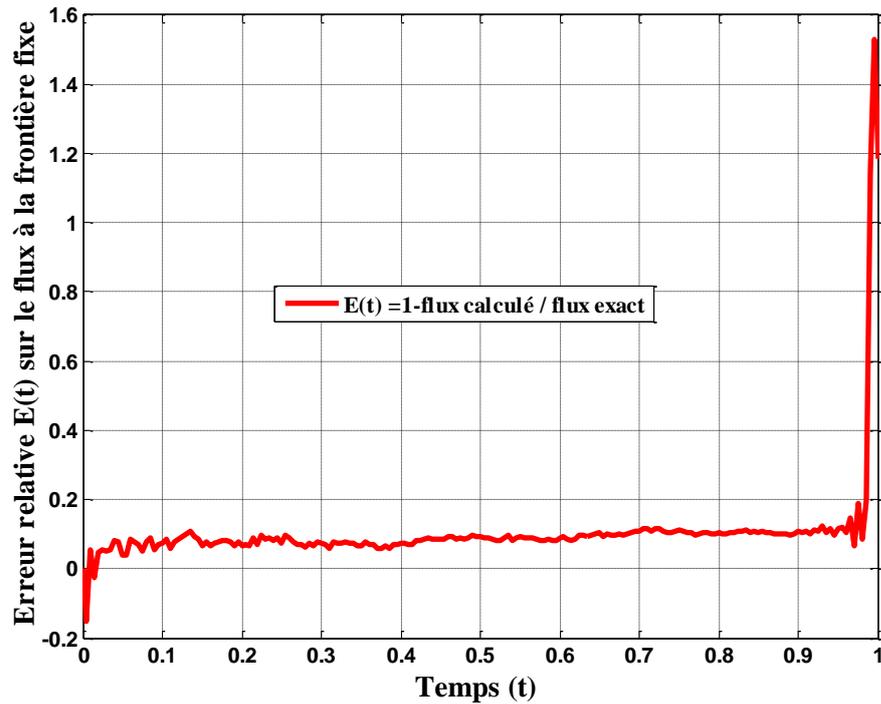


Figure II-15) erreur relative sur le flux à la frontière fixe (données filtrées)

II.9.4 Cas du problème régularisé

Dans le cas de données bruitées, les résultats obtenus du contrôle ne sont pas précis. Dans le but de les améliorer relativement à ce qu'on a obtenu par filtrage, une méthode de régularisation préconisée par Tikhonov et al [52] sera appliquée. Elle consiste à ajouter au critère un terme de pénalisation qui maintient $U(t)$ dans un sous-espace de fonctions et qui contrôle sa vitesse de variation. Cette méthode permet d'améliorer la précision du contrôle U obtenu lorsque les données sont bruitées. Le critère devient alors :

$$J(U) = J_1(U) + J_2(U) \quad \text{II.112}$$

$$J_2(U) = \eta \int_0^{t_f} \left(\frac{dU(t)}{dt} \right)^2 dt \quad \text{II.113}$$

où $w_2(t)$ est une fonction de pondération et η est un paramètre de régularisation (réel positif).

En appliquant la définition de la dérivée directionnelle au point U dans la direction δU , δJ_2 correspond à :

$$D_{\delta U} J_2(U) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{J_2(U + \varepsilon \delta U) - J_2(U)}{\varepsilon} \quad \text{II.114}$$

Après passage à la limite le développement de $\nabla J_2(t; U)$ sera donné par :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} [J_2(\ ; U + \varepsilon \delta U) - J_2(\ ; U)] = 2\eta \int_0^{t_f} w_2(t) \dot{U}(t) \delta \dot{U}(t) dt \quad \text{II.115}$$

Après intégration par parties et sachant que :

$$\delta U(0) = 0 \quad w_2(t) = (t_f - t) \quad w_2(t_f) = 0. \quad \text{II.116}$$

On aura :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} [J_2(\ ; U + \varepsilon \delta U) - J_2(\ ; U)] = -2\eta \int_0^{t_f} [-\dot{U}(t) + (t_f - t)\ddot{U}(t)] \delta U dt \quad \text{II.117}$$

$$J_2(U) = -2\eta \int_0^{t_f} [-\dot{U}(t) + (t_f - t)\ddot{U}(t)] \delta U dt \quad \text{II.118}$$

Lorsqu'on réécrit l'équation du gradient sous la forme (20), en utilisant les équations de la section (II.5), on obtiendra l'expression du nouveau gradient du critère :

$$\nabla J(t; U) = -\frac{P(1, t)}{\partial r} - 2\eta [-\dot{U}(t) + (t_f - t)\ddot{U}(t)] \quad \text{II.119}$$

L'expression du gradient discret du critère aura la forme suivante

$$\nabla J(t; U) = -\frac{1}{(S_d^k - 1)} \frac{(3P_{im}^k - 4P_{im-1}^k + P_{im-2}^k)}{2\Delta\xi} - 2\eta \left[-\frac{U^{k+1} - U^k}{2\Delta t} + (t^{km} - t^k) \frac{U^{k+1} - 2U^k + U^{k-1}}{\Delta t^2} \right] \quad \text{II.120}$$

Le choix du paramètre η est fait heuristiquement par des essais successifs tout en inspectant la régularité de la solution. En effet, on commence le calcul par une valeur petite de η et par des essais successifs de

valeur croissante de celle-ci, on obtient un maximum de régularité qui correspond à sa valeur optimale. Si η est pris supérieur à sa valeur optimale, il engendrerait un biais sur la solution finale.

Les valeurs du critère aux différentes itérations sont données sur le tableau (II-5).

n	1	10	50	100	162
J_n	5.26E-3	2.53E-3	9.75E-4	9.67E-4	2.83E-4

Tableau (II-5) valeurs du critère J aux itérations n.
(Problème régularisé)

Les figures (II-16) à (II-19) montrent que les amplitudes des oscillations de $U(t)$ et $\phi(0,t)$ diminuent encore et que $U(t)$ se stabilise au cours du temps. Sur les figures (II-20) et (II-21), on compare les résultats finaux pour les cas de données bruitées non traitées, de données filtrées ainsi que ceux du problème régularisé. Les meilleurs résultats sont obtenus dans le cas du problème régularisé.

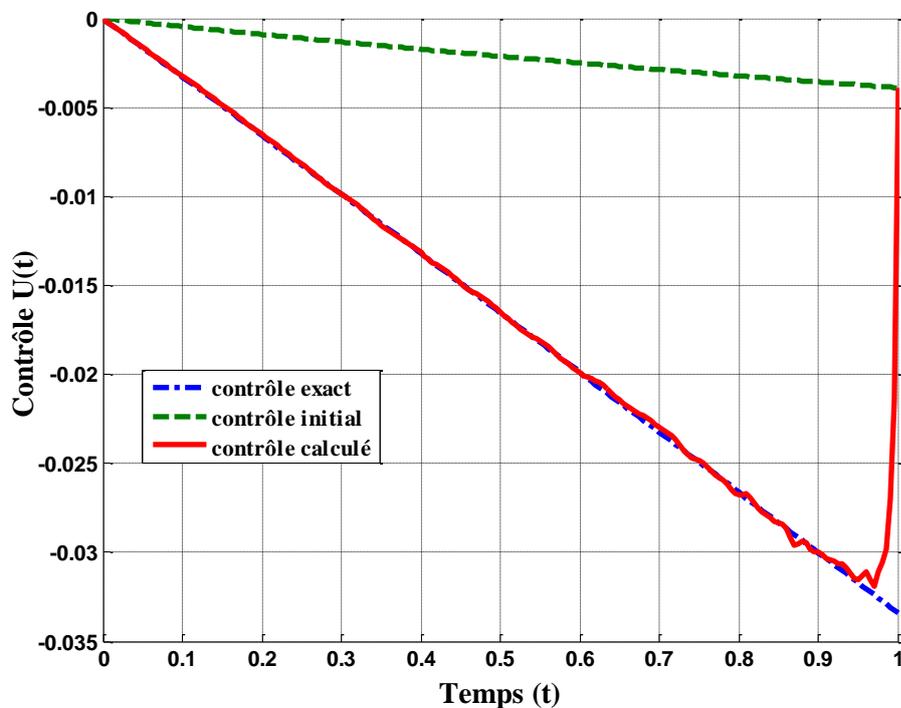


Figure II-16) Contrôle exact et calculé
(Problème régularisé)

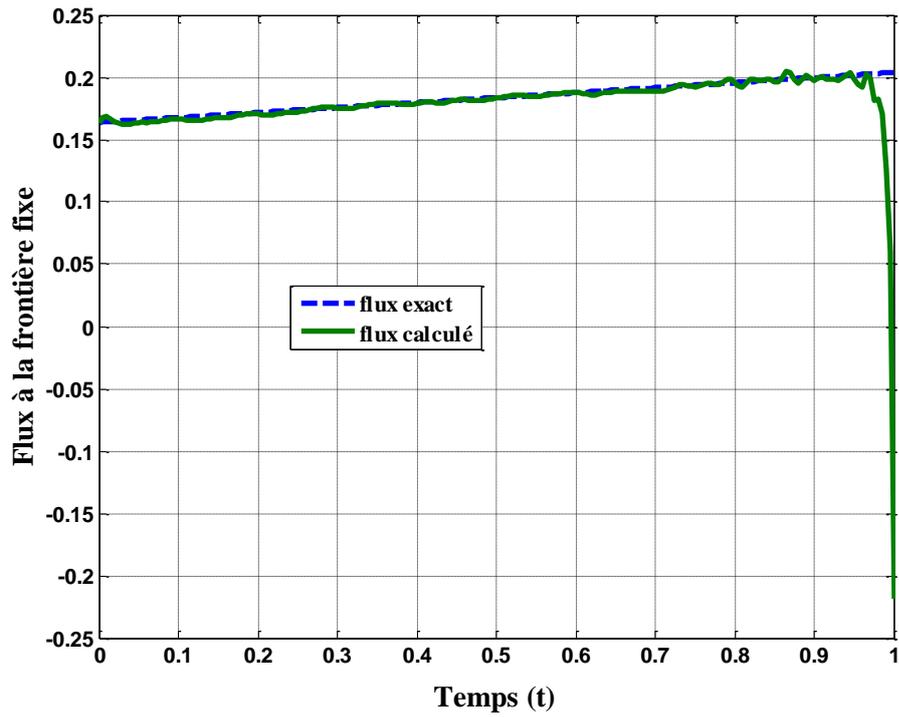


Figure (II-17) flux à la frontière fixe
(Problème régularisé)

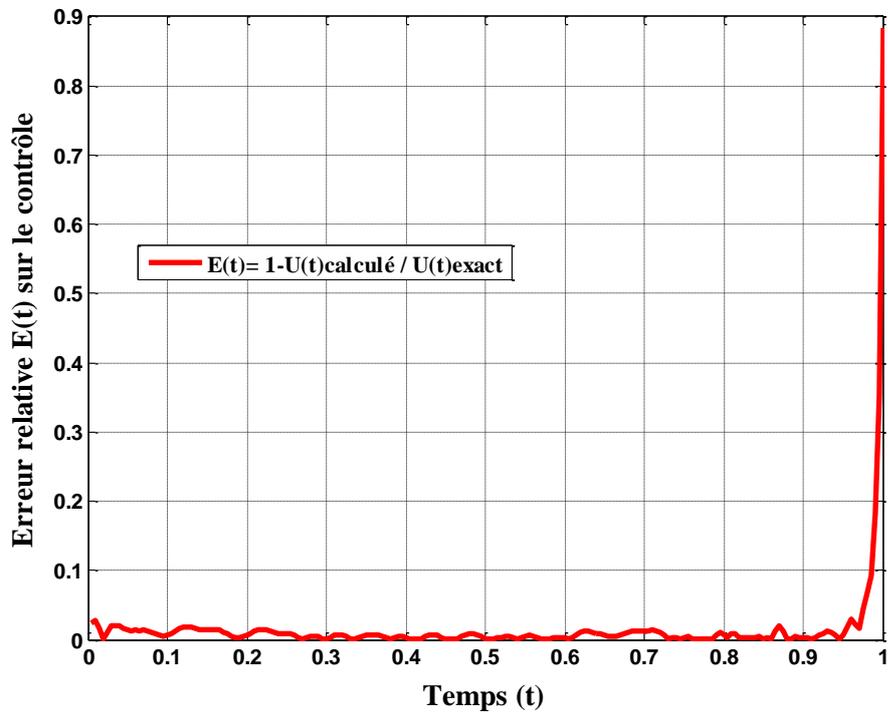


Figure (II-18) erreur relative sur le contrôle
(Problème régularisé)

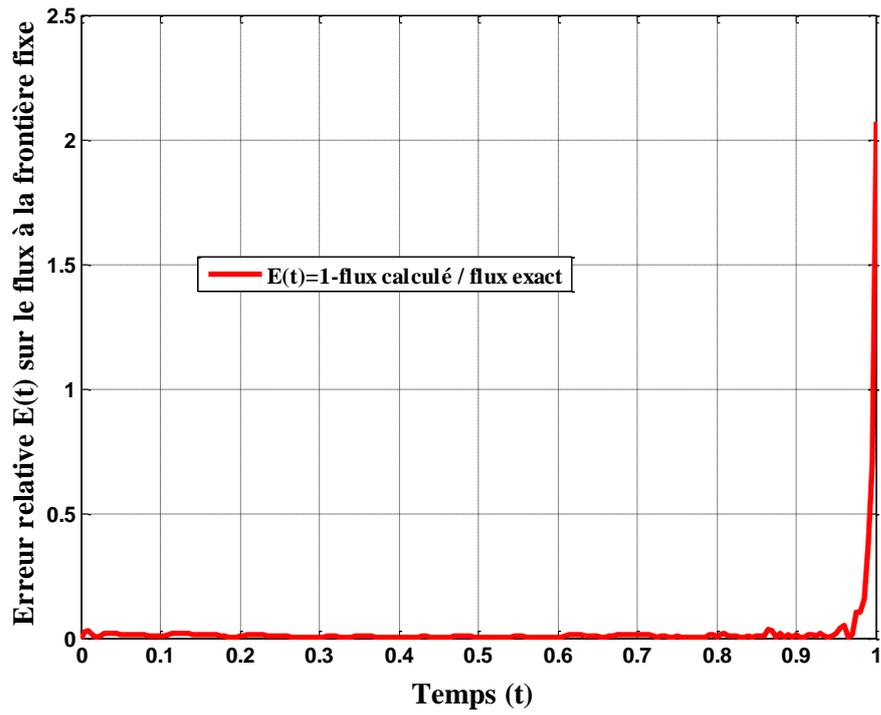


Figure (II-19) erreur relative sur le flux à la frontière fixe (Problème régularisé)

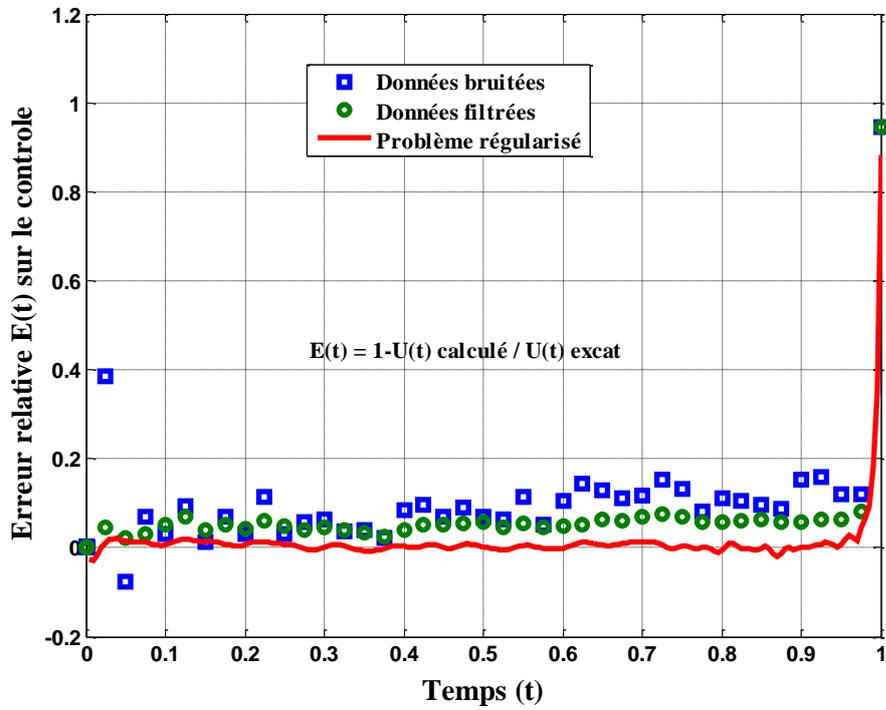


Figure (II-20) Erreur relative sur le contrôle

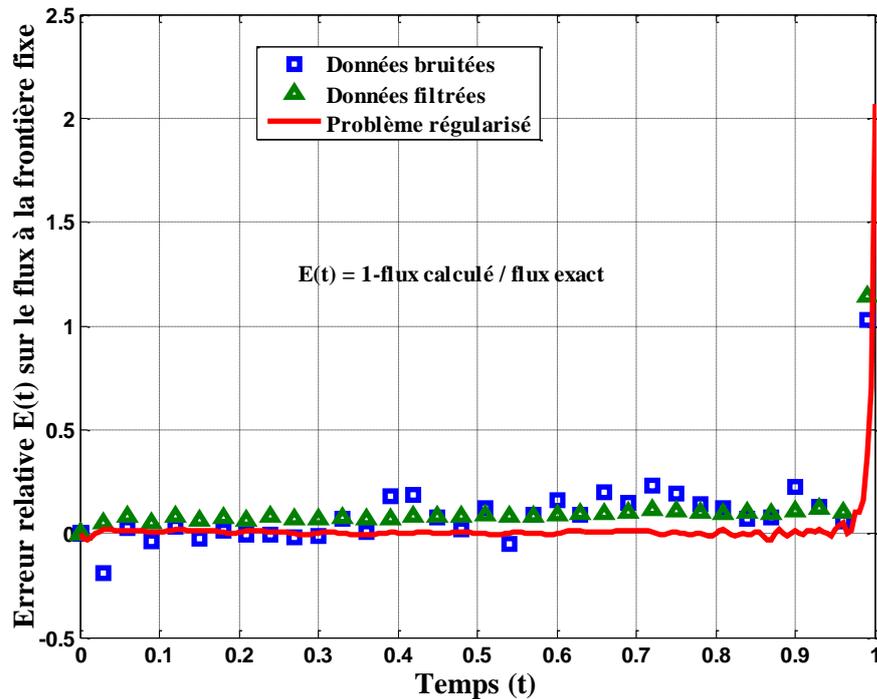


Figure (II-21) erreur relative sur le flux à la frontière fixe

II.10 Conclusion

Une méthode inverse pour le contrôle de l'évolution du front de solidification d'un matériau pur dans un problème unidimensionnel non-linéaire a été présentée. Ce problème « mal posé » a été résolu en utilisant comme information un flux prescrit au front, déduit d'un bilan thermique. Il a été formulé comme un problème d'optimisation où un critère de moindre carré est introduit entre le modèle et l'objet. On a introduit ensuite une équation adjointe pour calculer de façon exacte le gradient du critère. Les équations obtenues sont discrétisées suivant la méthode des différences finies classique et le problème est résolu numériquement dans un maillage mobile. Le modèle numérique a été validé par une solution exacte qu'on a construite.

La résolution a été menée grâce à une méthode globale de gradient conjugué. Dans le cas de données exactes non bruitées, l'algorithme a permis, comme il a été démontré, la détermination rapide du contrôle avec une très bonne précision excepté pour les pas qui se rapprochent vers la fin de l'horizon du temps.

Dans le cas de l'existence d'erreurs aléatoires, notamment sur le flux prescrit, le filtrage à chaque itération a diminué leurs effets. Cependant, la technique de régularisation a donné des résultats plus précis que ceux obtenus par filtrage.

CHAPITRE III : MODELISATION DE LA SOLIDIFICATION PAR LA METHODE ENTHALPIQUE

III.1 Introduction

Dans ce chapitre, on expose la résolution numérique d'un problème de solidification d'un matériau pur en géométrie unidimensionnel. Le modèle de transfert thermique que nous adoptons est basé sur une formulation enthalpique qui est la plus adoptée à la résolution numérique des problèmes avec changement de phase

La première étape comprend la présentation et la description géométrique du système physique considéré reposant sur l'équation de la chaleur. La méthode enthalpique traite l'enthalpie comme variable dépendante de la température, et l'équation de la chaleur est écrite en fonction de l'enthalpie et de la température. Dans cette étude, une température constante est imposée à une extrémité du volume du matériau tandis que l'autre extrémité est prise égale ou supérieure la température de fusion.

La phase liquide est maintenue à une température initiale. La forme finale discrète des équations gouvernantes des conditions limites, sont résolue numériquement sur un maillage uniforme à l'aide d'un schéma de différences finis explicite pour calculer l'enthalpie, la température et la position du front de solidification en chaque point la maille.

Chacune phase peuvent être connue par sa température, en la comparant à chaque instant à la température de fusion du matériau. Lorsque les températures de deux points adjacents du maillage sont connues, la position de la frontière mobile peut être déterminer par une interpolation linéaire.

On présente l'algorithme de résolution du système d'équations pour calculer la température, la position de l'interface et l'enthalpie. Les résultats obtenus par le code de calcul sont validés par la comparaison à la solution analytique de Newman.

III.2 Description du problème

On considère la solidification d'une substance pure (ou quasiment pure) schématisée dans la figure ci-dessous. On suppose que le processus de transfert de chaleur est dominé par la conduction seulement, bien que dans certains cas les transferts convectifs et par rayonnement peuvent jouer un rôle important [94]. Dans cet exemple la chaleur est évacuée lentement par la surface d'échange. Sur cette figure T_0 est la température de la surface d'échange ($T_0 < T_f$) et T_l est la température du fluide loin de l'interface liquide-solide ($T_f < T_l$). On constate que la morphologie de l'interface solide-liquide est plane [9]. Cette interface est le front de solidification. Elle se déplace en fonction du temps t au fur et à mesure que la phase solide avance et elle est repérée par l'abscisse $s(t)$.

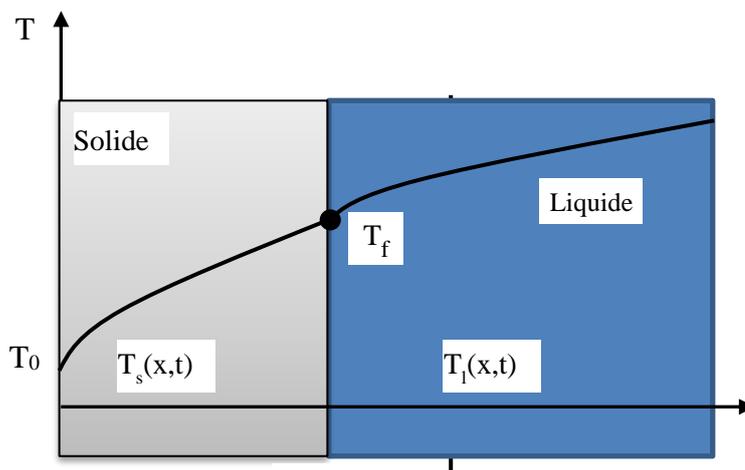


Figure (III-1) Solidification d'une substance pure dans un milieu fini

III.3 Formulation mathématique du problème

III.3.1 Définition de l'enthalpie

L'enthalpie désigne une grandeur thermodynamique correspondant à une propriété d'état extensive, c'est-à-dire une fonction d'état proportionnelle à la quantité de matière en présence. L'enthalpie se note H et, dans le système international, elle se mesure en joule (J). Elle est définie par la relation suivante :

$$H = u + pv \quad \text{III.1}$$

Où u est l'énergie interne, p et v sont respectivement la pression et le volume

En absence de changement de phase, si un produit pur passe de l'état 1 défini à la température T_1 vers un état 2 défini à la température T_2 ($T_2 > T_1$), son enthalpie varie de :

$$\Delta H_1^2 = H_2 - H_1 = \int_1^2 C_p(T) dT \quad \text{III.2}$$

Où l'état 1 correspond à la température de la phase solide et l'état 2 à la température de la phase liquide.

III.3.2 Hypothèses

Pour rendre le modèle mathématique plus simple et unidimensionnel, les hypothèses suivantes seront appliquées :

- Les effets de la convection naturelle dans la masse fondue sont négligés et le transfert de chaleur est considéré comme unidimensionnel, c'est-à-dire que le transfert de chaleur se produit uniquement dans la direction normale à la surface
- On suppose que le matériau a un point de fusion défini, c'est-à-dire que le changement de phase est isotherme
- On suppose que les propriétés physiques des phases solide et fluide du matériau sont identiques et constantes sur toute la plage de température, c'est-à-dire que le changement de volume est négligé
- Les interactions chimiques dans la composition liquide à l'interface seront négligées.
- La surfusion constitutionnelle sera négligée
- Puisque nous nous concentrons sur la solidification d'une matière fondue avec un refroidissement, les gradients de température dans le liquide seront positifs, de sorte que la chaleur latente générée à l'interface se dissipe à travers le solide.

Le processus de solidification/fusion contient une interface mobile qui sépare la région solide de la fusion. Cette interface continue progressivement jusqu'à ce qu'il ne reste plus de liquide. La progression de la solidification n'est pas un problème linéaire, mais pour ces problèmes, une solution exacte peut être conçue. La solution exacte à ce problème sera formulée selon la méthode de Neumann.

III.3.3 Modèle mathématique

En conduction pure, l'équation qui régit la conservation de l'énergie dans un matériau subissant un changement de phase est la combinaison des équations de chaleur pour les phases solide et liquide. Cette 'équation de chaleur combinée s'écrit comme suit :

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad \text{III.3}$$

Où H correspond à l'enthalpie et λ est la conductivité thermique.

L'équation (III.3) est une équation différentielle partielle en termes de température, T, temps t et d'enthalpie H. Lors d'un changement de phase, la chaleur latente doit être prise en compte afin que l'enthalpie soit considérée comme une étape en fonction de la température. La relation entre la température T et l'enthalpie h s'écrit :

$$T = \begin{cases} T_f + \frac{H}{c_s} & (H \leq 0) \\ T_f & (0 < H < \rho L) \\ T_f + \frac{H - L}{c_l} & (H \geq \rho L) \end{cases} \quad \text{III.4}$$

La condition initiale est :

$$\text{à } t = 0 \quad T = T_i \quad 0 \leq x \leq L_1 \quad \text{III.5}$$

Les conditions aux limites sont :

$$x = 0 \quad T = T_0 \quad \text{Température imposée} \quad \text{III.6}$$

$$x = L_1 \quad T_f \leq T_1 \quad \text{III.7}$$

Dans cette étude, une température constante est imposée à une extrémité tandis que la phase liquide est maintenue à une température initiale. L'analyse unidimensionnelle permet au système d'être résolu numériquement de manière maillée en déterminant la température à tout point du maillage à des moments spécifiques.

Considérons un matériau à l'état liquide et à une température T_1 supérieure à la température de fusion. Durant la solidification, la température descend progressivement, puis se stabilise durant le changement de phase à la température T_f , dans lequel le

matériau est partiellement solidifié. Le métal continue à se refroidir et passe de la température T_f à la température T_s , où il sera complètement solidifié. La température d'un point de la maille peut être facilement comparée au point à la température fusion du matériau pour déterminer la phase dans laquelle elle se trouve.

Le taux de solidification du matériau est déterminé en localisant la position de l'interface solide/liquide en fonction du temps. Ce taux dépend des propriétés du matériau et des conditions initiales. Lorsque les températures de deux points adjacents du maillage sont connues, la position de la frontière mobile peut être calculer ou bien déterminée par une interpolation pour affiner davantage sa position exacte.

III.4 Solution analytique

III.4.1 Solution analytique de Newman

La formulation classiques du processus de changement de phase est celle appliquée à la solution du « problème de Stefan » [15, 95, 96]. Il s'agit de la solidification unidimensionnelle d'un produit pur confiné dans un espace semi-infini $0 \leq x < \infty$. La figure (III-1) montre bien la géométrie du problème. Pour le temps $t \leq t_0$ le produit est dans la phase liquide et à température constante $T(x, 0) = T_0 > T_f$

Quand $t > 0$ la température de la surface $x = 0$ est instantanément $T(0, t) = T_0 < T_f$. Par conséquent, la phase solide se développera à partir d'une couche adjacente à la frontière $x = 0$ et au fur et à mesure que le temps augmente la phase solide avance avec la frontière $s(t)$ prenant la place du liquide. Dans ce problème les variations de température pour les phases solide et liquide $T_s(x, t)$ et $T_l(x, t)$ respectivement, sont gouvernées par l'équation classique de conduction de chaleur donnée par :

$$\frac{\partial T_s(x, t)}{\partial t} - \frac{\lambda_s}{\rho_s c_s} \frac{\partial^2 T_s(x, t)}{\partial t^2} = 0 \quad \text{pour } \begin{cases} 0 \leq x < s(t) \\ t > 0 \end{cases} \quad \text{III.8}$$

$$\frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t} - \frac{\lambda_l}{\rho_l c_l} \frac{\partial^2 T_l(x, t)}{\partial t^2} = 0 \quad \text{pour } \begin{cases} x \leq s(t) \\ t > 0 \end{cases} \quad \text{III.9}$$

Où λ_s et λ_l sont les conductivités thermiques pour les phases solide et liquide respectivement. Les variables ρ_s et ρ_l sont les masses volumiques pour les phases solide et liquide.

A l'interface solide/liquide, $x = s(t)$, le bilan d'énergie et la continuité de température sont assurés par les équations suivantes :

$$\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} - \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} = \rho_s L \frac{ds(t)}{dt} \quad \text{pour } t > 0 \quad \text{III.10}$$

$$T_s(s(t), t) = T_l(s(t), t) = T_f \quad \text{pour } t > 0 \quad \text{III.11}$$

En 1860, Neumann [95, 96] a proposé une solution analytique pour décrire la distribution transitoire de température dans un produit pur au cours d'un changement de phase liquide/solide dans un système unidirectionnel. La solution analytique du problème décrit par les équations (III.8) et (III.9) est :

$$T_s(x, t) = \frac{T_f - T(0, t)}{\text{erf}(\kappa)} \text{erf} \left[\frac{x}{2 \left(\frac{\lambda_s}{\rho_s c_s} \right)^{\frac{1}{2}}} \right] + T(0, t) \quad \text{pour } x < s(t) \quad \text{III.12}$$

$$T = T_f \quad \text{pour } x = s(t)$$

$$T_l(x, t) = \frac{T(x, 0) - T_f}{\text{erfc} \left(\kappa \left(\frac{\lambda_s \rho_l c_l}{\lambda_l \rho_s c_s} \right)^{\frac{1}{2}} \right)} \text{erfc} \left[\frac{x}{2 \left(\frac{\lambda_l}{\rho_l c_l} \right)^{\frac{1}{2}}} \right] \quad \text{pour } x > s(t) \quad \text{III.13}$$

Où erf et erfc sont la fonction erreur et la fonction erreur complémentaire, respectivement :

$$\text{erf}x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi \quad \text{III.14}$$

avec $\text{erf}\infty = 1$ et $\text{erf}(-x) = -\text{erf}(x)$

Les approximations de $\operatorname{erf}x$ pour les petites valeurs de x la série $e^{-\xi^2}$ sont utilisées dans les équations précédentes pour donner les séries suivantes.

$$\operatorname{erf}x = \frac{2}{\sqrt{\pi} \int_0^x d\xi \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \xi^{2n}/n!} \quad \text{III.15}$$

Puisque cette série est uniformément convergente, les termes intégrés peuvent être additionnés terme par terme [97], on obtient :

$$\operatorname{erf}x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{(2n+1)n!} \quad \text{III.16}$$

κ est une constante obtenue à partir de la solution de l'équation suivante :

$$\frac{e^{-\kappa^2}}{\operatorname{erf}(\kappa)} - \frac{\lambda_l}{\lambda_s} \frac{\left(\frac{\lambda_s}{\rho_s c_s}\right)^{\frac{1}{2}} [T(0,t) - T_f] e^{-\left(\frac{\lambda_s \rho_l c_l}{\lambda_l \rho_s c_c}\right) \kappa^2}}{\left(\frac{\lambda_l}{\rho_l c_l}\right)^{\frac{1}{2}} [T_f - T(x,0)] \operatorname{erfc}\left(\kappa \left(\frac{\lambda_s \rho_l c_l}{\lambda_l \rho_s c_c}\right)\right)^{\frac{1}{2}}} = \frac{\kappa \pi^{\frac{1}{2}}}{\operatorname{Ste}} \quad \text{III.17}$$

La variable adimensionnelle Ste est appelée de « nombre de Stefan » [98]. Elle est définie par :

$$\operatorname{Ste} = \frac{c_s (T_f - T(0,t))}{L} \quad \text{III.18}$$

Le déplacement transitoire du front de solidification $S(t)$ est donnée par :

$$S(t) = 2 \cdot \kappa \cdot \left(\frac{\lambda_s}{\rho_s c_s} \cdot t\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{III.19}$$

Plusieurs variations de la méthode de Neumann sont trouvées dans l'ouvrage de Carslaw et Jaeger [99], comme par exemple la solution de Neumann avec convection dans la phase liquide. Miyawaki et Yano [100] ont proposé des formulations spéciales pour modéliser le processus de solidification de gels alimentaires où le changement de phase se passe sur une plage de température finie et non à température constante.

Considérant l'exemple du paragraphe précédant la solidification d'un matériau pur, la surface $x = 0$ est maintenue à une température nulle. Pour la région $x > 0$, la température sera initialement à une température constante T qui est supérieure au point de fusion T_f .

$S(t)$ sera la représentation mathématique de la surface de séparation entre les phases solide et liquide en fonction du temps. x sera toute distance de la surface maintenue à une température nulle. La région pour laquelle $x < x(t)$ contient un solide à la température T_s , inversement $x > S(t)$ contient un liquide à la température T_l .

III.4.2 Résultats de la solution analytique de Newman

Un système de maillage a été confectionné dans l'algorithme avec les constantes suivantes du matériau (l'eau). Le modèle physique a une longueur totale de 0,100 mètres divisés en N nœuds. L'une de ces extrémités est maintenue à une température constante de 263,15°K, tandis que la phase liquide était initialement à 283,5°K. l'intervalle de temps a été calculé par incréments sur K étapes qui produira un temps écoulé final de 2 heures. Les propriétés thermophysiques du modèle physique sont données dans le tableau (II-2).

Constantes	Unités	Phase liquide (Eau)	Phase solide (Glace)
Masse volumique (ρ)	kg/m ³	1000	1000
Chaleur spécifique (c_p)	J/(kg°K)	2060	4186
Conductivité thermique (λ)	W/(M°K)	2.218	0.625
Diffusivité thermique (α)	m ² /s	1.15 E-6	1.44E-6
T_0 Température en $x=0$	°K	263.5	
T_f Température de changement de phase	°K	273.5	
T_i Température initiale	°K	283.5	
Chaleur latente L	J/kg	335000	

Figure (III-2) propriétés thermophysique de l'eau à l'état solide et liquide

La résolution de l'équation (III.8) avec les conditions initiales et les données de ce problème $T_i = 283.5^\circ\text{K}$, et $T_f = 273.5^\circ\text{K}$ permet l'évaluation de profil de température dans les deux phases. La représentation en 3D de la répartition de la température dans le temps offre des informations importantes sur la dynamique du système. Le taux à laquelle chaque distance du matériau se solidifie est facilement visible.

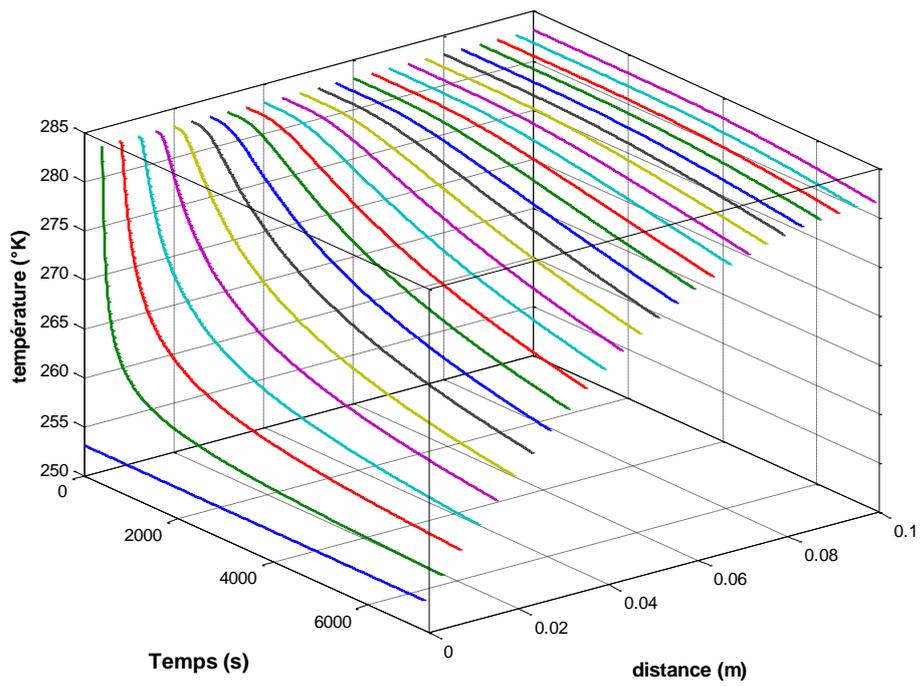


Figure (III-3) Distribution de températures dans le temps
Pour différentes positions

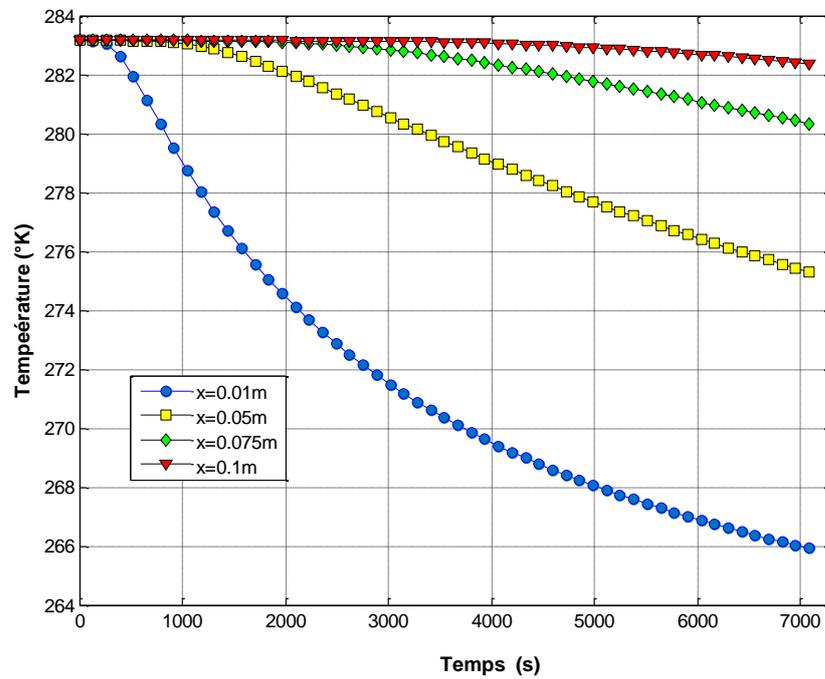


Figure (III-4) Profils de températures au cours du temps

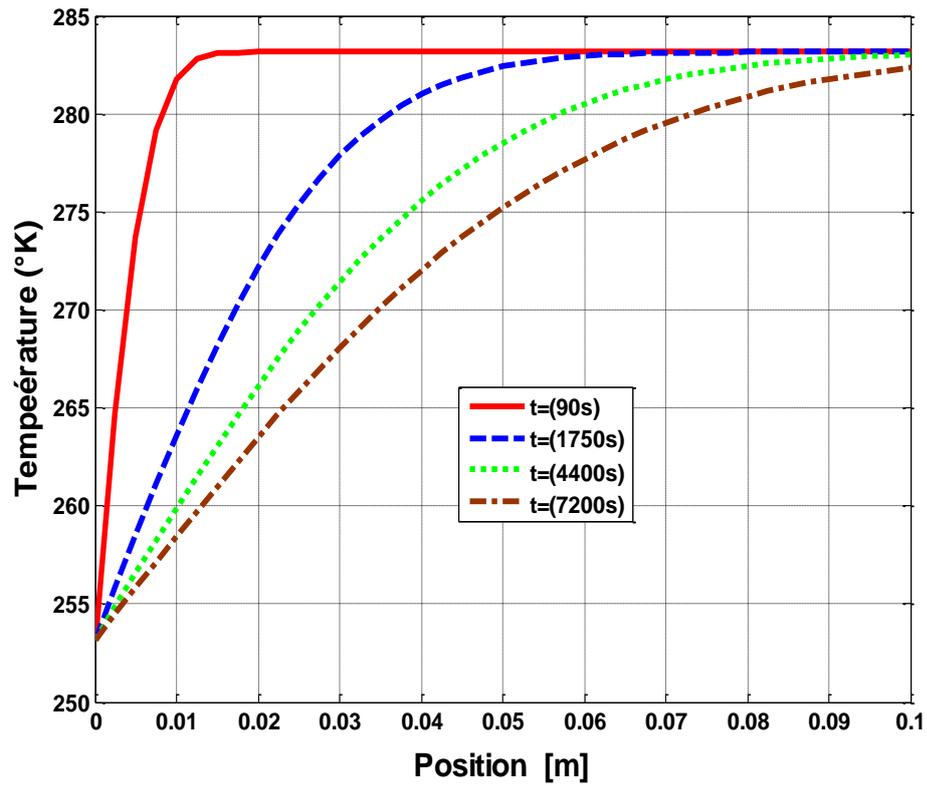


Figure (III-5) profils de température pour différentes positions

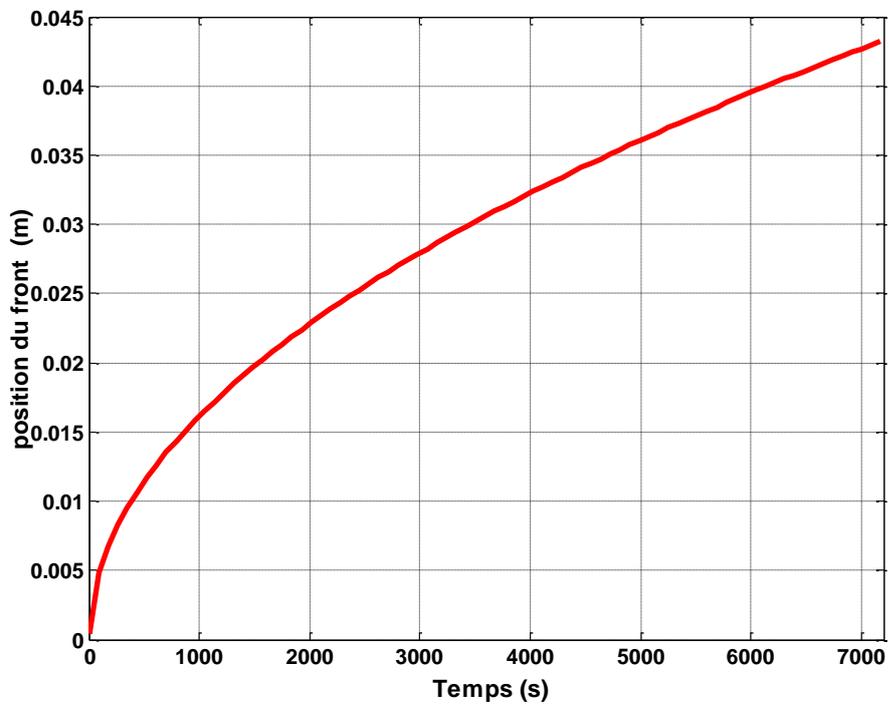


Figure (III-6) Position du front (Solution exactes)

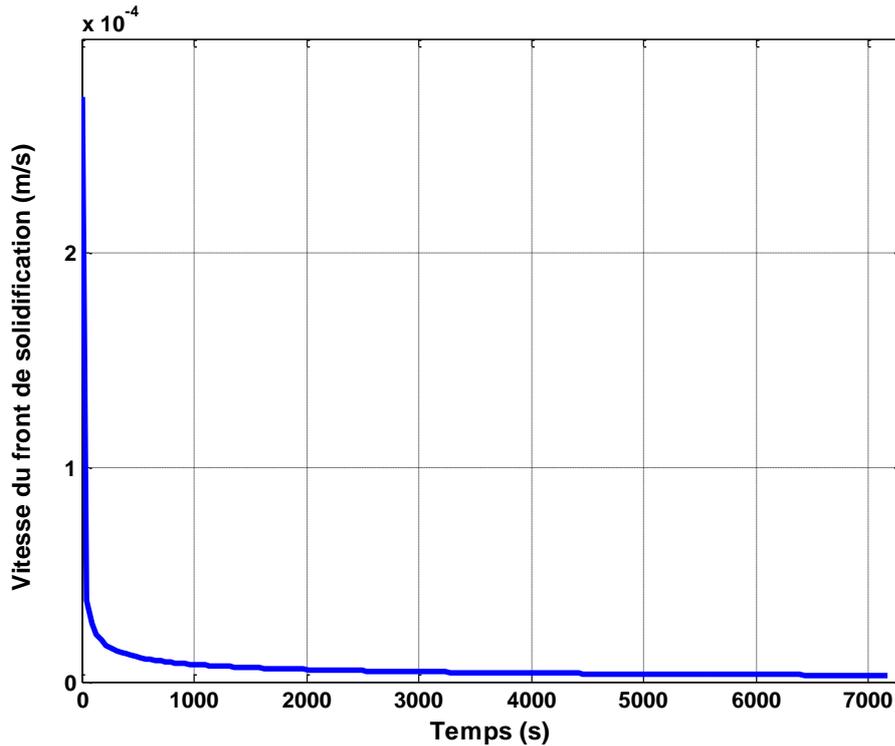


Figure III-7) Vitesse du front de solidification
(Solution exactes)

Les figures (III-3), (III-4) et (III-5) montrent que la température diminue en fonction de la distance mais se stabilise lorsqu'on s'éloigne de la fruitière froide. Cela est dû au fait que le changement de température est réduit au fur à mesure qu'on s'approche l'extrémité $x = L_1$.

Le front de solidification se déplace rapidement au début car elle est plus proche de la frontière froide figures (III.3), (III.4).

III.5 Résolution numérique

III.5.1 Discrétisation et Résolution numérique

Une méthode numérique à maillage fixe est utilisée pour résoudre ce problème de solidification. Le maillage est divisé en $N + 1$ nœuds avec un pas d'espace Δx . Les nœuds sont situés en x_i où $i = 1, 2, 3, \dots, N + 1$. Le maillage temporel est également divisé en nœuds t_k où $k = 1, 2, 3, \dots, K_m$ et l'espacement entre les nœuds temporels est Δt fig (III.8).

L'équation gouvernant le processus thermique (III.3) est discrétisée dans l'espace par la méthode des différences finies qui a l'avantage d'une grande simplicité d'écriture et un faible coût de calcul. La discrétisation du temps est menée par un schéma explicite. L'enthalpie est calculée en chaque point du nœud du maillage de manière explicite dans le temps à partir du calcul précédent. La température correspondante est déterminée en fonction de la relation de l'équation (III.3).

L'algorithme fournit l'enthalpie, la température résultante, la position de l'interface et sa vitesse. Il est actualisé en chaque nouveau pas de temps en prenant la valeur actuelle comme précédente pour calculer la nouvelle valeur de l'enthalpie. Le processus est répété pour toutes les étapes restantes en adhérant à la condition de CFL.

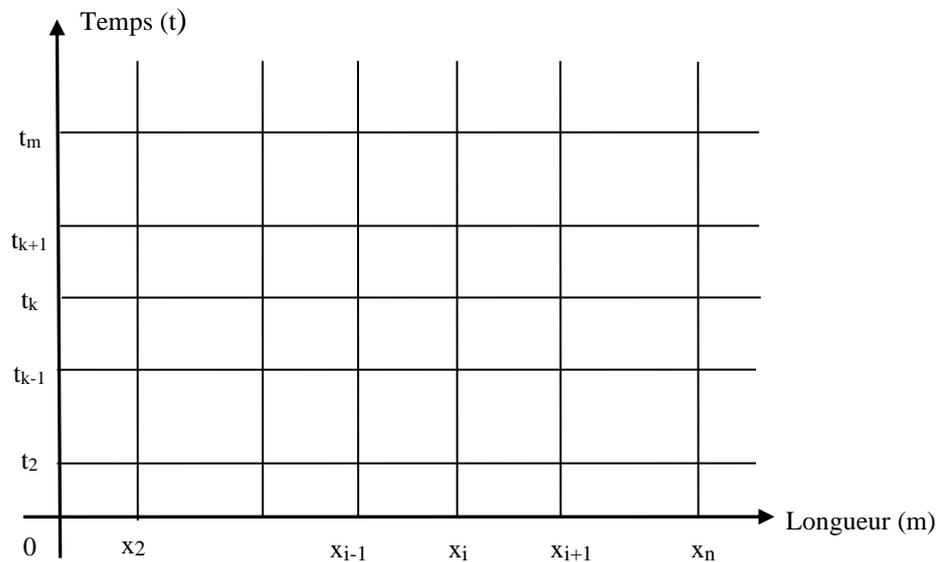


Figure III-8) Maillage spatio-temporelle

Après intégration de l'équation (III.2) dans le volume de contrôle et dans l'intervalle du temps, on trouve un arrangement numérique comme suit :

$$\frac{H_i^{k+1} - H_i^k}{\Delta t} = \frac{\lambda}{\rho \Delta x} \left[\left(\frac{T_{i+1}^k - 2T_i^k + T_{i-1}^k}{\Delta x} \right) \right] \quad \text{III.20}$$

$$H_i^{k+1} = H_i^k + \frac{\lambda \Delta t}{\rho \Delta x^2} (T_{i+1}^k - 2T_i^k + T_{i-1}^k) \quad \text{III.21}$$

L'indice (k) se rapporte à l'étape de temps précédente alors que (k+1) se réfère au pas de temps actuelle. Le schéma explicite est convergent si :

$$\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2} \quad \text{III.22}$$

α , Δx et Δt sont respectivement la diffusivité thermique, pas d'espace et le pas de temps. Cette condition s'appelle condition de CFL (pour Courant, Friedrichs, Lewy, 1928) qui est une condition nécessaire et suffisante pour la convergence de ce schéma.

Les avantages de cette approche sont les suivants :

- Aucune condition à satisfaire pour $x = S(t)$, (frontière de changement de phase)
- Il n'est pas nécessaire de suivre avec précision la frontière de changement de phase
- Il n'est pas nécessaire de prendre en compte séparément les régions à côté de $x = S(t)$,
- Il est facile d'introduire une région « pâteuse », c'est-à-dire où le changement de phase se produit sur une plage de température plutôt qu'à un seul point.
- La représentation explicite par différence finie de la formulation l'enthalpique est très simple

III.5.2 Résultats numériques et validation

On présente les résultats obtenus par le code de calcul de la simulation numérique appliqué à un liquide (l'eau) d'une dimension 0.1m en un temps de $t=2$ heures.

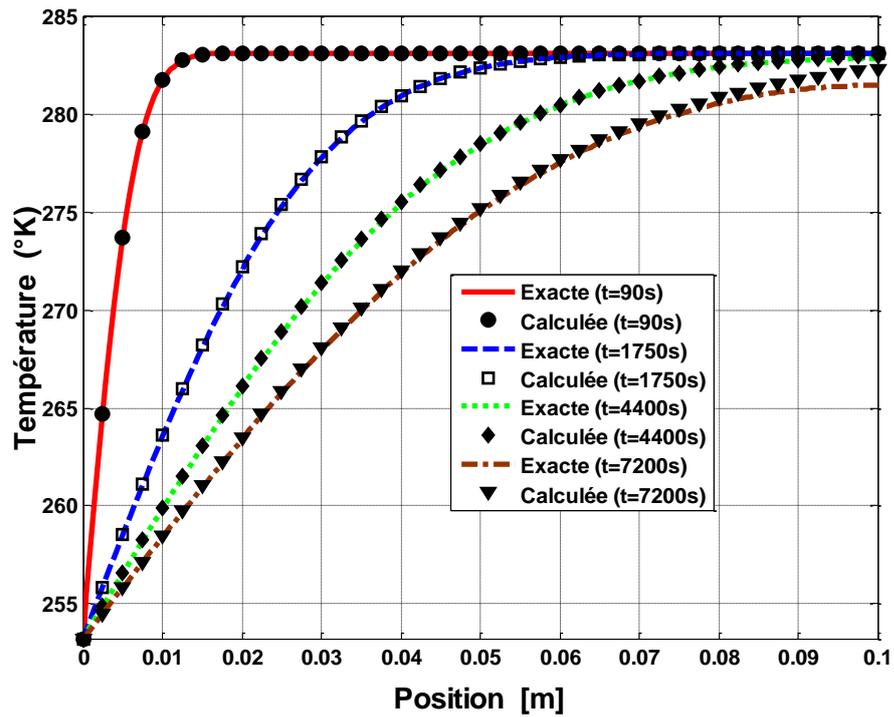


Figure (III-9) profils de températures (exacte et calculée)

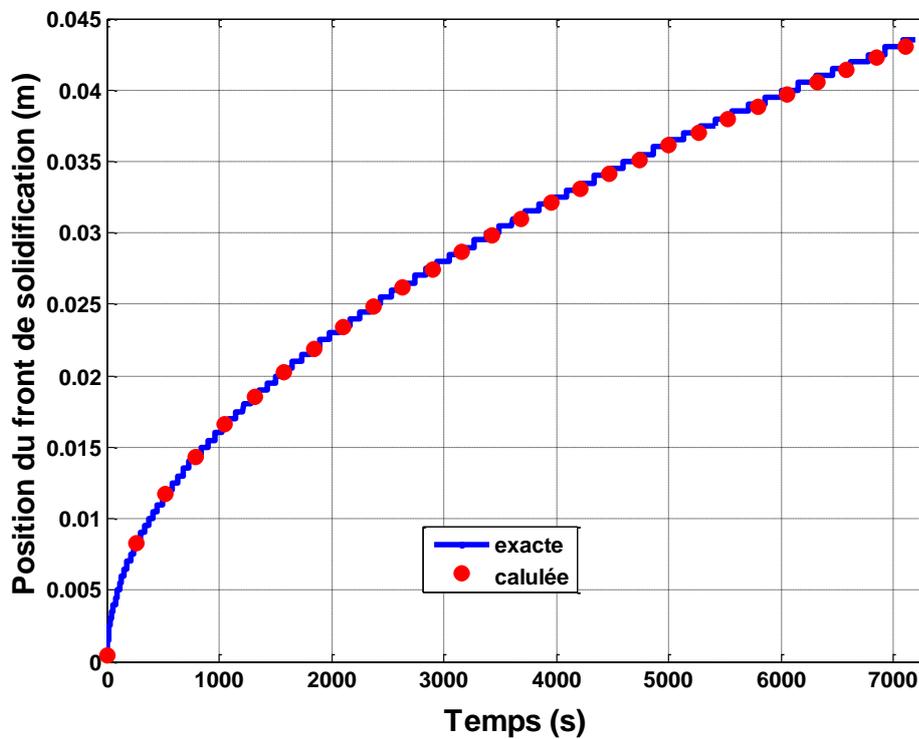


Figure (III-10) Position du front (exacte et calculée)

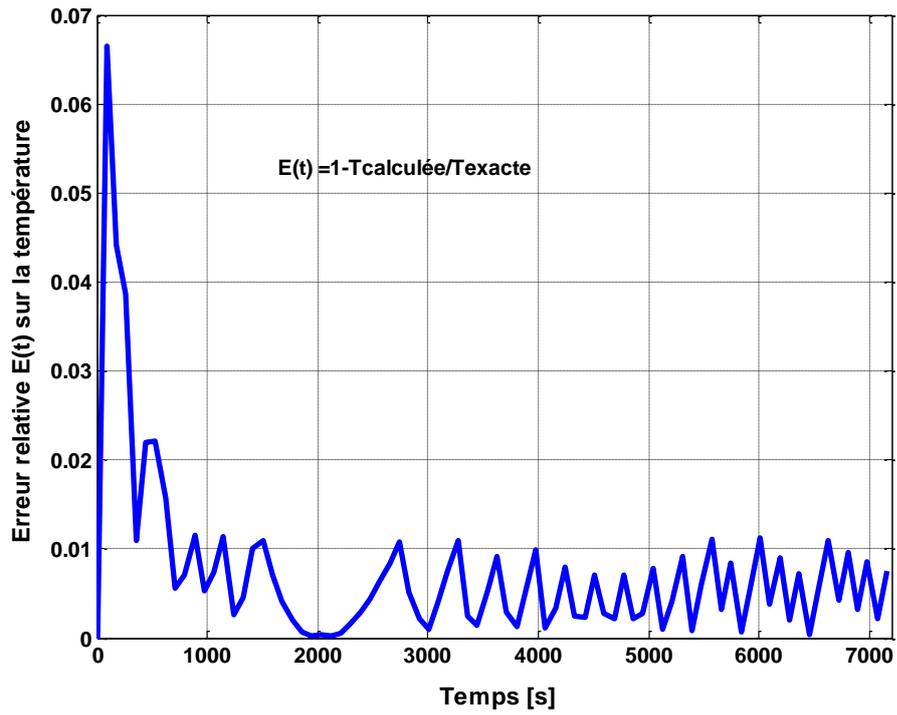


Figure III-11) Erreur relative sur la température

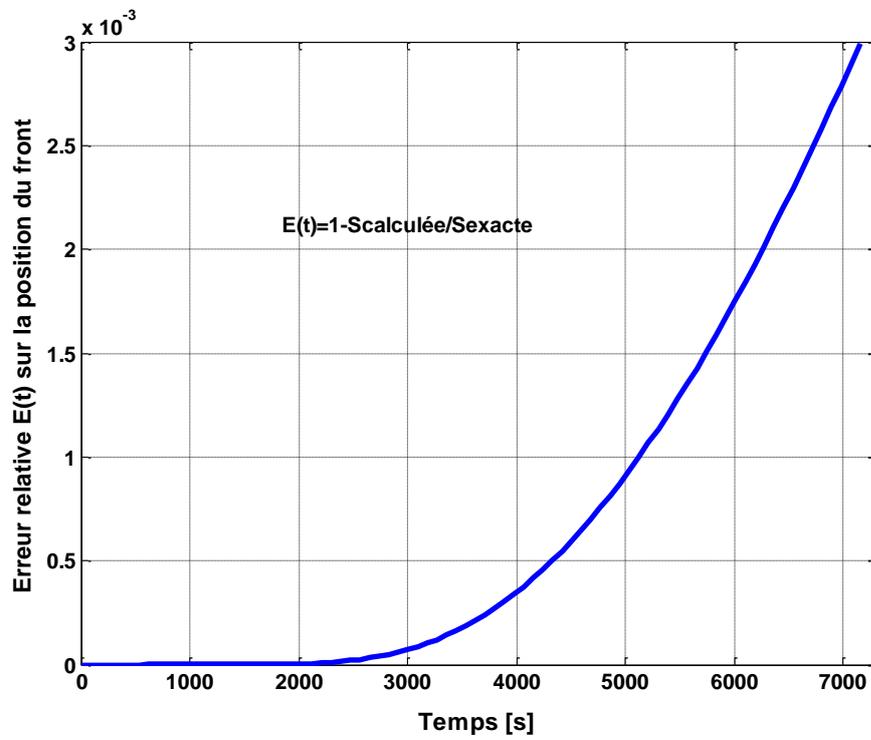


Figure III-12) Erreur relative sur la position du front

Les figures (III.7) et (III.8) montrent que les méthodes de résolution numérique et la solution exacte de Neumann se correspondent étroitement pour les régions de plus proches de la frontière froide. Ainsi l'erreur relative (figures (III.9) et (III.10)) sur la température et la position du front sont respectivement inférieures à 7% et 0.3%.

III.6 Conclusion

On a développé une méthode précise aux différences finies avec maillage fixe pour un problème de solidification d'un matériau pur. Cette solidification se produit, lorsque la chaleur latente est extraite du liquide pour solidifier une masse fondue. Cette chaleur est évacuée uniquement à la frontière froide et que sa température doit être maintenue en dessous de la température de fusion du matériau. Un gradient thermique positif assure la poursuite de la solidification. La précision et la flexibilité de la méthode numérique présentée est vérifiée et comparée avec les résultats de la solution analytique de Newman

On a présenté la variation de la température en fonction du temps et de l'espace ainsi que celle de l'évolution du front de solidification. Les résultats obtenus par ces deux méthodes s'harmonisent plus étroitement durant tout l'horizon de temps.

On note que dans cette étude, on a utilisé des paramètres thermophysiques constantes sur toutes les plages de température, ce qui n'est pas le cas en réalité. La densité est supposée constante pendant le changement de phase, elle joue un rôle pendant le processus de solidification.

Le modèle numérique présenté possède une application limitée, mais on peut l'étendre à une géométrie bidimensionnelle ou tridimensionnelle et qu'il peut-être appliqué pour le stockage de froid par chaleur latente.

CHAPITRE IV : ETUDE DE LA CONVECTION NATURELLE

IV.1 Introduction

Les phénomènes physiques sont formulés par des lois sous forme d'équations mathématiques reliant les différentes variables intervenant dans le déroulement du phénomène.

La convection naturelle est le mouvement résultant de la variation de la masse volumique du fluide avec la température. Elle est formulée par l'équation de continuité qui traduit le principe de conservation de masse, les équations de Navier-Stokes qui traduisent le principe de conservation de la quantité de mouvement et l'équation de l'énergie qui représente le principe de conservation de l'énergie.

L'objectif de cette étude consiste à simuler numériquement un problème de convection naturelle dans une cavité carrée avec deux côtés partiellement actifs. La description du problème donné passe par la définition d'un certain nombre de conditions aux frontières des conditions initiales dans un processus non stationnaire. Nous distinguons les nombres de Rayleigh, Prandtl et Nusselt représentant plusieurs propriétés physiques dépendantes de la température.

On présente les méthodes disponibles pour la résolution de la convection naturelle, et les hypothèses qui permettent d'obtenir les équations de conservation qui décrivent l'évolution du problème. Une discussion sur la méthode numérique et les algorithmes de résolution utilisés.

La solution numérique des équations de continuité, de quantité de mouvement et d'énergie a permis de déterminer les grandeurs physiques tels que les deux composantes de la vitesse, la pression et la température en chaque point de la cavité étudiée

Enfin, les résultats sont mentionnés sous forme de tableaux et de graphes. Ils sont discutés et critiqués. Ces résultats sont comparés avec les données des autres auteurs afin de valider notre programme.

IV.2 Modèle physique

IV.2.1 Convection dans les enceintes :

Une simulation numérique des phénomènes de la convection naturelle au sein d'une enceinte rectangulaire sera entreprise, elle présente plus d'intérêt dans différentes applications industrielles et dans la recherche fondamentale. On distingue généralement deux configurations :

- **Configuration Rayleigh-Bénard** : c'est une enceinte contenant un fluide et soumise à un gradient vertical de température. Elle est chauffée par le bas et refroidie par le haut. Cette configuration permet de traiter la stabilité et le mouvement d'un fluide, confiné entre deux plaques horizontales, maintenues à des températures uniformes et distinctes (figure IV-1). A partir d'un certain seuil du gradient thermique, le mouvement des particules fluides induit une déstabilisation du milieu fluide sous la forme de rouleaux thermo-convectifs aussi appelés cellules de Bénard.

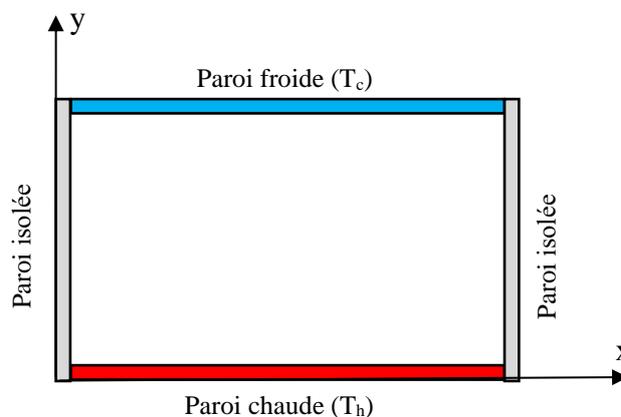


Figure IV-1) configuration Rayleigh-Bénard

- **Enceinte avec gradient de température horizontal** : C'est une cavité avec un gradient de température horizontal, deux de ces parois sont maintenues à des températures différentes tandis que les autres sont isolées. Dans cette configuration, l'une des parois verticales est chauffée, tandis que l'autre est refroidie, les parois horizontales étant considérées comme adiabatiques (Figure IV-2). L'écoulement est alors monocellulaire avec le fluide ascendant le long de la paroi chaude et descendant suivant la paroi froide.

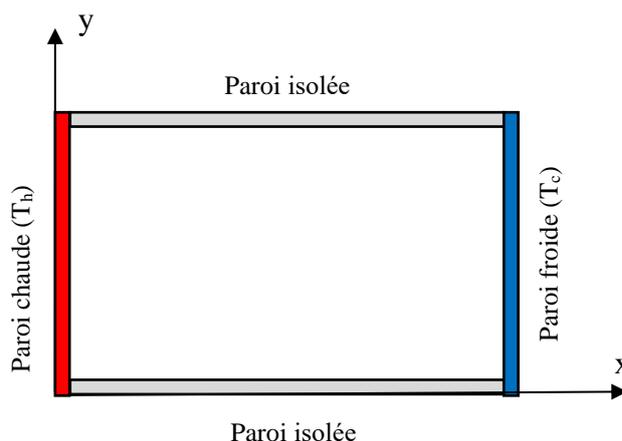


Figure IV-2) enceinte avec gradient de température horizontal

C'est cette dernière configuration qui fera l'objet de notre étude, qui consiste à l'étude numérique de la convection naturelle laminaire instationnaire dans une cavité carrée. Les deux côtés partiellement actifs, la partie gauche est à une température supérieure à celle du côté droit. Les parois supérieure et inférieure de la cavité sont thermiquement isolées. Les équations régissant le mouvement du fluide seront résolues par la méthode des volumes finis, en variant le nombre de Rayleigh de 10^3 à 10^7 avec une application de l'algorithme « SIMPLE » pour le couplage pression-vitesse.

IV.2.2 Description du problème physique

On considère le problème physique schématisé dans la figure (IV-3). Une cavité bidimensionnelle, de longueur L_x et de hauteur L_y , remplie de fluide. Les parois thermiquement actives de la cavité ($x = 0$ et $x = L_x$) sont maintenues à deux températures différentes T_h et T_c ($T_h > T_c$). Les parois horizontales ($y = 0$ et $y = L_y$) sont thermiquement isolées ($\frac{\partial T}{\partial y} = 0$). L'écoulement dans l'enceinte est induit par

la force de flottabilité, due à la différence de densité, qui est à son tour résulte d'un gradient de température.

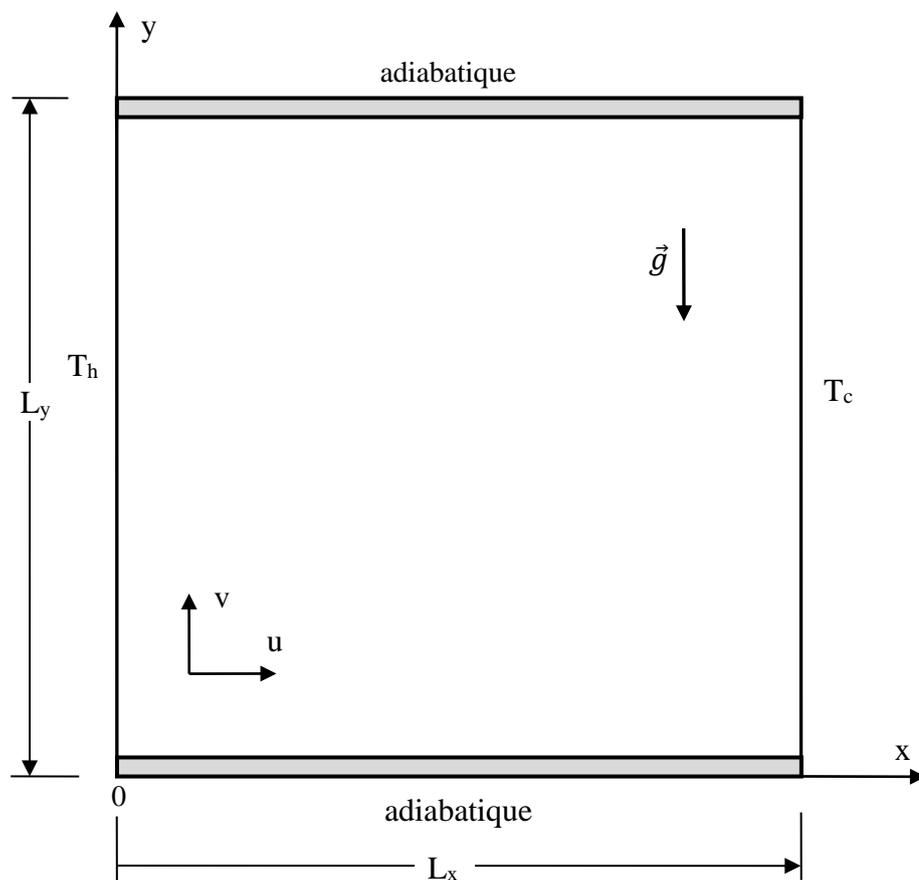


Figure (IV-3) Schéma du modèle physique

IV.3 Formulation mathématique du problème

Les équations générales du modèle physique sont les équations du bilan de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. En supposant que le fluide est un milieu continu, on peut utiliser les trois principes de conservation suivants :

- Principe de conservation de la masse, pour établir l'équation de continuité
- Principe de conservation de la quantité de mouvement, pour établir les équations de quantité de mouvement ;
- Premier principe de la thermodynamique, pour établir l'équation de l'énergie.

IV.3.1 Equation de continuité

Elle est déduite du principe de conservation de masse et s'exprime sous forme tensorielle comme suit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad \text{IV.1}$$

($i=1, 2, 3$: indice de sommation)

IV.3.2 Equation de quantité de mouvement

D'après la deuxième loi fondamentale de la dynamique, le taux temporaire de changement de quantité de mouvement d'une particule fluide est égal à la somme des forces extérieures sur cette particule. L'équation de la dynamique sous forme tensorielle s'écrit alors comme suit :

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = F_i - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right] \quad \text{IV.2}$$

$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t}$: Représente le taux de variation de la quantité de mouvement.

$\frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j}$: Représente le taux net de transport de quantité de mouvement dans la direction i ,

F_i : Représente les forces du volume suivant la direction i .

$\frac{\partial P}{\partial x_i}$: Représente les forces dues à la pression.

$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right]$: Représente les forces nettes de viscosité.

IV.3.3 Equation d'énergie

Elle est obtenue par l'application du premier principe de la thermodynamique. Cette équation pour un fluide Newtonien incompressible, s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(u_i T)}{\partial x_i} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + q \quad \text{IV.3}$$

Où α est La diffusivité thermique, elle est donnée par :

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho C_p}$$

λ : La conductivité thermique.

C_p : La chaleur spécifique à pression constante.

q : La génération de chaleur par unité de volume (densité de chaleur volumétrique).

$q=0$

IV.3.4 Hypothèses simplificatrices :

Pour simplifier la formulation du modèle mathématique, nous considérer les approximations suivantes, qui sont généralement utilisée dans une convection naturelle.

- Écoulement bidimensionnel $\partial/\partial z = 0$. et $z = 0$.
- Écoulement laminaire (écoulement à faible valeur du nombre de Reynolds).
- Les propriétés physiques du fluide sont constantes, sauf la masse volumique, qui obéit à l'approximation de Boussinesq dans le terme de la poussée d'Archimède.
- Le fluide est newtonien et incompressible.
- Le transfert de chaleur par rayonnement est négligeable.
- Le travail induit par les forces visqueuses et de pression est négligeable.
- La puissance volumique dissipée est négligeable.

La densité est prise comme une valeur constante dans toutes les équations résolues, sauf pour le terme de Buoyancy de l'équation de quantité de mouvement. Son expression est fonction des variations de la température, elle est donnée par :

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta(T - T_c)] \quad \text{IV.4}$$

IV.4 Equations simplifiées

IV.4.1 Equations de conservations simplifiées

En tenant compte des hypothèses précédentes, on aura dans un repère fixe le système d'équation suivant :

- **Equation de continuité :**

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad \text{IV.5}$$

- **Equation de quantité de mouvement suivant ox**

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \vartheta \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad \text{IV.6}$$

- **Equation de quantité de mouvement suivant oy**

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \vartheta \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + g\beta(T - T_c) \quad \text{IV.7}$$

- **Equation d'énergie :**

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad \text{IV.8}$$

Où u et v sont respectivement les vitesses cartésiennes dans la direction x et y, P est la pression et T la température.

IV.4.2 Conditions aux limites

Pour résoudre le système d'équations obtenu précédemment, on incorpore des conditions aux limites pour chaque variable. Il y a deux types de condition aux limites : Dirichlet (valeur imposée à la frontière) ou Neumann (gradient imposé). Pour notre étude, on pose les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} & - \text{Condition initiale} \\ & \left\{ \begin{array}{l} t = 0. \\ u = v = 0 \\ T = T_h \end{array} \right. \quad \text{IV.9} \end{aligned}$$

- Paroi chauffée (ouest) :

$$\left\{ \begin{array}{l} u = v = 0 \\ T = T_h \end{array} \right. \quad \text{IV.10}$$

- Paroi froide (est) :

$$\begin{cases} u = v = 0 \\ T = T_c \end{cases} \quad \text{IV.11}$$

- Parois nord et sud (Conditions d'adiabaticité)

$$\begin{cases} u = v = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad \text{IV.12}$$

IV.5 Equations adimensionnelles

Pour rendre la solution plus générale et spécifier les conditions d'écoulement avec un nombre restreint de paramètres, on transforme les variables dépendantes et indépendantes en variables sans dimensions. Cette adimensionnalisation est importante pour simplifier les équations, qui régissent l'écoulement et pour comparer nos résultats à la littérature. On introduit les variables caractéristiques suivantes :

$$x^* = \frac{x}{L_x} \quad y^* = \frac{y}{L_y} \quad u^* = u \frac{L_x}{\alpha} \quad v^* = v \frac{L_y}{\alpha} \quad t^* = t \frac{\alpha}{L_x^2} \quad \text{IV.13}$$

$$\theta = \frac{(T - T_c)}{(T_h - T_c)} \quad \text{IV.14}$$

Remarque : Dans ce qui suit le symbole (*) sera omis

- **Equation de continuité :**

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad \text{IV.15}$$

- **Equation de quantité de mouvement suivant ox :**

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \text{Pr} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad \text{IV.16}$$

- **Equation de quantité de mouvement suivant oy :**

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \text{Pr} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \text{PrRa}\theta \quad \text{IV.17}$$

- **Equation d'énergie :**

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + v \frac{\partial \theta}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) \quad \text{IV.18}$$

IV.5.1 Nombres adimensionnels

Les nombres sans dimension Ra et Pr caractérisent entièrement les conditions du transfert de chaleur dans le système.

- **Nombre de Rayleigh Ra**

Le nombre de Rayleigh est un nombre sans dimension, il caractérise le transfert de chaleur au sein d'un fluide. Lorsque sa valeur est inférieure à une valeur critique de 2000, le transfert s'opère par conduction, au-delà de cette valeur, c'est la convection libre qui devient importante. On le définit de la manière suivante :

$$\text{Ra} = \frac{g\beta\Delta TL_y^3}{\vartheta\alpha} \quad \text{IV.19}$$

- **Nombre de Prandtl :**

C'est un nombre adimensionnel. Il représente le rapport entre la diffusivité de quantité de mouvement (ou viscosité cinématique) et la diffusivité thermique. On le définit de la manière suivante :

$$\text{Pr} = \frac{\vartheta}{\alpha} \quad \text{IV.20}$$

- **Nombre de Nusselt :**

Le nombre de Nusselt est un nombre adimensionnel, il représente les transferts thermiques entre un fluide et une paroi. On le définit par :

$$\text{Nu} = \frac{h_c L_c}{\lambda} \quad \text{IV.21}$$

h_c : Le Coefficient de transfert thermique convection, [$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$]

L_c : Longueur caractéristique

λ : Conductivité thermique du fluide

Dans les échelles non dimensionnelles, nous pouvons réécrire l'équation ci-dessus :

$$Nu = \frac{\partial \theta}{\partial n} \quad \text{IV.22}$$

Où Nu est le nombre de Nusselt local.

IV.5.2 Conditions aux limites adimensionnelles

Les conditions aux limites des équations adimensionnelles seront définies comme suit :

- Condition initiale

$$\begin{cases} t = 0. \\ u = v = 0 \\ \theta = 1 \end{cases} \quad \text{IV.23}$$

- Paroi chauffée (ouest) :

$$\begin{cases} t \geq 0 \\ x = 0. \\ 0 \leq y \leq 1 \\ u = v = 0 \\ \theta = 1 \end{cases} \quad \text{IV.24}$$

- Paroi froide (est) :

$$\begin{cases} t \geq 0 \\ x = 1. \\ 0 \leq y \leq 1 \\ u = v = 0 \\ \theta = -1 \end{cases} \quad \text{IV.25}$$

- Paroi adiabatiques (nord et sud) :

$$\begin{cases} 0 \leq x \leq 1 \\ y = 0. \\ y = 1 \\ u = v = 0 \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0. \end{cases} \quad \text{IV.26}$$

En remplaçant ces équations dans les équations de conservations et leurs conditions frontières, on obtient alors un système d'équations résumé par l'équation générale de transfert suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) + \vec{\nabla} \cdot (\rho\varphi\vec{u}) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma\vec{\nabla}\varphi) + S_\varphi \quad \text{IV.27}$$

$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}$: terme instationnaire

$\vec{\nabla} \cdot (\rho\varphi\vec{u})$: terme convectif

$\vec{\nabla} \cdot (\Gamma\vec{\nabla}\varphi)$: terme de diffusion

S_φ : terme source associés à la variable φ

Γ : est le coefficient de diffusion

L'équation générale se réduit donc à un terme d'accumulation, un terme de convection, un terme de diffusion. Il est possible de construire une procédure numérique générale qui s'applique pour les différentes équations en considérant les conditions aux limites spécifiques à chaque équation. Les termes de l'équation générale de transfert (IV.25) sont regroupés dans le tableau (IV.1) pour les différentes équations différentielles.

Les différentes valeurs de la variable φ et ses coefficients, pour chaque équation de conservation, sont présentées dans le tableau suivant :

Equations	Variable φ	Coefficient de diffusion Γ	Terme source S_φ
Continuité	1	0	0
Equation de quantité de mvt dans la direction x	u	Pr	$-\frac{\partial P}{\partial x}$
Equation de quantité de mvt dans la direction y	v	Pr	$-\frac{\partial P}{\partial y} + Ra Pr \theta$
Equation d'énergie	θ	α	0

Tableau (IV-1) Coefficients de diffusion et termes de sources

IV.6 Discrétisation des équations différentielles

La méthode des volumes finis (ou de volumes de contrôle) exposée dans la section (I.3.3) a été la plus utilisée pour l'étude des phénomènes de la dynamique des fluides. Cette méthode a été décrite pour la première fois en 1971 par Patankar et Spalding et publiée en 1980 par Patankar [101]. Elle est utilisée pour résoudre numériquement des équations aux dérivées partielles en les transformant en un système d'équations

algébriques. La présente procédure numérique fait appel à cette méthode pour la discrétisation des équations différentielles du modèle mathématique.

Le champ de pression est inconnu dans les équations de quantité de mouvement, il sera implicitement spécifié dans l'équation de continuité. Lorsque ce champ de pression est substitué dans les équations du mouvement, le champ de vitesse résultant satisfait l'équation de continuité. Le couplage entre le champ de pression et le champ de vitesse est utilisé dans l'élaboration d'une procédure de calcul pour le champ dynamique.

IV.6.1 Maillage et volume de contrôle

Dans la méthode des volumes finis, on subdivise le domaine de calcul en nombres finis de sous-domaines élémentaires, appelés volumes de contrôle, chacun de ces derniers englobe un nœud dit nœud principal figure (IV-4). Les équations algébriques sont intégrées à travers les volumes de contrôle et la variable dépendante considérée est calculée pour chaque nœud.

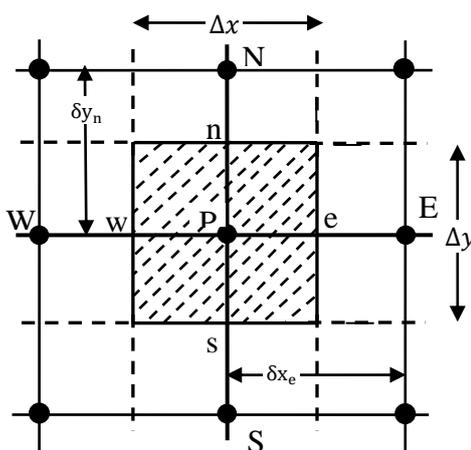


Figure (IV-4) Volume de contrôle

IV.6.2 Discrétisation des équations de conservation

Dans un cas bidimensionnel, l'équation différentielle (IV.27) peut être écrite en considérant une direction i sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \varphi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \varphi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + S_{\varphi} \quad \text{IV.28}$$

Le temps est discrétisé au moyen du schéma d'Euler implicite d'ordre 1 et l'intégration de l'équation (IV.28) à travers le volume de contrôle dv représenté dans la figure (IV.4) :

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial \varphi}{\partial t} dv dt + \int \left[\frac{\partial}{\partial x} (\rho u \varphi) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v \varphi) \right] dv dt \\ = \int \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \right] dv dt + \int [S_\varphi] dv dt \end{aligned} \quad \text{IV.29}$$

Après réarrangement, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{(\varphi_p - \varphi_p^0) \Delta x \Delta y}{\Delta t} + \left[(\rho u)_e \varphi_e - \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_e \right] \Delta y - \left[(\rho u)_w \varphi_w - \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y \\ + \left[(\rho u)_n \varphi_n - \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_n \right] \Delta x - \left[(\rho u)_s \varphi_s - \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_s \right] \Delta x \\ = \bar{S}_\varphi \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad \text{IV.30}$$

Les termes entre crochets représentent les flux totaux sur les faces des volumes de contrôle et φ^0 la variable à l'instant précédent.

\bar{S} : est la valeur moyenne du terme source sur le volume de contrôle.

Si le terme source S_φ dépend de la variable φ_p , il doit être linéarisé en utilisant la méthode de la tangente conseillé par [101].

$$\bar{S}_\varphi = S_c + S_p \varphi_p \quad \text{IV.31}$$

S_p est le coefficient de φ_p et S_c est la partie de S qui ne dépend pas explicitement de φ_p . Quand le terme source dépend de la variable dépendante, cette dépendance doit être exprimée par une relation linéaire, ceci permettra d'utiliser les méthodes de résolution des systèmes linéaires. La linéarisation est l'évolution de la valeur moyenne de, qui peut être en fonction de la variable dépendante, sa valeur est donc calculée à chaque itération à partir des nouvelles valeurs des variables dépendantes.

Suite à la résolution des équations algébriques adoptées, le terme source sera linéarisé de façon à forcer la convergence, on écrit :

La forme discrétisée finale de l'équation du transport peut être écrite sous la forme :

$$a_p \varphi_p = a_E \cdot \varphi_E + a_W \cdot \varphi_W + a_N \cdot \varphi_N + a_S \cdot \varphi_S + b \quad \text{IV.32}$$

Où sous la forme condensée :

$$a_p \varphi_p = \sum a_{nb} \varphi_{nb} + b \quad \text{IV.33}$$

Les nb sont les nœuds voisins de P.

Avec :

$$a_E = D_e A(|P_e|) + \text{Max}(-F_e, 0) \quad a_W = D_w A(|P_w|) + \text{Max}(F_w, 0) \quad \text{IV.34}$$

$$a_N = D_n A(|P_n|) + \text{Max}(-F_n, 0) \quad a_S = D_s A(|P_s|) + \text{Max}(F_s, 0)$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_p^0 - S_p \Delta x \Delta y$$

$$a_p^0 = \frac{\varphi_p^0 \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad \text{et} \quad b = S_c \Delta x \Delta y + a_p^0 \varphi_p^0 \quad \text{IV.35}$$

Les flux diffusifs et les débits volumiques prennent la forme :

$$\begin{aligned} F_e &= (\rho u)_e \Delta y & D_e &= \Gamma \frac{\Delta y}{\delta x_e} & P_e &= \frac{F_e}{D_e} \\ F_w &= (\rho u)_w \Delta y & D_w &= \Gamma \frac{\Delta y}{\delta x_w} & P_w &= \frac{F_w}{D_w} \\ F_n &= (\rho u)_n \Delta x & D_n &= \Gamma \frac{\Delta x}{\delta y_n} & P_n &= \frac{F_n}{D_n} \\ F_s &= (\rho u)_s \Delta x & D_s &= \Gamma \frac{\Delta x}{\delta y_s} & P_s &= \frac{F_s}{D_s} \end{aligned} \quad \text{IV.36}$$

F_e, F_w, F_n et F_s représentent le débit d'écoulement ou les débits massiques à travers les faces du volume de contrôle, D_e, D_w, D_n et D_s indiquent la conductance de Diffusion et P_e, P_w, P_n et P_s sont les nombres de Peclet qui est un rapport des débits de convection et de diffusion. $A(|P|)$ est une fonction qui prend différentes formes pour différents schémas de discrétisation. Pour le :

- Schéma de loi de puissance : $A(|P|) = \max(0, (1 - 0.1|P|)^5)$
- Schéma hybride $A(|P|) = [0.1 - 0.5|P|]$

- Schéma centré $A(|P|) = 1 - 0.5|P|$

$(\rho u)_e, (\rho u)_w, (\rho v)_n, (\rho v)_s$, sont évalués par une interpolation entre les nœuds voisins, nous aurons :

$$\begin{aligned} (\rho u)_e &= \rho_e \frac{u_P + u_E}{2} & (\rho u)_w &= \rho_w \frac{u_P + u_W}{2} \\ (\rho v)_n &= \rho_n \frac{u_P + v_N}{2} & (\rho v)_s &= \rho_s \frac{u_P + v_S}{2} \end{aligned} \tag{IV.37}$$

Les gradients $\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_e, \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_w, \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_e, \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_e$ sont aussi évalués par une interpolation linéaire.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_e &= \frac{\varphi_E - \varphi_P}{2} & \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_w &= \frac{\varphi_P - \varphi_W}{2} \\ \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)_n &= \frac{\varphi_N - \varphi_P}{2} & \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)_s &= \frac{\varphi_P - \varphi_S}{2} \end{aligned} \tag{IV.38}$$

Des schémas peuvent être utilisés, pour approximer les valeurs des fonctions $\varphi_e, \varphi_w, \varphi_n$ et φ_s aux interfaces des volumes de contrôle par rapport aux nœuds du maillage, sont disponibles dans la littérature [101] :

La précision de la solution dépend énormément du schéma choisi. Les coefficients $a_E, a_W, a_N,$ et a_S doivent être tous positifs d'où la fonction d'interpolation $A(|P|)$ doit être positive. Le schéma d'approximation de la loi puissance qui semble être beaucoup plus consistant. Elle est très efficace puisque il approche beaucoup mieux la solution exacte, il est le plus recommandé dans les problèmes de Convection-Diffusion et pour toutes les cas (bidimensionnelles et tridimensionnelles)[101].

IV.7 Difficultés du champ dynamique

La discrétisation des équations de conservation mène à un ensemble d'équations algébriques non linéaires, les inconnues sont la température T et les deux composantes de la vitesse u et v . Une difficulté qui apparaisse dans les équations de quantité mouvement est le gradient de pression $\frac{\partial P}{\partial x_i}$ qui est inconnu. Une autre difficulté surgit aussi pour les

équations du mouvement et l'équation de continuité. Si les vitesses et les pressions sont calculées aux mêmes nœuds, plusieurs champs physiques irréels peuvent être considérés comme solutions. L'un des remèdes pour cet inconvénient est le maillage décalé.

Dans le cas d'un écoulement incompressible ($\rho = cte$) où la densité n'est pas liée à la pression. Le couplage entre la pression et la vitesse introduit une contrainte sur la solution du champ d'écoulement. Si le champ de pression correct est introduit dans les équations de conservation de quantité de mouvement, il en résulte un champ de vitesse qui vérifie l'équation de continuité. Pour convaincre ce problème, on utilise l'algorithme itérative de Patankar et Spalding, appelé aussi algorithme SIMPLE

Dans cet algorithme, le flux convectif à travers les interfaces du volume de contrôle est évalué à partir d'un champ de vitesse estimé.

IV.7.1 Algorithme SIMPLE :

L'algorithme SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) est une méthode itérative conçue, par Patankar et Spalding en 1972, pour calculer la pression et les vitesses en utilisant un maillage décalé.

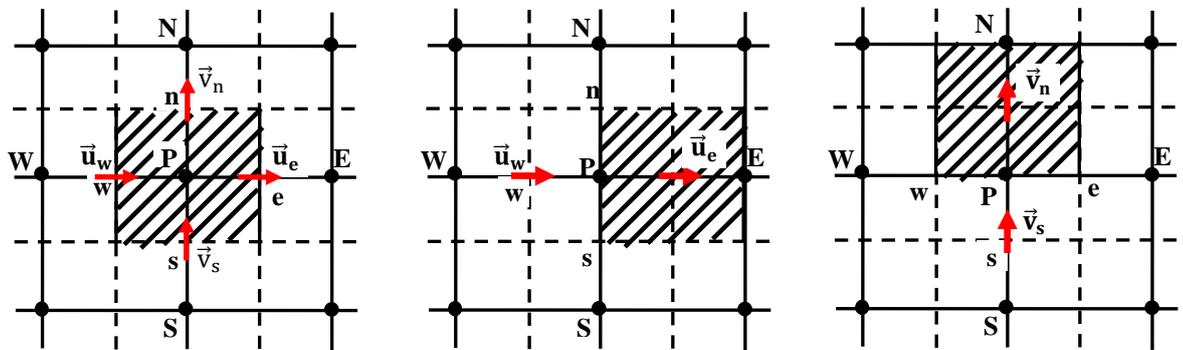


Figure (IV-5),(a) volume de contrôle, (b) maillage décalé pour u, (c) maillage décalé pour v.

Les équations de quantité de mouvement sur les deux grilles donnent respectivement :

$$a_e u_e = a_{ee} u_{ee} + a_w u_w + a_{ne} \phi_{ne} + a_{se} \phi_{se} + b_u + (P_P - P_E) A_e \tag{IV.39}$$

$$a_n \phi_n = a_{vn} \phi_{vn} + a_s \phi_s + a_{ne} \phi_{ne} + a_{nw} \phi_{nw} + b_v + (P_P - P_N) A_n$$

- $(A_e = \Delta y$ et $A_n = \Delta x)$ sont Les surfaces
- $(P_p - P_E)A_e$ et $(P_p - P_N)A_n$ représentent les forces de pression agissantes respectivement sur les volumes de contrôle des vitesses u et v .
- (b_u, b_v) sont tous les termes de sources.

sous la forme condensée, ces équations peuvent être écrites

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + b_u + (P_p - P_E)A_e \quad \text{IV.40}$$

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + b_v + (P_p - P_N)A_n$$

Dans l'algorithme SIMPLE, on estime au départ ou à l'itération précédente un champ de pression P^* et on déduit les champs de vitesses u^* et v^* à partir des relations (IV.41).

$$a_e u_e^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + b_u + (P_p^* - P_E^*)A_e \quad \text{IV.41}$$

$$a_n v_n^* = \sum a_{nb} v_{nb}^* + b_v + (P_p^* - P_N^*)A_n$$

La pression est corrigée d'une quantité P' qui induit une correction sur les vitesses et de sorte que les nouveaux champs s'écrivent comme suit :

$$\begin{cases} P = P^* + P' \\ u = u^* + u' \\ v = v^* + v' \end{cases} \quad \text{IV.42}$$

En manipulant les équations (IV.40), (III.41), et (III.42) et en négligeant les termes $\sum a_{nb} u_{nb}^*$ et $\sum a_{nb} v_{nb}^*$ on obtient :

$$\begin{aligned} a_e u_e' &= (P_p' - P_E')A_e \\ a_n v_n' &= (P_p' - P_N')A_n \end{aligned} \quad \text{IV.43}$$

On pose $d_e = \frac{A_e}{a_e}$ et $d_n = \frac{A_n}{a_n}$

Après substitution, les équations de vitesses deviennent :

$$\begin{aligned} u &= u_e^* + (P'_p - P'_E)d_e \\ v &= v_n^* + (P'_p - P'_N)d_n \end{aligned} \quad \text{IV.44}$$

IV.7.2 Equation de correction de pression

En intégrant l'équation de continuité dans le volume de contrôle correspondant aux nœuds principaux figure (IV.6), on obtient :

$$(\rho u A)_w - (\rho u A)_e + (\rho u A)_s - (\rho u A)_n = 0 \quad \text{IV.45}$$

La substitution des vitesses u et v de l'équation (IV.42) dans (IV.43) nous donne l'équation de correction de la pression :

$$a_p P'_p = a_E P'_E + a_W P'_W + a_N P'_N + a_S P'_S + b \quad \text{IV.46}$$

Avec :

$$\begin{aligned} a_E &= (\rho u A)_e ; & a_W &= (\rho u A)_w ; & a_N &= (\rho u A)_n ; & a_S & \\ & & &= (\rho u A)_s & & & & \end{aligned} \quad \text{IV.47}$$

et

$$\begin{aligned} a_p &= a_E + a_W + a_N + a_S \\ b &= (\rho u^* A)_w - (\rho u^* A)_e + (\rho u^* A)_s - (\rho u^* A)_n \end{aligned} \quad \text{IV.48}$$

L'algorithme SIMPLE permet la résolution des équations de pression pour corriger les vitesses. Les étapes de l'algorithme SIMPLE sont présentées sur la figure (IV-8)

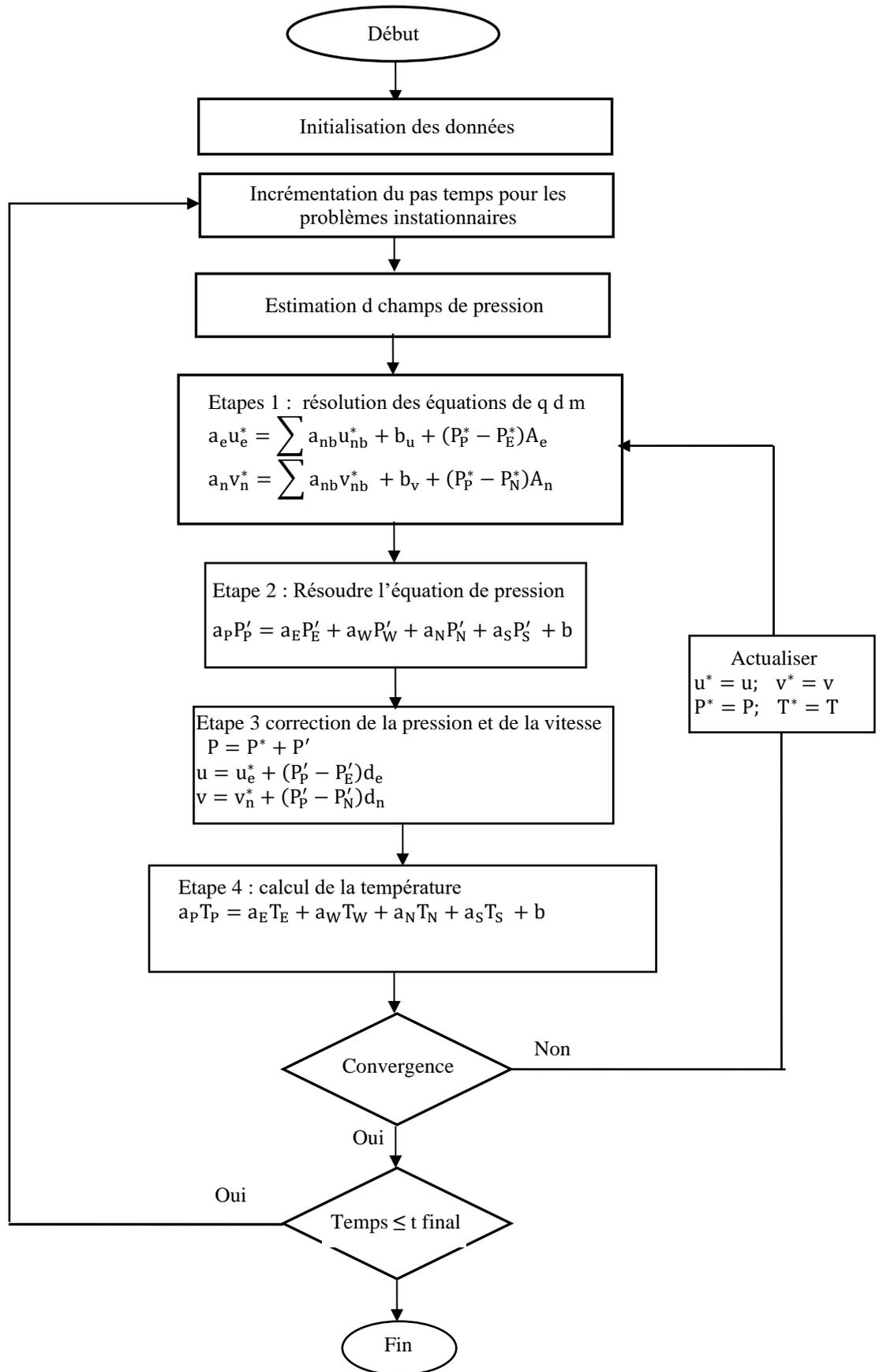


Figure IV-6) Etapes de l'algorithme SIMPLE

IV.8 Résolution des équations

Les équations de conservation de quantité de mouvement et d'énergie sont des équations différentielles aux dérivées partielles elliptiques, non linéaires, complexes et couplées. Le but de la méthode des volumes finis étant de transformer ces équations en un système d'équations algébriques qui peut s'exprimer sous forme matricielle :

$$[A] [\varphi] = [b] \quad \text{IV.49}$$

[A]: Matrice de $(NI-2) \times (NJ-2)$

[φ]: Vecteur d'inconnues $\varphi(I, J)$

[b] : Vecteur des quantités connues (source)

L'équation (IV-49) est résolue par une méthode itérative qui utilise l'approximation actuelle φ^n pour estimer une nouvelle solution φ^{n+1} . L'algorithme de résolution sera répété plusieurs fois jusqu'à ce que la solution satisfasse un critère de convergence prédéterminé.

Le système précédent est résolu itérativement par double balayage, pour cela nous nous ramenons à un système unidimensionnel sur une ligne ou une colonne et nous procédons à une résolution itérative par balayage successifs. Cette technique nous permet de transformer le système (IV.49) en un système tridiagonale qui peut être résolu par l'algorithme de Thomas (TDMA) voir section (II .75).

IV.8.1 La sous relaxation

La sous relaxation est utilisée de façon générale dans les problèmes non linéaire pour éviter la divergence du processus itératif et arriver à la convergence rapidement. Soit l'équation de transport (IV.32) :

$$A_P \varphi_P = \sum A_{nb} \varphi_{nb} + b \quad \text{IV.50}$$

soit φ^n , la valeur de la variable de l'itération précédente, on peut écrire l'équation sous la forme générale suivante:

$$\varphi_P = \varphi_P^n + \left[\frac{\sum A_{nb} \varphi_{nb}^n}{A_P} - \varphi_P^n \right] \quad \text{IV.51}$$

φ_P : La valeur de la variable à l'itération actuelle.

$\frac{\sum A_{nb}\varphi_{nb}}{A_P} - \varphi_P^n$ représente le changement de φ_P dans l'itération actuelle.

Pour stabiliser les calculs, on introduit un coefficient α appelée sous relaxation : $0 < \alpha_p < 1$.

$$\varphi_P = \varphi_P^n + \alpha_p \left[\frac{\sum A_{nb}\varphi_{nb}}{A_P} - \varphi_P^n \right] \quad \text{IV.52}$$

A la convergence $\varphi_P = \varphi_P^n$

Soit :

$$\frac{A_P}{\alpha_p} \varphi_P = \sum A_{nb}\varphi_{nb} + b + \frac{(1 - \alpha_p)A_P\varphi_P^k}{\alpha_p} \quad \text{IV.53}$$

IV.8.2 Critère de convergence

Le test de convergence est basé sur la comparaison entre des valeurs des variables calculées à la fin de deux itérations successives en chaque nœud du maillage. La convergence sera atteinte lorsque :

$$\left| \varphi_P^{(n+1)} - \varphi_P^n \right| < \varepsilon \quad \text{IV.54}$$

On arrête le processus itératif lorsque le résidu de l'équation est inférieur à une certaine tolérance. L'expression du résidu est déterminée à partir de l'équation (IV.54).

$$R_\varphi = \sum |A_E\varphi_E + A_W\varphi_W + A_N\varphi_N + A_S\varphi_S + b - A_P\varphi_P| \quad \text{IV.55}$$

Quand $R_\varphi \rightarrow 0$ pour toutes les variables à déterminer, cela indique que les champs des quantités φ obtenus vérifient toutes les équations et donc représentent la solution finale.

IV.9 Validation numérique

Dans cette étude, la configuration étudiée est une géométrie carrée, contenant de l'air comme fluide. Les parois horizontales de l'enceinte sont considérées comme adiabatiques, alors que celles verticales sont partiellement actives et maintenues à des températures différentes, ce qui permet l'échauffement et le refroidissement de l'enceinte. Pour vérifier la fiabilité du code de calcul, que nous avons élaboré pour résoudre les équations de base et validé les résultats prenant comme référence certaines études numériques disponibles dans la littérature. Nous allons exposer les solutions du problème de Davis [71] où il considère la même enceinte parallélépipédique allongée suivant un axe donné et de coupe carrée. Les deux parois verticales sont différentiellement chauffées alors que les parois horizontales sont isolées. L'étude a été menée pour quatre maillages : **101x101** nœuds. Les températures aux parois limites choisies sont les suivantes : $T_h = 0,5$ et $T_c = -0,5$. Le pas du temps adimensionnel Δt varie dans la gamme de 10^{-4} - 3×10^{-5} en fonction de l'augmentation du **Ra**, pour la stabilité de la solution obtenue. Dans ce calcul instationnaire, on a pris au démarrage une température initiale égale à T_h et des vitesses initiales nulles jusqu'à ce qu'un régime permanent soit atteint. De plus, au fur et à mesure que le nombre de Rayleigh augmente, l'écoulement atteint un état stable, le nombre requis de pas de temps augmente avec le nombre Ra.

Diverses quantités calculées pour la convection naturelle sont portées sur les tableaux ci-dessous.

- On compare dans le tableau (IV-2) les valeurs maximales des vitesses verticales et horizontales obtenues à partir du présent travail avec quatre résultats de type benchmark rapportés dans la littérature [71, 85-87] où le soin a été pris pour assurer une bonne précision des résultats numériques. Nos résultats se comparent très bien avec les données dans la littérature.
- Le tableau (IV-3) comporte les magnitudes centrales et maximales de la fonction de courant pour la présente étude et celle. On constate que nos résultats sont similaires avec ceux présentés [71, 85], avec un pourcentage d'erreur acceptable.
- Le tableau (IIV.4) présente les valeurs moyennes, maximales et minimales du nombre de Nusselt. On constate que les résultats sont similaires avec ceux présentés dans la littérature [84, 86, 88, 89] .

La comparaison dans ces tableaux est très satisfaisante car l'erreur relative sur le nombre de Nusselt est inférieure à 2%.

Ra	Source		Vitesse verticale Vmax	Vitesse horizontale Umax
10^3	De Vahl Davis [71]		-	-
	Markatos et al [87]		3.59	3.54
	Le Quere et al [86]		-	-
	Ramaswamy [85]		-	-
	Résultats du code de calcul	Power CDS Hybrid	3.59 3.55 3.57	3.56 3.55 3.57
10^4	De Vahl Davis [71]		19.62	16.18
	Markatos al [87]		19.44	16.18
	Le Quere et al [86]		19.63	16.18
	Ramaswamy [85]		19.62	-
	Résultats du code de calcul	Power CDS Hybrid	19.62 19.62 19.62	16.18 16.18 16.17
10^5	De Vahl Davis [71]		68.59	34.73
	Markatos et al [87]		69.08	35.73
	Le Quere et al [86]		68.65	34.75
	Ramaswamy [85]		68.62	-
	Résultats du code de calcul	Power CDS Hybrid	68.78 68.72 68.54	34.70 34.81 34.40
10^6	De Vahl Davis [71]		219.36	65.33
	Markatos et al [87]		221.80	68.81
	Le Quere et al [86]		220.57	64.63
	Ramaswamy [85]		232.97	-
	Résultats du code de calcul	Power CDS Hybrid	221.02 221.06 220.98	65.25 64.41 64.53
10^7	De Vahl Davis [71]		-	-
	Markatos et al [87]		-	-
	Le Quere et al [86]		699.30	148.8
	Ramaswamy [85]		717.04	-
	Résultats du code de calcul	Power CDS Hybrid	702.09 701.14 702.47	147.89 146.23 146.89

Chapitre 1 Tableau (IV-2) Comparaison des vitesses verticales et horizontales maximales.

Ra	Schémas	Présent code		ref [85]		ref [71]	
		$ \Phi_{mid} $	$ \Phi_{max} $	$ \Phi_{mid} $	$ \Phi_{max} $	$ \Phi_{mid} $	$ \Phi_{max} $
10^3	Power	1.173	1.173				
	CDS	1.172	1.176	1.170	1.170	1.170	1.170
	Hybride	1.175	1.176				
10^4	Power	5.070	5.074				
	CDS	5.070	5.075	5.099	5.099	5.071	5.071
	Hybride	5.070	5.075				
10^5	Power	9.118	9.762				
	CDS	9.115	9.623	9.217	9.756	9.111	9.612
	Hybride	9.115	9.623				
10^6	Power	16.450	16.885				
	CDS	16.406	16.845	16.682	17.420	16.320	16.750
	Hybride	16.420	16.859				
10^7	Power	29.615	30.450				
	CDS	29.461	30.278	29.43 -	31.55 -	- -	- -
	Hybride	29.627	30.460				

Tableau (IV-3) Comparaison des magnitudes centrales et maximum de la fonction de courant.

Φ_{mid} est la valeur de la fonction de courant au milieu de l'enceinte,

Φ_{max} : est la valeur maximale de la fonction de courant.

U_{max} , et V_{max} : sont les valeurs maximales des vitesses horizontale et verticale sur les deux plans de coupe.

Nu_{av} : la valeur moyenne du nombre de Nusselt à travers la cavité.

Nu_{max} et Nu_{min} sont les valeurs maximales et minimale de Nusselt

Ra	Source	Nu _{av}	Nu _{min}	Nu _{max}
10 ³	De Vah Davis [84]	1.118	0.692	1.505
	Le Quéré et al [86]	-	-	-
	Chenoweth et al [88]	1.118	-	-
	Hortmann et al [89]	-	-	-
	Présent code	1.118	0.684	1.490
10 ⁴	De Vah Davis [84]	2.243	0.586	3.528
	Le Quéré et al [86]	-	-	-
	Chenoweth et al [88]	2.244	-	-
	Hortmann et al [89]	2.244	-	3.530
	Présent code	2.241	0.565	3.505
10 ⁵	De Vah Davis [84]	4.519	0.729	7.717
	Le Quéré et al [86]	4.523	0.728	7.720
	Chenoweth et al [88]	4.520	-	-
	Hortmann et al [89]	4.522	-	7.720
	Présent code	4.525	0.734	7.730
10 ⁶	De Vah Davis [84]	8.800	0.898	17.925
	Le Quéré et al [86]	8.826	0.976	17.536
	Chenoweth et al [88]	8.820	-	-
	Hortmann et al [89]	8.825	-	17.536
	Présent code	8.827	0.926	17.565

Tableau (IV-4) comparaison des valeurs moyennes, maximales et minimales du nombre de Nusselt

IV.9.1 Champ Thermique

Parmi les paramètres gouvernant le système d'équation, nous distinguons, le nombre de Rayleigh (Ra), de Prandtl qui caractérise l'écart de la température et la nature du fluide.

Le champ thermique est représenté par les contours de température, illustrés respectivement sur les figures (IV-7), pour un nombre Rayleigh variant entre 10³ et 10⁷. On remarque que le mode de transfert de chaleur par conduction est dominant pour une valeur de Rayleigh inférieur à 10³. Le phénomène de convection est actif, pour un nombre de Rayleigh élevé, de l'ordre de 10⁵. On constate que lorsque le nombre de Rayleigh augmente, les isothermes se rapprochent les unes par rapport aux autres et se condensent près des zones actives, où les gradients de température sont élevés, alors qu'ils sont négligeables pour le reste des murs de la cavité. Cela traduit l'existence des couches limites thermiquement fortes près de ces zones. Nos résultats se comparent très bien avec les données de la littérature (figures (IV-7), (IV-8) et (IV-9))

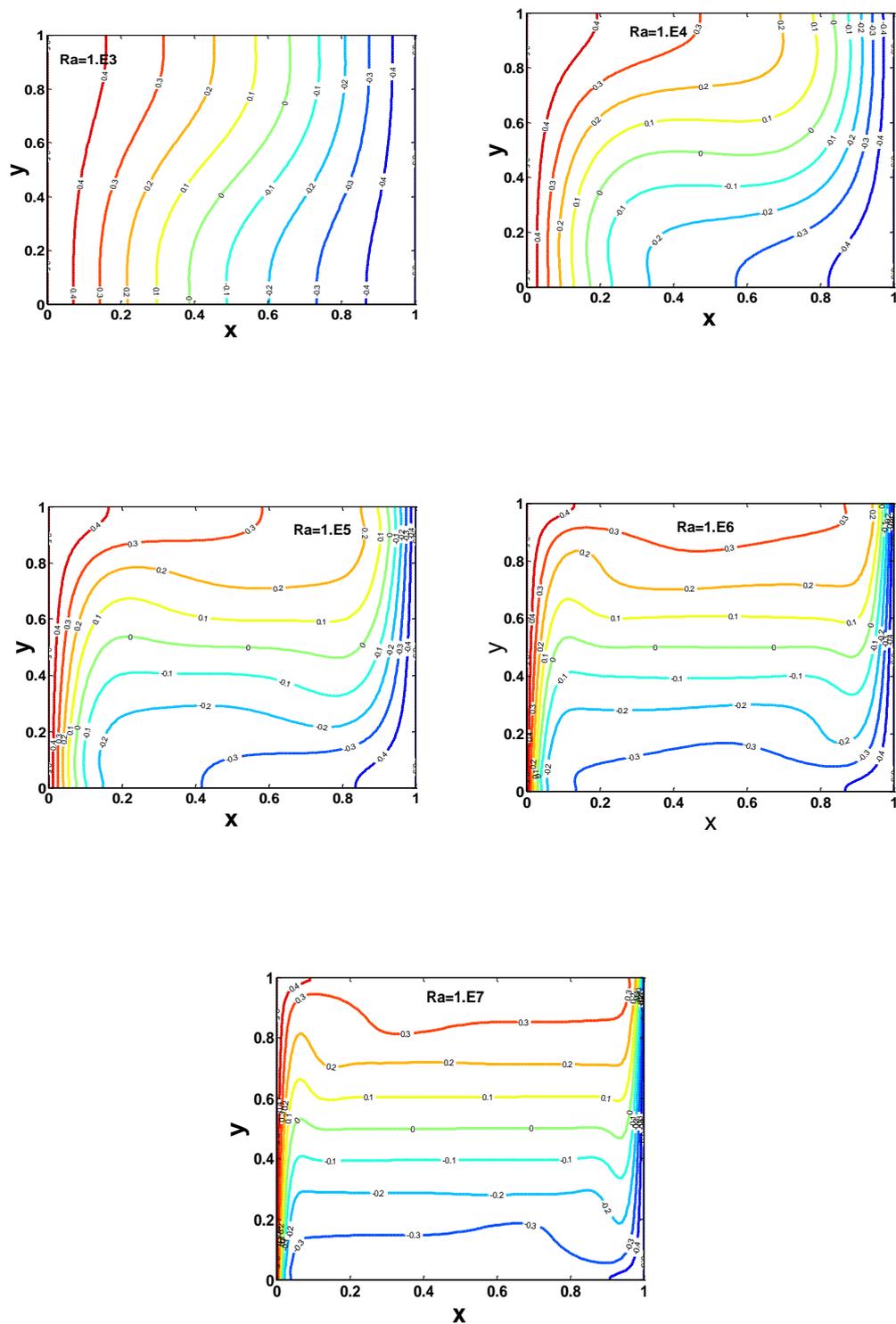


Figure (IV-7) Comparaison des isothermes ($Ra=10^3-10^7$)
(Résultats obtenus au moyen du code)

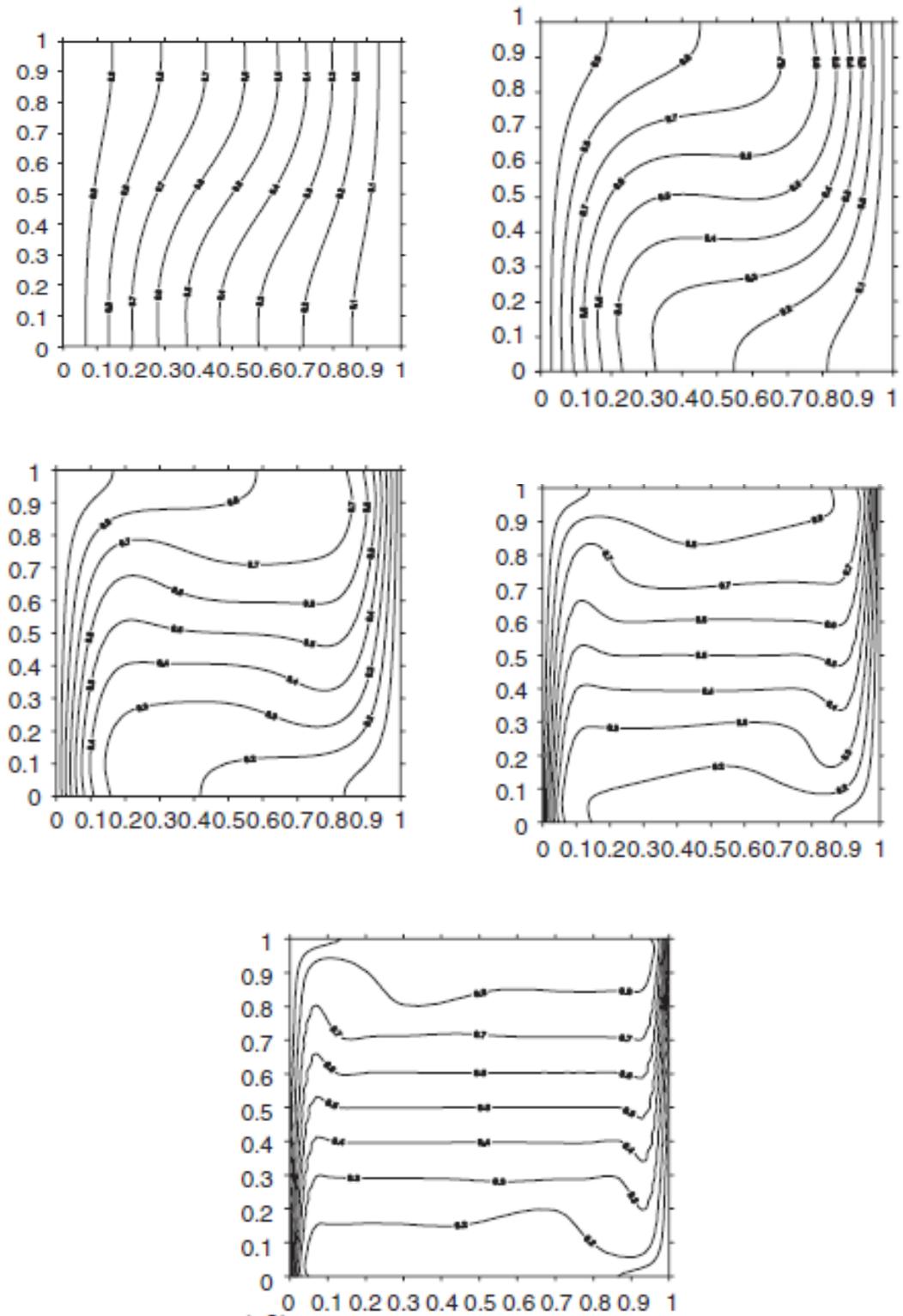


Figure (IV-8) Comparaison des isothermes ($Ra=10^3-10^7$)
(Résultats de la référence [90])

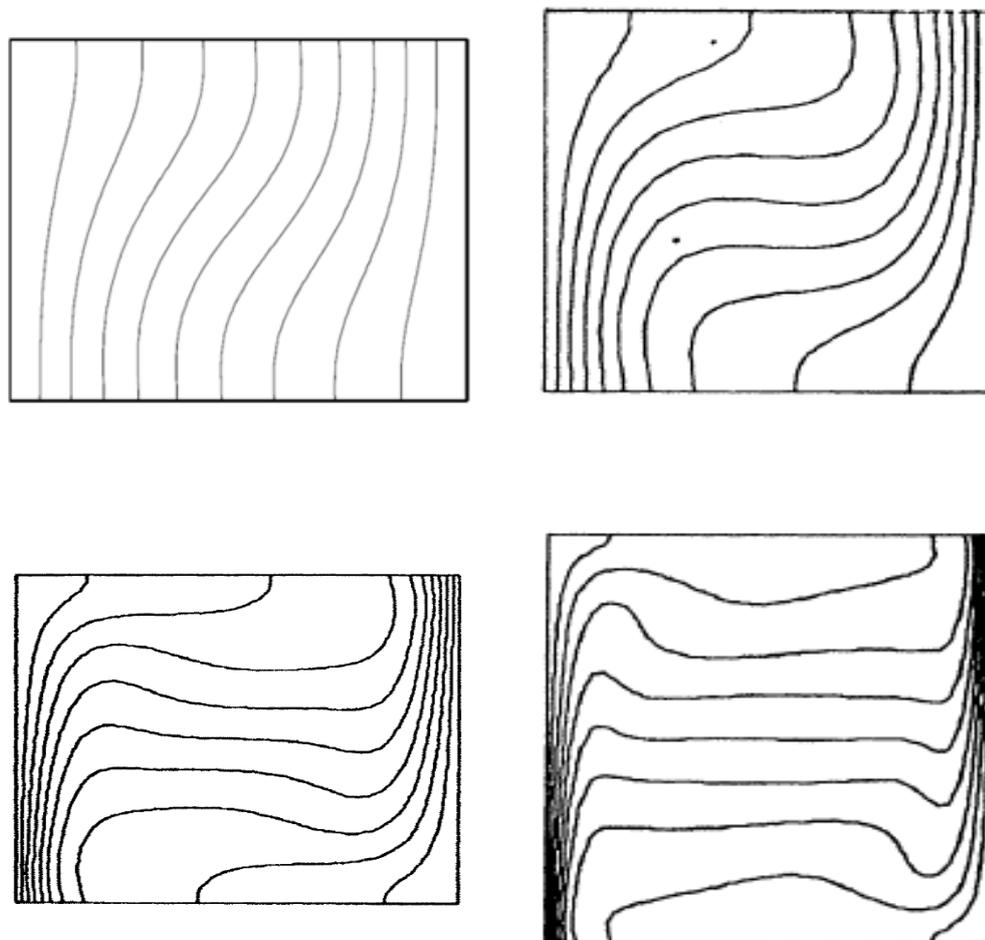


Figure (IV-9) Comparaison des isothermes ($Ra=10^3-10^7$)
(Résultats de la référence [71])

IV.9.2 Champs Dynamique

La figure (IV-10), présente la circulation du fluide à l'intérieur de la cavité pour différentes valeurs de Rayleigh. Lorsque celui-ci est inférieur ou égal à 10^3 , une zone stagnante apparaît au centre de la cavité, l'échange thermique s'effectue d'une manière intense aux coins de la cavité.

D'autre part, les lignes de courant deviennent fortement intenses à proximité de zones actives pour un nombre de Rayleigh supérieur à 10^5 . Des cellules de recirculation apparaissent à l'intérieur de la cavité, l'une est au côté haut gauche et l'autre au côté bas droit. Les deux coins restants sont moins actifs. Une comparaison du champ dynamique est montrée par les contours des lignes de courant. Les résultats obtenus par notre code se concordent avec la littérature [71, 90] (figures (IV-11) et (IV-12))

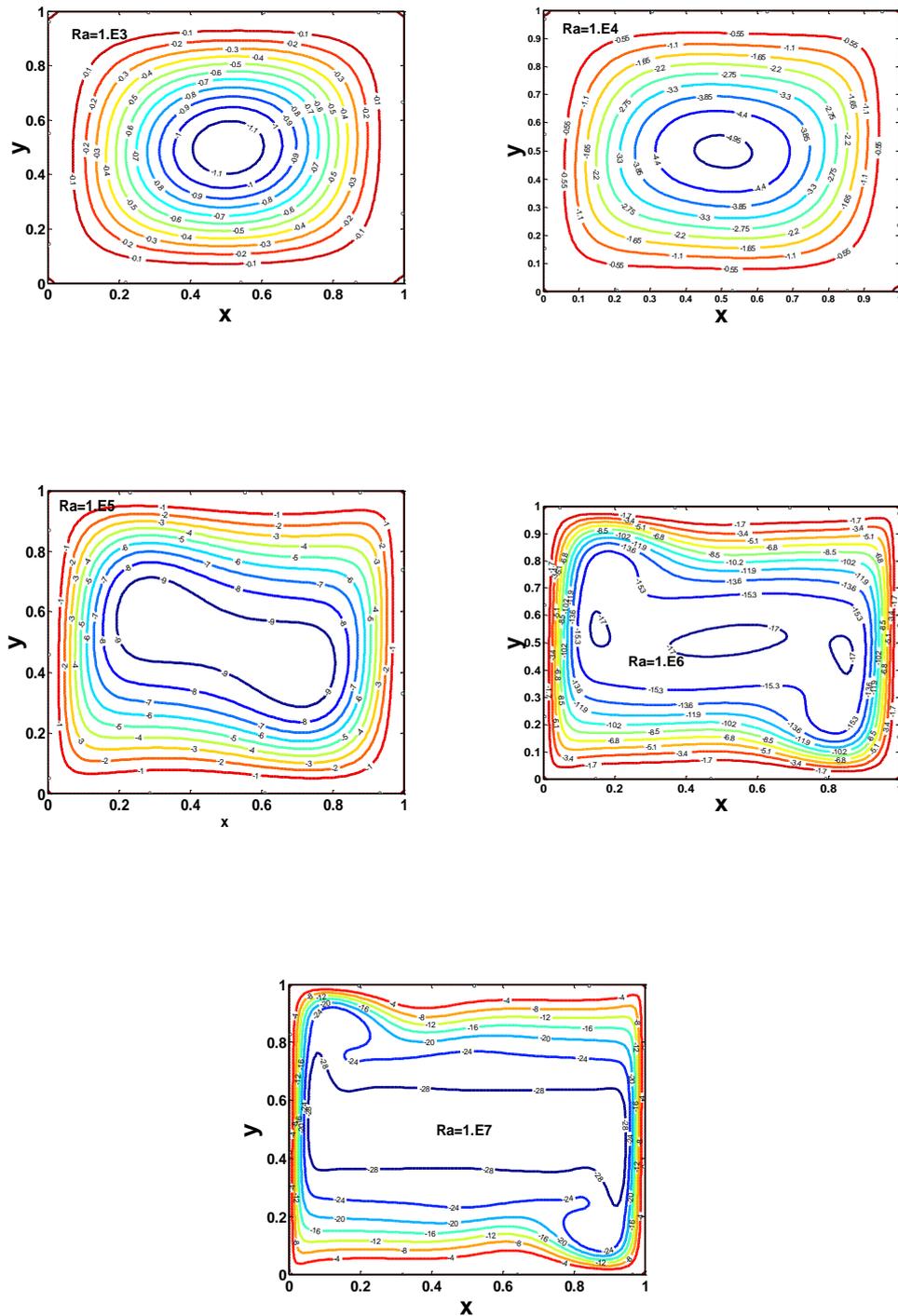


Figure (IV-10) lignes de courant pour $Ra=10^3-10^7$ (Résultats obtenus au moyen du code)

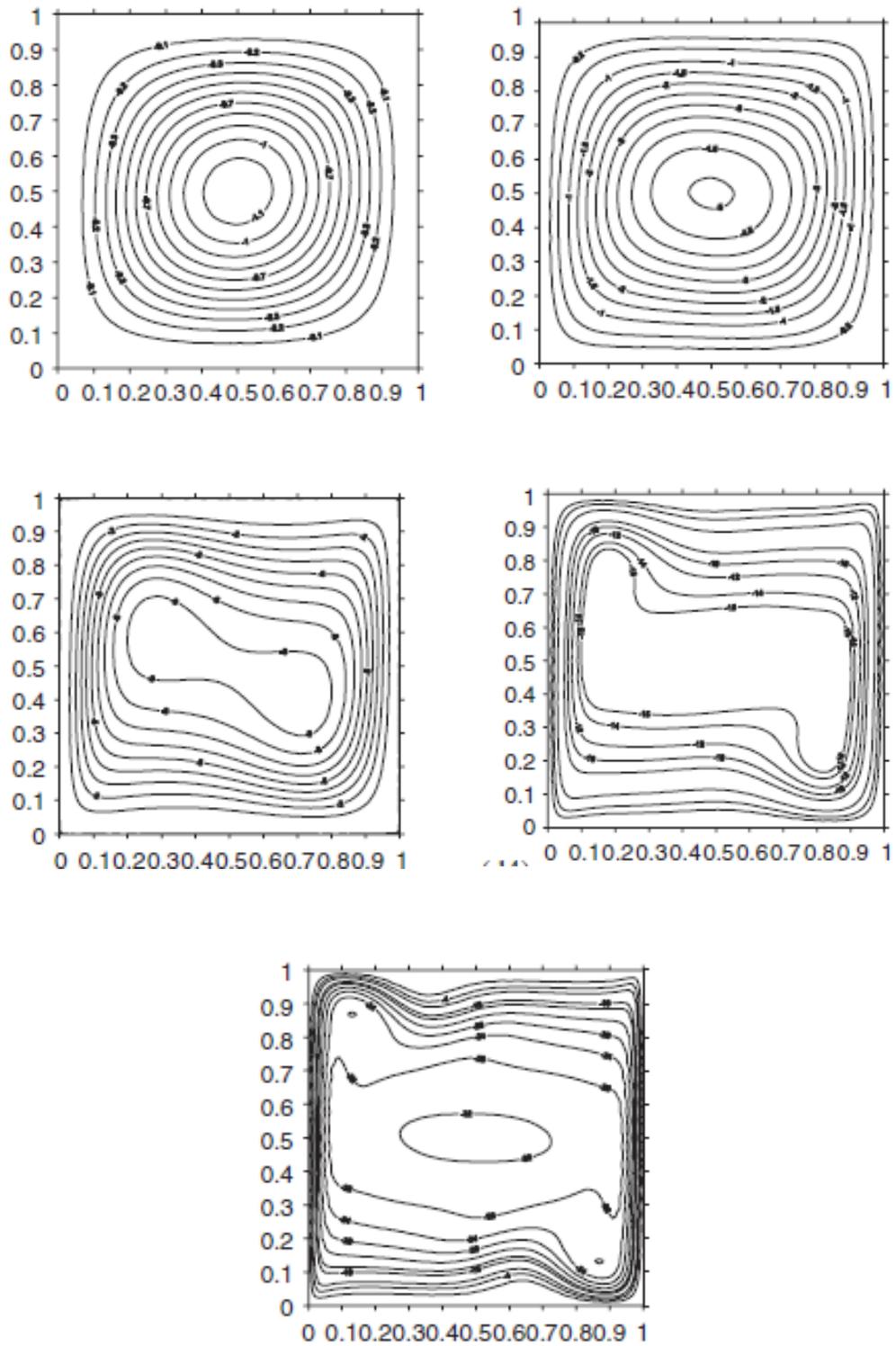


Figure (IV-11) lignes de courant pour $Ra=10^3-10^7$ (Résultats de la référence [71])

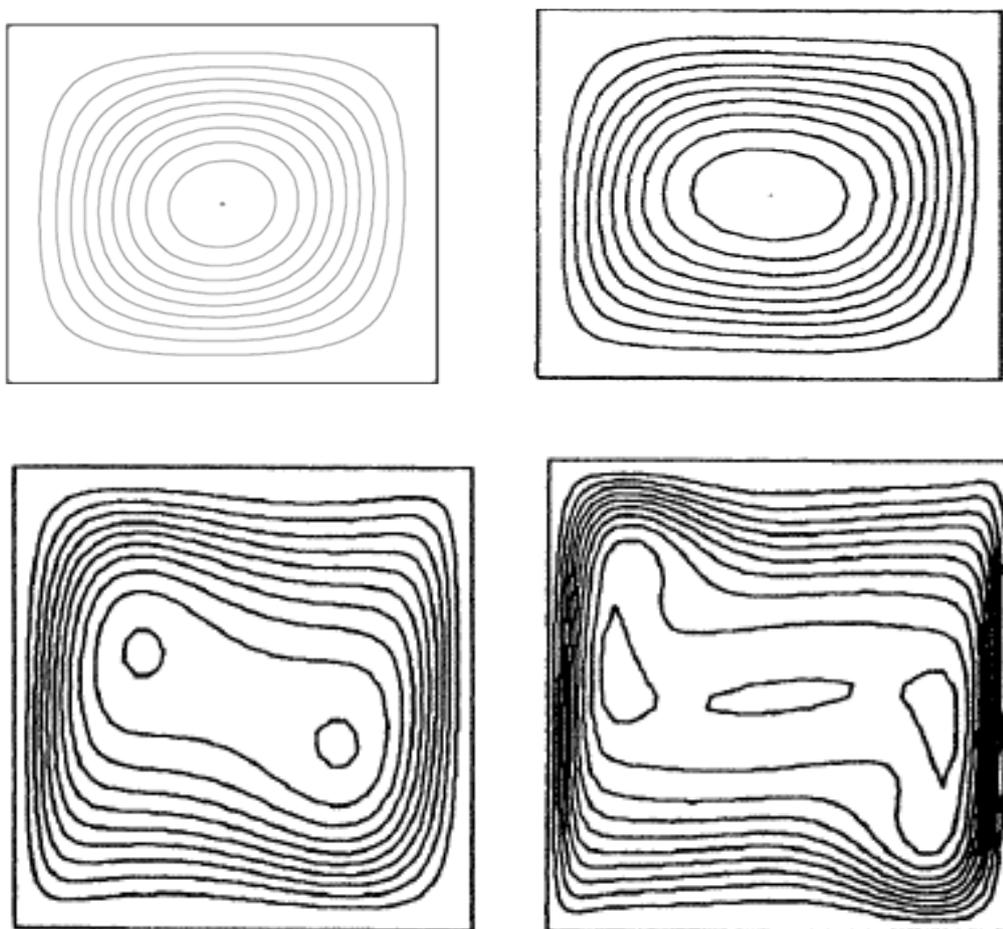


Figure (IV-12) lignes de courant pour $Ra=10^3-10^6$ (Résultats de la référence [90])

IV.9.3 Champs de vitesses :

Les vitesses horizontale et verticale sont présentées dans les figures (IV-9), (IV-10). Lorsque le nombre de Rayleigh augmente, on constate que l'amplification de l'écoulement se rapproche des parois actives de la cavité.

Pour les cas de $Ra = 10^3$, il n'y a pas assez de mouvement de convection du fluide dans la cavité en raison de la domination de la force visqueuse, qui est délimitée par une ligne presque verticale. Au fur et à mesure que le nombre de Rayleigh augmente, la force de flottabilité augmente, ce qui donne lieu à une convection efficace des fluides et qui conduit à un mouvement circulaire vortex. Ce mouvement est indiqué par les valeurs de vitesse u positive et négative le long du plan vertical symétrique, comme indiqué dans la figure ci-dessous.

La comparaison des vitesses verticales et horizontales avec la référence [71] figures (IV-13), (IV-14).et (IV-15), (IV-16).montre une bonne concordance des résultats.

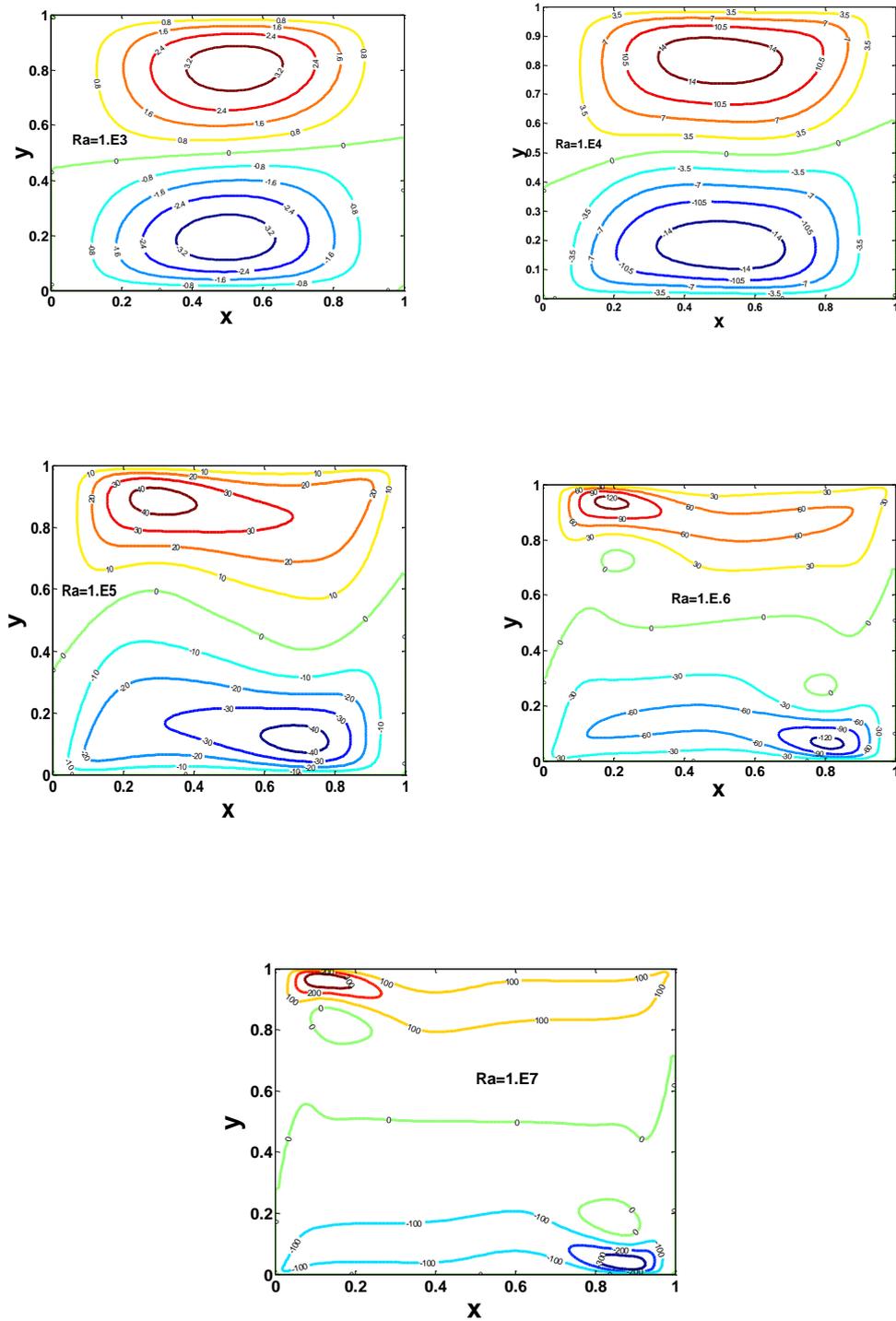


Figure (IV-13) Vitesse horizontale ($Ra=10^3-10^7$) Résultats obtenus au moyen du code

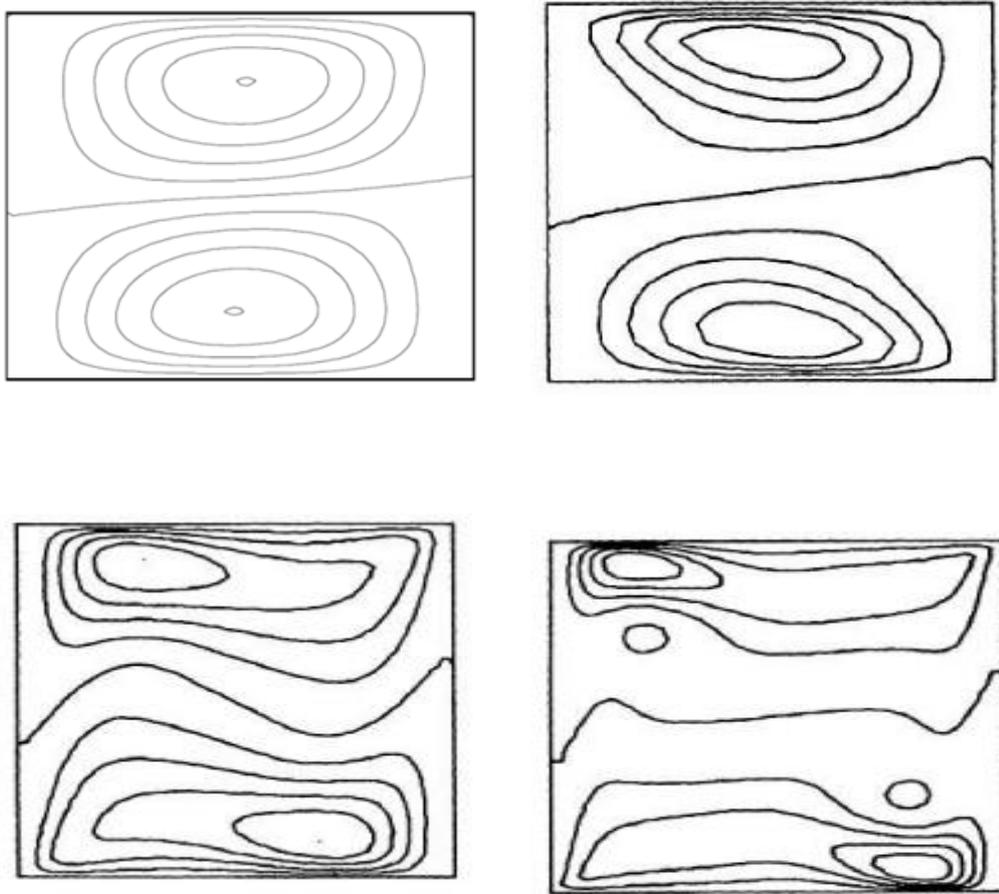


Figure (IV-14) Vitesse horizontale ($Ra=10^3-10^6$) Résultats de la référence [71]

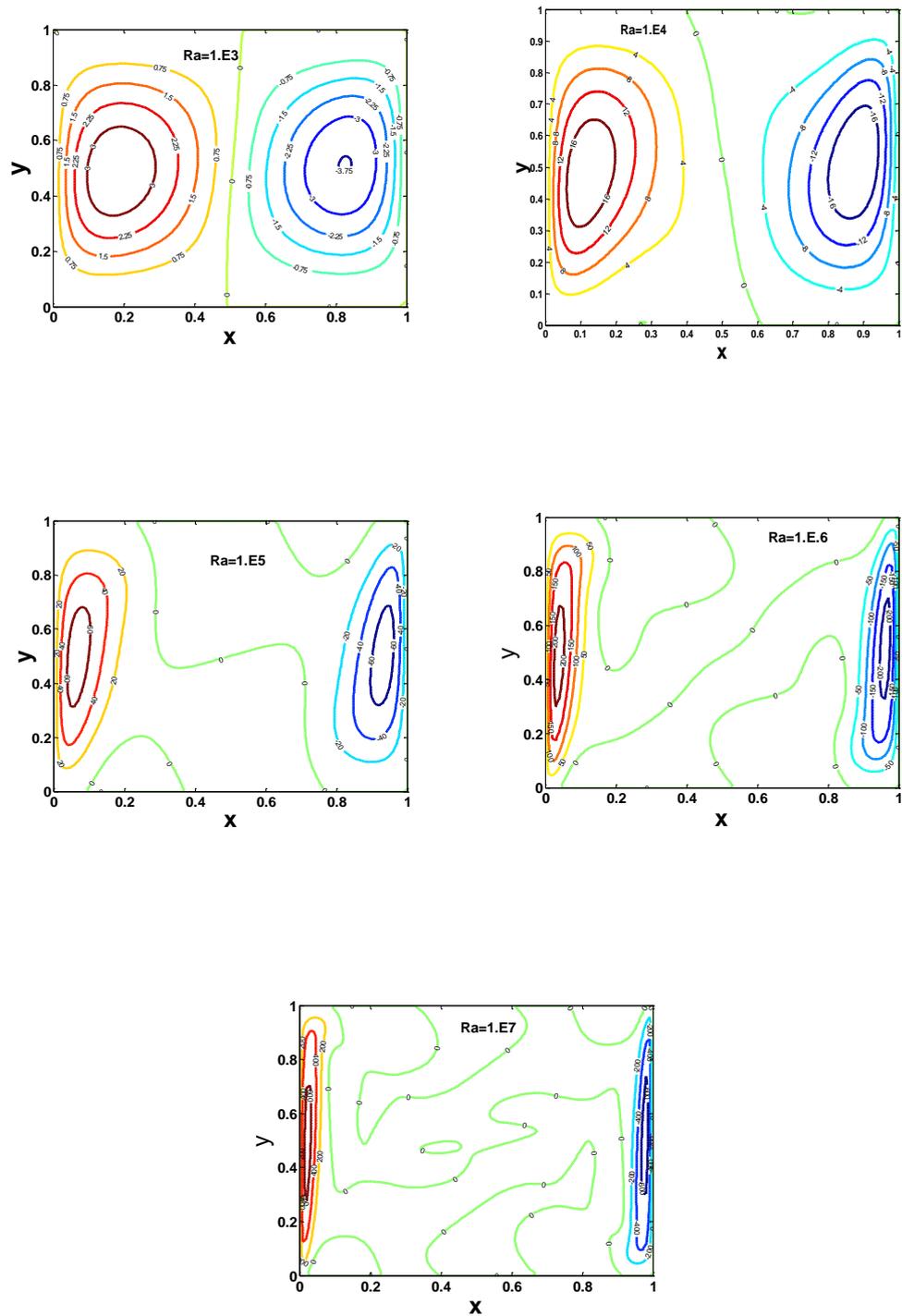


Figure (IV-15) Vitesse verticale ($Ra=10^3-10^7$) (Résultats obtenus au moyen du code)

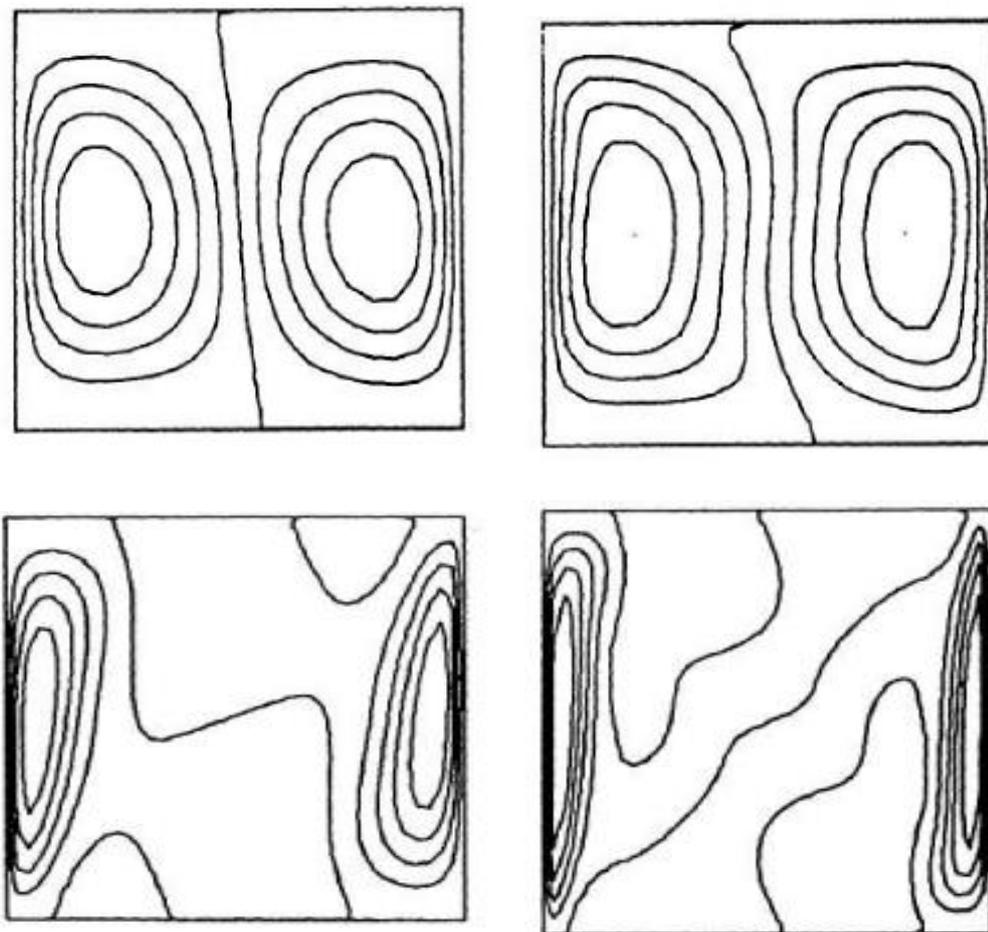


Figure (IV-16) Vitesse verticale ($Ra=10^3-10^6$)(Résultats de la référence [71])

IV.9.4 Nombre de Nusselt

Le nombre de Nusselt est un paramètre sans-dimension important dans le transfert de chaleur par convection. Il est présenté au niveau de la paroi chaude pour différents nombres de Rayleigh sur la figure (IV-17). Il est intéressant d'indiquer que les valeurs maximales du nombre de Nusselt dans la direction y ne se situent pas au bas de la paroi, mais à proximité de celle-ci. Un examen des valeurs dans ces figures indique clairement que ce nombre atteint son maximum lorsque le contact entre le fluide et la paroi chaude est réalisé, à cette étape, l'échange thermique devient important. Ensuite, il diminue progressivement jusqu'à atteindre une valeur minimale puisque la différence de température entre le fluide et la paroi chaude commence à chuter, ce qui engendre un flux de chaleur faible. Ce nombre croît avec Ra , ce qui est en bon accord avec les résultats donnés dans la littérature [90].

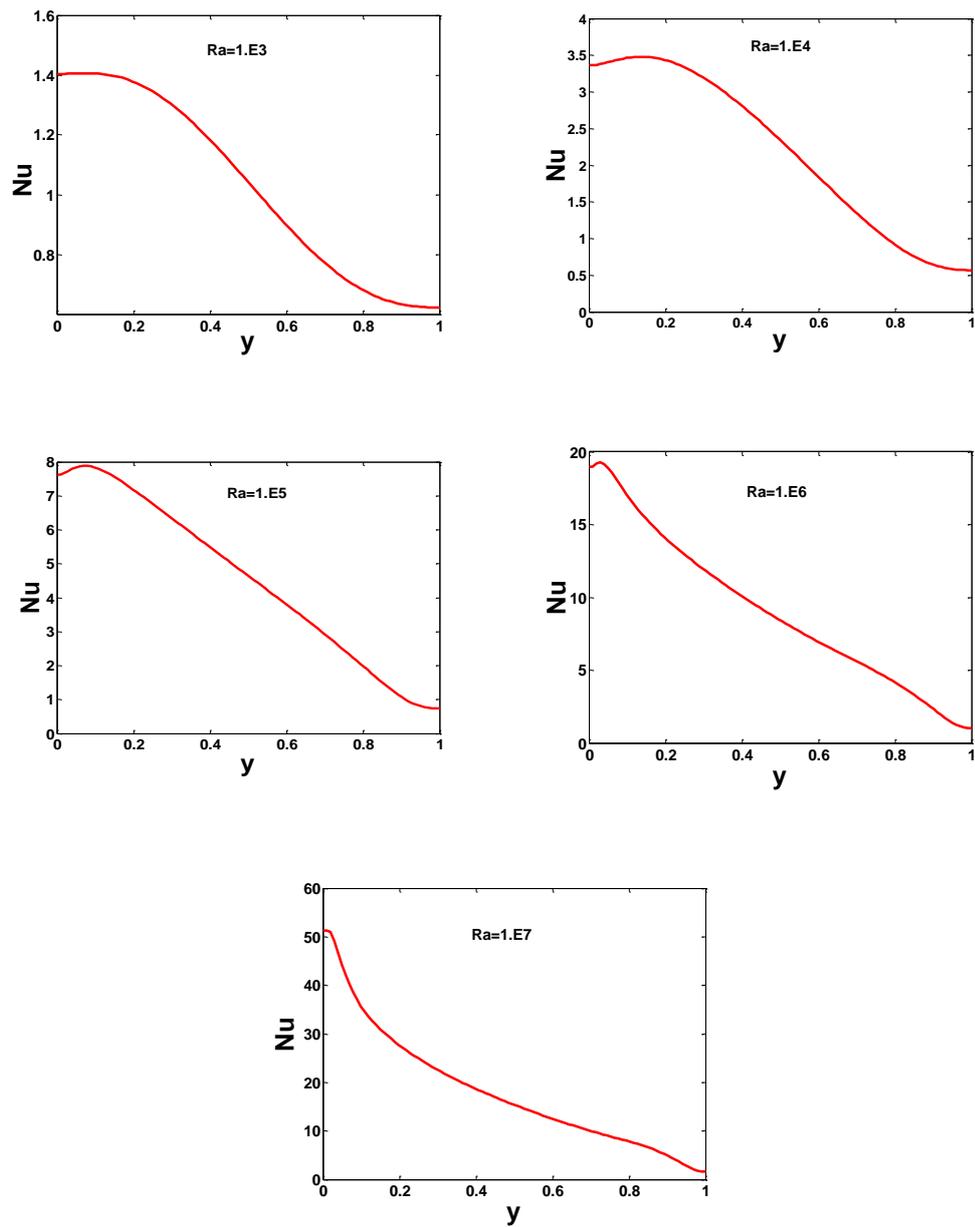


Figure (IV-17) Evolution du nombre de Nusselt au niveau de la paroi chaude ($Ra=10^3-10^7$) (Résultats obtenus au moyen du code

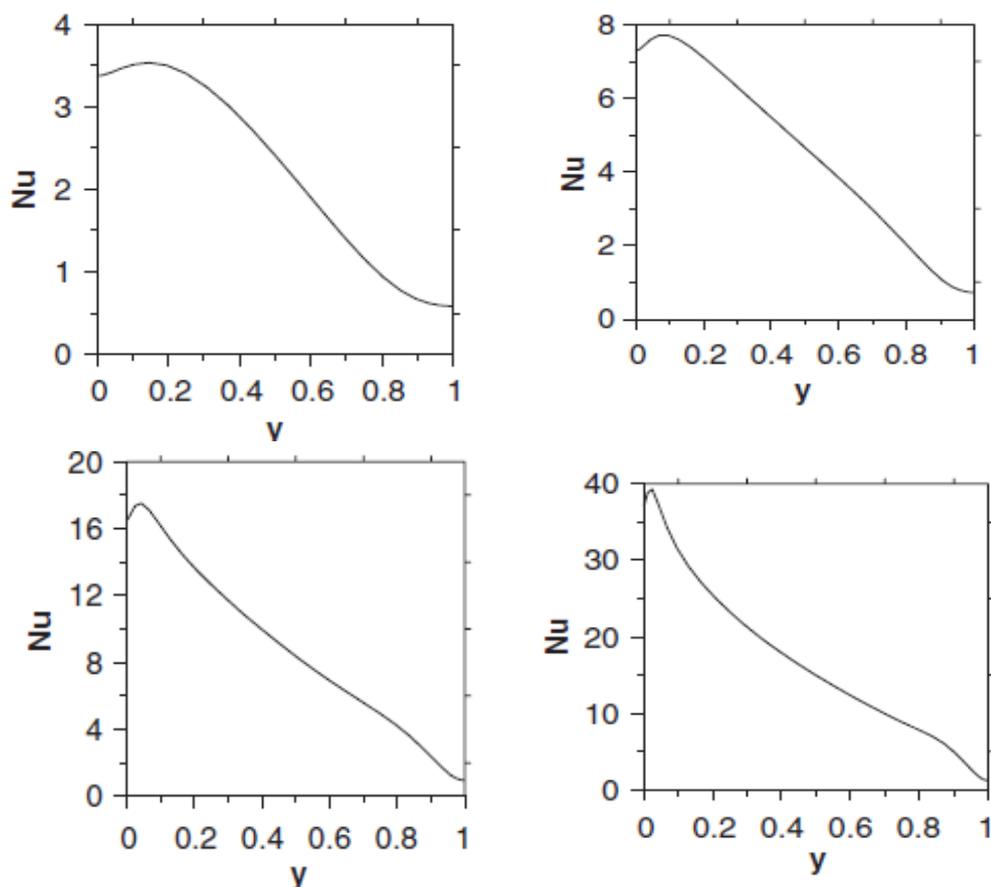


Figure (IV-18) comparaison du nombre de Nusselt au niveau de la paroi chaude. Résultats de la référence [90]

IV.9.5 Profils de vitesse, température

Les Figures (IV.19)-(IV.20), et (IV.21)-(IV.22) montrent respectivement la comparaison des vitesses verticale et horizontale le long des lignes médianes de la cavité avec la référence [92]. Globalement, une bonne concordance est remarquée. Étant donné que toutes les conditions limites de vitesse sans glissement sont appliquées aux frontières pour le problème de convection naturelle, une distribution symétrique des vitesses apparaît dans la figure ci-dessous.

La valeur de la vitesse atteint son maximum pour $Ra = 10^7$ avec des gradients de vitesse prononcés au centre du plan central vertical. En effet, à des valeurs plus élevées du nombre de Rayleigh, la caractéristique non linéaire de la convection de fluide devient plus dominante dans le champ d'écoulement. Les figures (IV.24), (IV.25) et (IV.26) illustrent l'évolution des profils de vitesses et de températures sur le plan médian horizontal et vertical de la cavité.

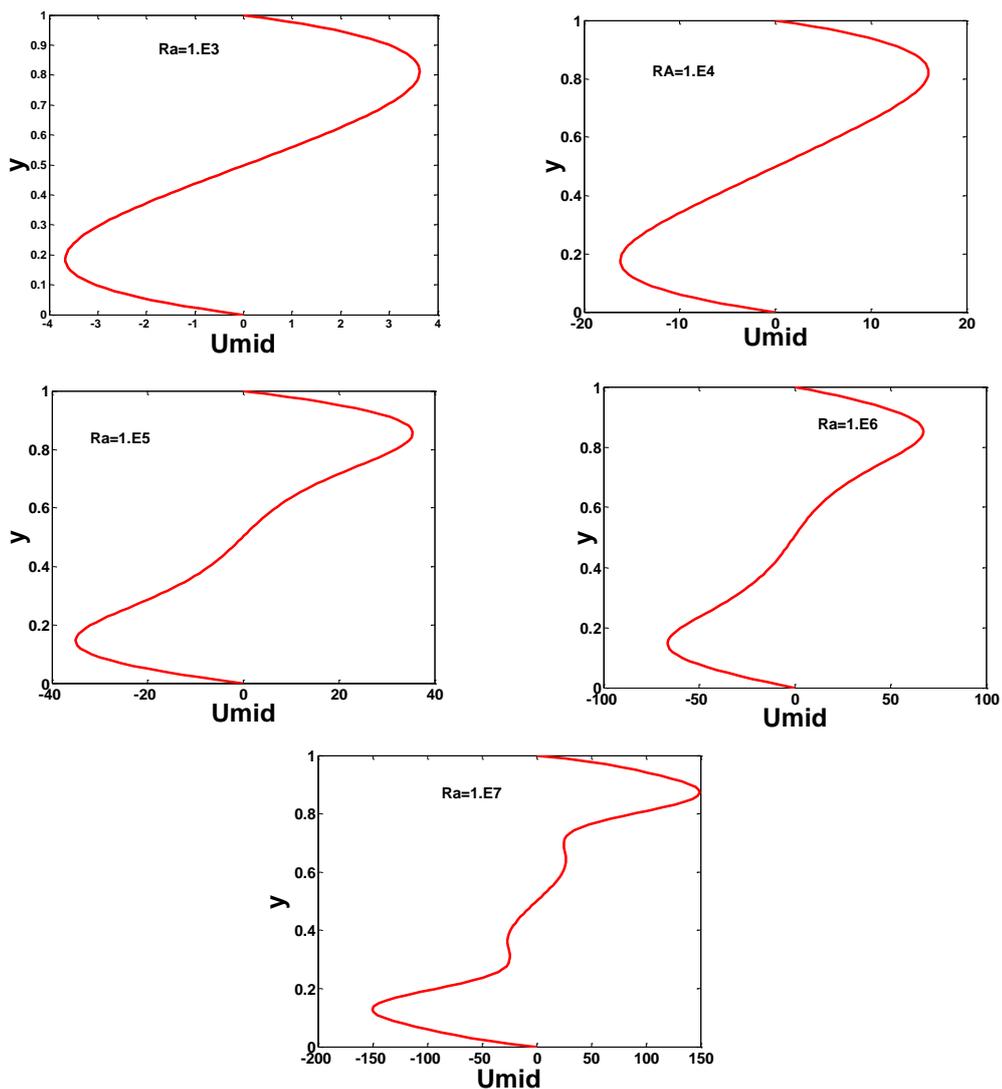


Figure (IV-19) Profils de vitesses horizontales sur le plan médian vertical ($x=0.5$) ($Ra=10^3-10^7$) Résultats obtenus au moyen du code

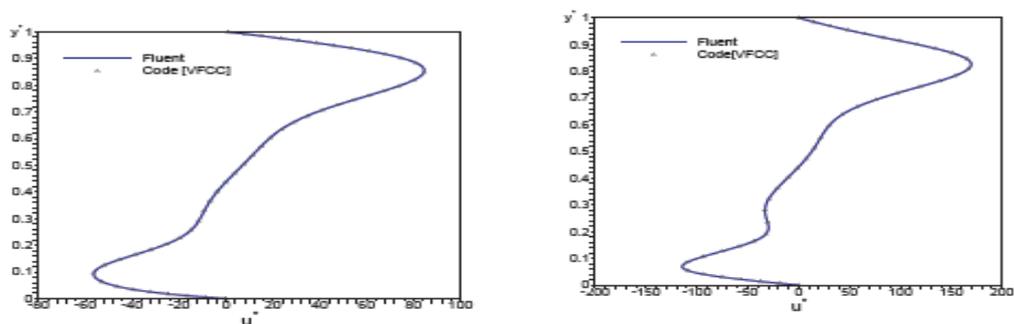


Figure (IV-20) Profils de vitesses horizontales sur le plan médian vertical ($x=0.5$) ($Ra=10^6-10^7$) Résultats de la référence [92]

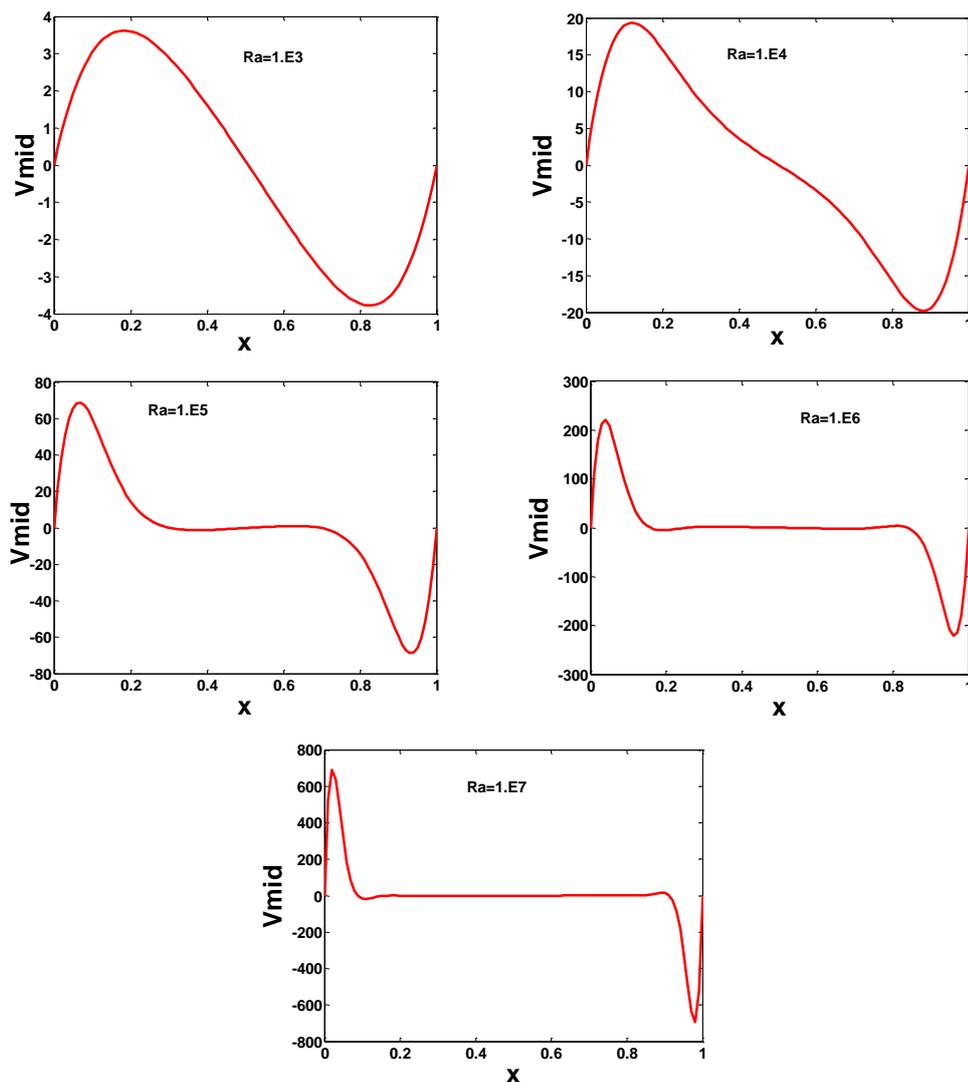


Figure (IV-21) Profils de vitesses verticales sur le plan médian horizontal ($y=0.5$) (Résultats obtenus au moyen du code)

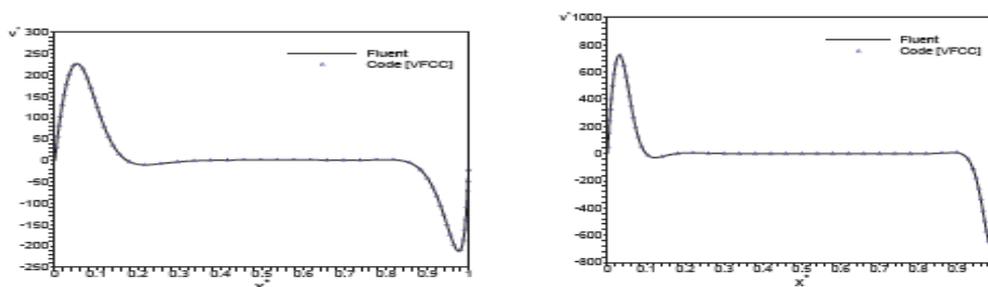


Figure (IV-22) Comparaison des profils de vitesses verticales sur le plan médian horizontal ($y=0.5$) (Résultats de la référence [92])

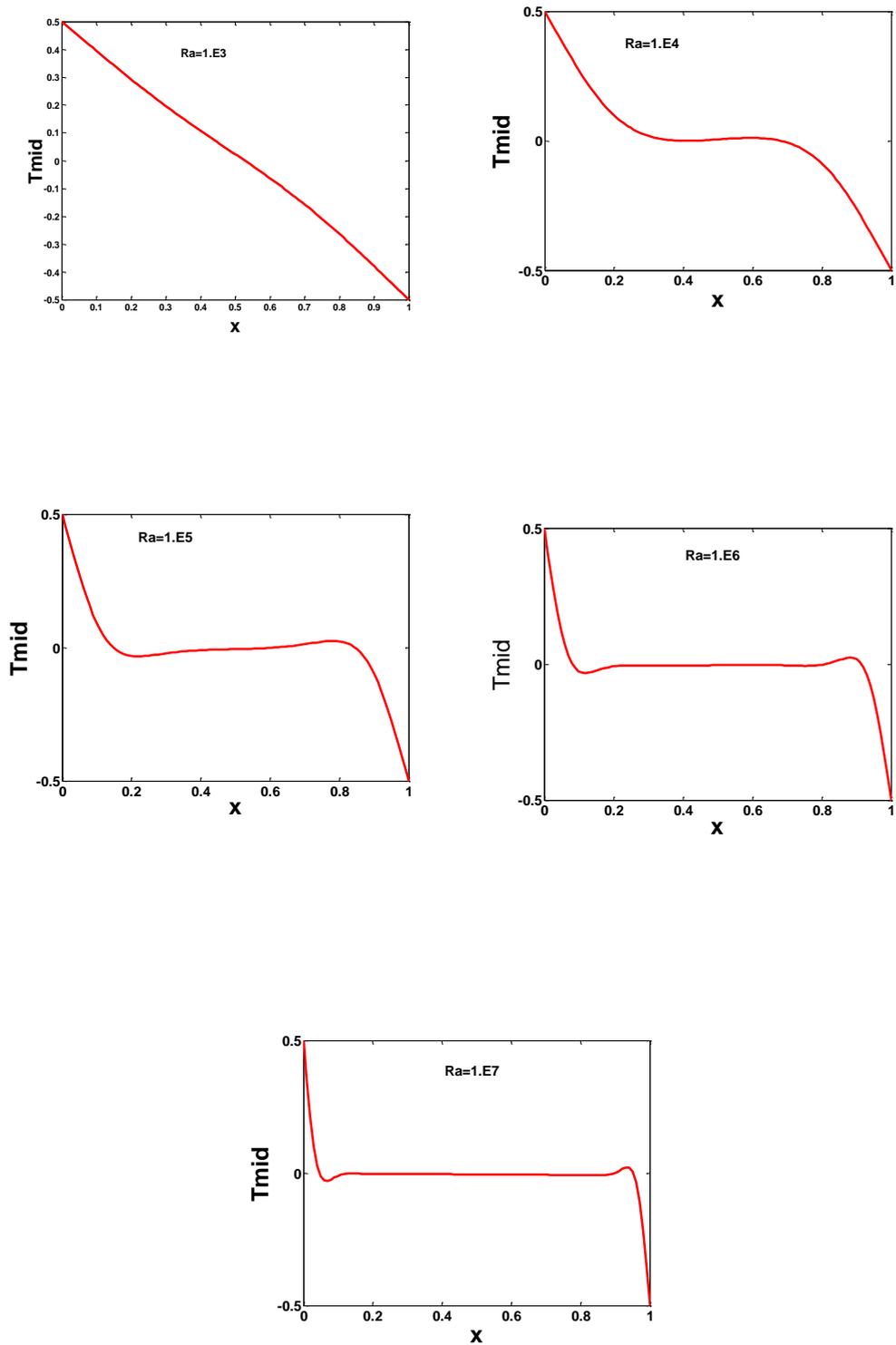


Figure (IV-23) Profils de température sur le plan médian horizontal ($y=0.5$)

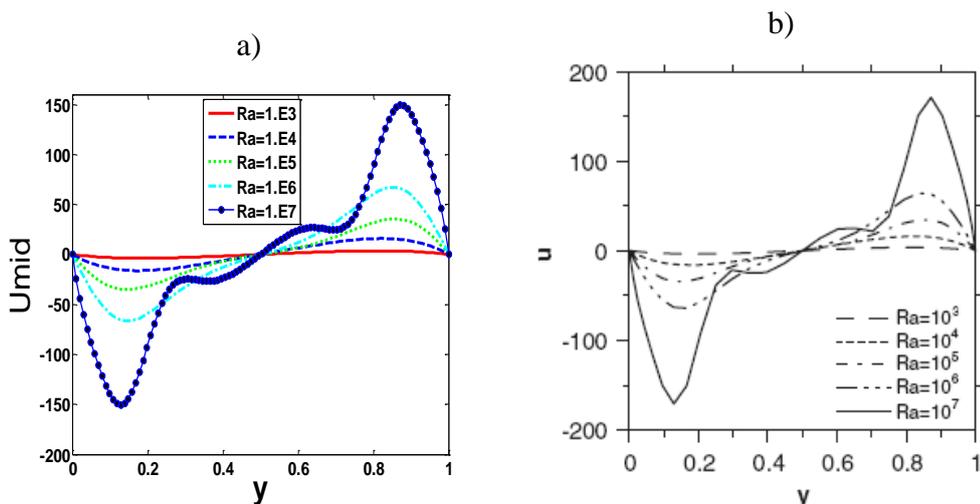


Figure (IV-24) Comparaison des profils de vitesses horizontales sur le plan médian vertical ($x=0.5$)

- a) Résultats obtenus au moyen du code.
- b) Résultats de la référence[90]

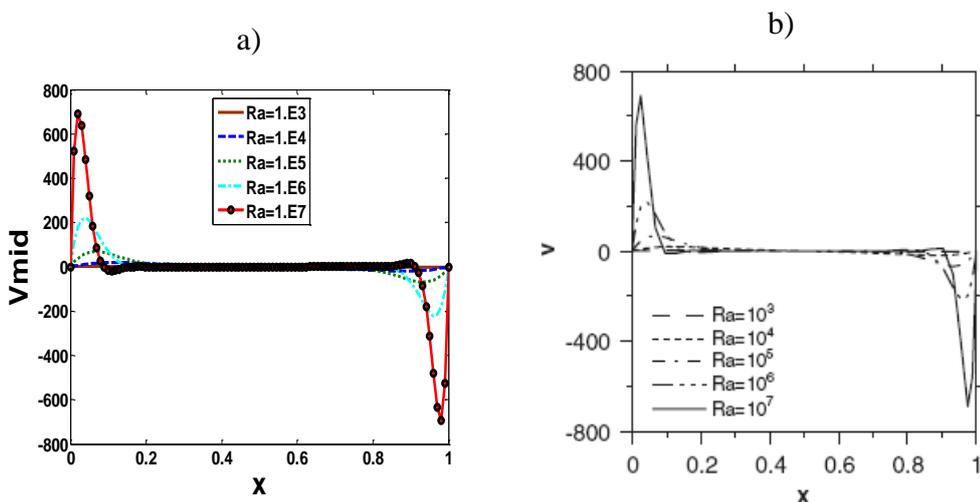


Figure (IV-25) Comparaison des profils de vitesses verticales sur le plan médian horizontal ($y=0.5$)

- a) Résultats obtenus au moyen du code.
- b) Résultats de la référence[90]

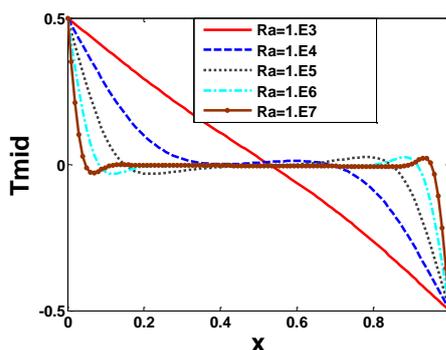


Figure (IV-26) Profils de température sur le plan médian horizontal ($y=0.5$)

IV.10 Conclusion

Dans cette section, nous avons présenté l'étude de la convection naturelle dans le but de l'appliquer pour un problème inverse de solidification d'un matériau. La configuration géométrique du modèle physique est une cavité carrée, soumise à un gradient de température horizontal. Les conditions aux frontières sont de type Dirichlet (températures imposées).

Une modélisation mathématique est formulée par les trois équations de continuité, les équations de Navier-Stokes et l'équation de l'énergie. Ces équations ont été discrétisées et résolues par la méthode des volumes finis basée sur l'algorithme SIMPLE pour le couplage pression-vitesse. Ce modèle a ensuite été mis en œuvre par un code matlab.

Ce modèle peut être correctement utilisé pour obtenir des résultats dans l'intervalle des nombres de Rayleigh (10^3 à 10^7). Pour un nombre faible la dominance du mode de transfert de chaleur est par conduction. Au-delà de cette valeur ($Ra > 1000$), la convection domine et apparaît d'une manière plus claire.

Dans cette étude, les caractéristiques détaillées des phénomènes d'écoulements, telles que les champs, de température, dynamique, de vitesse et le nombre de Nusselt calculés pour des valeurs de nombre de Rayleigh de 10^3 - 10^7 sont présentées sous forme de tableaux ou de graphes.

La comparaison des résultats obtenus avec la littérature montre que le présent algorithme numérique couplé système d'équations est efficace et robuste. Il prédit avec précision le processus de transfert de chaleur par convection à l'intérieur de la cavité.

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail, on a étudié les problèmes inverses de conduction thermique associée à un processus de changement de phase solide/liquide.

On a présenté dans le chapitre I des généralités sur les changements de phase et des définitions liées aux méthodes inverses de résolution de problèmes de conduction thermique associée à un processus de changement de phase.

Dans le chapitre II, on a présenté la résolution du problème de contrôle de l'évolution du front de solidification d'un matériau pur dans le cas où le système est gouverné par l'équation de la chaleur en géométrie (1-D). Les résultats obtenus montrent d'une part, que l'inconvénient des méthodes globales d'optimisation peut être évité par une introduction d'un état final et le choix de l'initial guess et d'autre part que l'algorithme mis au point est efficace.

Dans le chapitre III, on a modélisé un problème de solidification d'un matériau pur en géométrie (1-d) par la méthode enthalpique. Les équations gouvernantes, sont résolue numériquement dans un maillage uniforme à l'aide d'un schéma de différences finis explicite pour calculer l'enthalpie, la température et la position du front de solidification. Les résultats obtenus par le code de calcul ont été validés par la comparaison à la solution analytique de Newman.

On a traité la résolution numérique de la convection naturelle dans le chapitre IV en vue de la préparer pour un problème inverse de changement de phase en présence de la convection. Ce phénomène est gouverné par les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie. La résolution des équations décrivant le système ont été discrétisées et résolue numériquement par la méthode des volumes finis basée sur l'algorithme SIMPLE pour le couplage pression-vitesse. L'algorithme a donné d'excellents résultats par comparaison aux résultats disponibles dans la littérature

On notera qu'il possible d'appliquer les méthodes inverses pour contrôler la solidification en présence de la convection.

L'étude du premier problème montre que les méthodes inverses de gradient sont très puissantes et qu'il est possible de résoudre les problèmes inverses de conduction thermique (gouvernés par l'équation de la chaleur non-linéaires) par les méthodes d'optimisation stables et précises.

On notera aussi que la résolution d'un problème de fusion de matériau pur sera similaire à celui d'un problème de solidification.

Dans l'avenir, il est nécessaire de faire des essais expérimentaux afin de montrer l'efficacité de l'algorithme du contrôle.

Il est préférable aussi de construire des algorithmes permettant la résolution de problèmes non-linéaires (les propriétés thermophysiques varient en fonction de la température) en deux et trois dimensions.

Il est également souhaitable de construire des algorithmes de contrôle en utilisant la méthode enthalpique afin de traiter des problèmes où le matériau subit un changement de phase étalé.

BIBLIOGRAPHIE

1. Saito, A., *Recent advances in research on cold thermal energy storage*. International Journal of Refrigeration, 2002. **25**(2): p. 177-189.
2. Zhao, C., et al., *An equivalent algorithm for simulating thermal effects of magma intrusion problems in porous rocks*. Computer methods in applied mechanics and engineering, 2003. **192**(31): p. 3397-3408.
3. Zhao, C., et al., *Numerical modelling of chemical effects of magma solidification problems in porous rocks*. International journal for numerical methods in engineering, 2005. **64**(6): p. 709-728.
4. Assessment, A.C.I., *Impacts of a Warming Arctic-Arctic Climate Impact Assessment*. Impacts of a Warming Arctic-Arctic Climate Impact Assessment, by Arctic Climate Impact Assessment, pp. 144. ISBN 0521617782. Cambridge, UK: Cambridge University Press, December 2004., 2004: p. 144.
5. Fedorchenko, A. and A. Chernov, *Simulation of the microstructure of a thin metal layer quenched from a liquid state*. International journal of heat and mass transfer, 2003. **46**(5): p. 921-929.
6. Storti, M., *Numerical modeling of ablation phenomena as two-phase Stefan problems*. International journal of heat and mass transfer, 1995. **38**(15): p. 2843-2854.
7. Bianchi, D., *Modeling of ablation phenomena in space applications*. 2008.
8. Ghafouri-Azar, R., et al., *Interactions between molten metal droplets impinging on a solid surface*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2003. **46**(8): p. 1395-1407.
9. Haferl, S. and D. Poulikakos, *Experimental investigation of the transient impact fluid dynamics and solidification of a molten microdroplet pile-up*. International journal of heat and mass transfer, 2003. **46**(3): p. 535-550.
10. Willis, D.A. and X. Xu, *Heat transfer and phase change during picosecond laser ablation of nickel*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2002. **45**(19): p. 3911-3918.
11. Brockmann, R., et al., *Calculation of laser-induced temperature field on moving thin metal foils in consideration of Stefan problem*. Optics & Laser Technology, 2003. **35**(2): p. 115-122.
12. Devireddy, R.V., et al., *Measurement and numerical analysis of freezing in solutions enclosed in a small container*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2002. **45**(9): p. 1915-1931.
13. Ho, C. and C. Wang, *Producing chilled air in cool thermal discharge systems with air flowing over an ice surface by complete removal of melt*. Renewable Energy, 2002. **27**(2): p. 223-236.
14. Voller, V., C. Swaminathan, and B.G. Thomas, *Fixed grid techniques for phase change problems: a review*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1990. **30**(4): p. 875-898.
15. Carslaw, H. and J. Jaeger, *Heat conduction in solids*. Oxford University Press, Oxford, 1959: p. 75.
16. Kittl, J., et al., *Time-resolved temperature measurements during rapid solidification of Si-As alloys induced by pulsed-laser melting*. Journal of applied physics, 1993. **73**(8): p. 3725-3733.

17. Queheillalt, D.T., Y. Lu, and H.N. Wadley, *Laser ultrasonic studies of solid-liquid interfaces*. The Journal of the Acoustical Society of America, 1997. **101**(2): p. 843-853.
18. Kakimoto, K., et al., *In-situ observation of solid-liquid interface shape by X-ray radiography during silicon single crystal growth*. Journal of crystal growth, 1988. **91**(4): p. 509-514.
19. Parker, R., J. Manning, and N. Peterson, *Application of pulse-echo ultrasonics to locate the solid/liquid interface during solidification and melting of steel and other metals*. Journal of applied physics, 1985. **58**(11): p. 4150-4164.
20. Burhan, D., I. Ihara, and Y. Seda, *In situ observations of solidification and melting of aluminum alloy using ultrasonic waveguide sensor*. Materials transactions, 2005. **46**(9): p. 2107-2113.
21. Wadley, H.N. and K.P. Dharmasena, *Methods for liquid-solid interface shape and location discrimination during eddy current sensing of Bridgman growth*. Journal of crystal growth, 1997. **172**(3-4): p. 313-322.
22. Verhoeven, J. and E. Gibson, *A thermoelectric probe for measuring solid-liquid interface velocities and temperatures*. Journal of Crystal Growth, 1969. **5**(4): p. 235-238.
23. Moravčík, R., et al., *Phase transformations in high alloy cold work tool steel*. Strojníški vestnik-Journal of Mechanical Engineering, 2012. **58**(12): p. 709-715.
24. Goodman, T.R., *Application of integral methods to transient nonlinear heat transfer*. Advances in heat transfer, 1964. **1**: p. 51-122.
25. Rogers, C., *On a class of moving boundary problems in non-linear heat conduction: Application of a Bäcklund transformation*. International journal of non-linear mechanics, 1986. **21**(4): p. 249-256.
26. Tsirel'Man, N., *Correctness of an analytical solution of an inverse problem of heat conduction*. Journal of Engineering Physics and Thermophysics, 1985. **49**(6): p. 1492-1494.
27. Morilhat, P., et al., *Résolution d'un problème thermique inverse par méthodes analytique et impulsionnelle. Application à la détermination des fluctuations thermiques pariétales à l'intérieur d'une conduite*. International journal of heat and mass transfer, 1992. **35**(6): p. 1377-1383.
28. Landau, H.G., *Heat conduction in a melting solid*. Quarterly of Applied Mathematics, 1950. **8**(1): p. 81-94.
29. Bonacina, C., et al., *Numerical solution of phase-change problems*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1973. **16**(10): p. 1825-1832.
30. Raw, W. and S. Lee, *Application of weighting function scheme on convection-conduction phase change problems*. International journal of heat and mass transfer, 1991. **34**(6): p. 1503-1513.
31. Bui, H.D., *Introduction aux problèmes inverses en mécanique des matériaux*. 1993.
32. Yuan, F., X. Cai, and M. Özisik, *Determination of elastic constants by inverse analysis*. Inverse Problems in Engineering, 1996. **3**(1-3): p. 1-19.
33. Liu, F. and M. Ozisik, *Estimation of inlet temperature profile in laminar duct flow*. Inverse Problems in engineering, 1996. **3**(1-3): p. 131-143.
34. Le Brizaut, J.-S., et al., *Implementation of an inverse method for identification of reticulation kinetics from temperature measurements on a thick sample*. International journal of heat and mass transfer, 1993. **36**(16): p. 4039-4047.
35. Lohegnies, D., *Du numérique pour nos verres* Revue verre Décembre 2000. **6**(N°6): p. 8-11.

36. Monnoyer, F. and D. Locheignies, *Heat transfer and flow characteristics of the cooling system of an industrial glass tempering unit*. Applied Thermal Engineering, 2008. **28**(17): p. 2167-2177.
37. Das, S.K., *Thermal modelling of DC continuous casting including submould boiling heat transfer*. Applied thermal engineering, 1999. **19**(8): p. 897-916.
38. Samai, M., Y. Jarny, and D. Delaunay, *An optimization method using an adjoint equation to identify solidification front location*. Numerical Heat Transfer, 1993. **23**(1): p. 67-89.
39. Loulou, T., E. Artyukhin, and J. Bardon, *Estimation of thermal contact resistance during the first stages of metal solidification process: I—experiment principle and modelisation*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1999. **42**(12): p. 2119-2127.
40. Maillet, D., A. Degiovanni, and R. Pasquetti, *Inverse heat conduction applied to the measurement of heat transfer coefficient on a cylinder: Comparison between an analytical and a boundary element technique*. Journal of Heat Transfer, 1991. **113**(3): p. 549-557.
41. Volle, F., et al., *Inverse heat conduction applied to the measurement of heat fluxes on a rotating cylinder: comparison between an analytical and a numerical technique*. Journal of Heat Transfer, 2008. **130**(8): p. 081302.
42. Stolz, G., *Numerical solutions to an inverse problem of heat conduction for simple shapes*. Journal of heat transfer, 1960. **82**(1): p. 20-25.
43. Raynaud, M. and J. Bransier, *A new finite-difference method for the nonlinear inverse heat conduction problem*. Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, 1986. **9**(1): p. 27-42.
44. Reinhardt, H.-J. and D.N. Hào, *A sequential conjugate gradient method for the stable numerical solution to inverse heat conduction problems*. Inverse Problems in Engineering, 1996. **2**(4): p. 263-272.
45. El Bagdouri, M. and Y. Jarny, *Optimal boundary control of a thermal system: inverse conduction problem*. IFAC Proceedings Volumes, 1987. **20**(1): p. 389-393.
46. Alifanov, O., *Solution of an inverse problem of heat conduction by iteration methods*. Journal of Engineering Physics and Thermophysics, 1974. **26**(4): p. 471-476.
47. Samai, M.R., R; Delaunay, D; , *Experimental Validation of Gradient Method and Space Marching Methods for the Estimation of the Front Location in Solidification Problem*. Int.Conf. on Dynamic Inverse Problems, 1990.
48. Chenais, D., *On the existence of a solution in a domain identification problem*. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 1975. **52**(2): p. 189-219.
49. Hadamard, J., *Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations*, Yale Univ. Press. New Haven, 1923.
50. Weber, C.F., *Analysis and solution of the ill-posed inverse heat conduction problem*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1981. **24**(11): p. 1783-1792.
51. Alifanov, O. and V. Mikhailov, *Solution of the nonlinear inverse thermal conductivity problem by the iteration method*. Journal of Engineering Physics and Thermophysics, 1978. **35**(6): p. 1501-1506.
52. Tikhonov, A. and V.Y. Arsenin, *Solutions of ill-posed problems* Wiley. New York, 1977. **258**.

53. Zabaras, N. and Y. Ruan, *A deforming finite element method analysis of inverse Stefan problems*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1989. **28**(2): p. 295-313.
54. Zabaras, N. and S. Kang, *On the solution of an ill-posed design solidification problem using minimization techniques in finite-and infinite-dimensional function spaces*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1993. **36**(23): p. 3973-3990.
55. Jiang, H., T. Nguyen, and M. Prud'homme, *Control of the boundary heat flux during the heating process of a solid material*. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2005. **32**(6): p. 728-738.
56. Hetmaniok, E. and D. Słota, *Numerical procedure of solving some inverse problem in solidification of the binary alloy*. Computer Assisted Methods in Engineering and Science, 2017. **19**(4): p. 393-402.
57. Ren, H.-S., *Application of the heat-balance integral to an inverse Stefan problem*. International Journal of Thermal Sciences, 2007. **46**(2): p. 118-127.
58. Momose, K., T. Yamakawa, and H. Kimoto, *An inverse analysis of two-phase Stefan problems using imaginary heat sources*. Heat Transfer—Asian Research, 1998. **27**(3): p. 179-181.
59. Nowak, I., A.J. Nowak, and L.C. Wrobel, *Identification of phase change fronts by Bezier splines and BEM*. International journal of thermal sciences, 2002. **41**(6): p. 492-499.
60. Regin, A.F., S. Solanki, and J. Saini, *Latent heat thermal energy storage using cylindrical capsule: Numerical and experimental investigations*. Renewable energy, 2006. **31**(13): p. 2025-2041.
61. Assis, E., et al., *Numerical and experimental study of melting in a spherical shell*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2007. **50**(9): p. 1790-1804.
62. Ismail, K.A. and E. Maria das Gracas, *Numerical solution of the phase change problem around a horizontal cylinder in the presence of natural convection in the melt region*. International journal of heat and mass transfer, 2003. **46**(10): p. 1791-1799.
63. Lamberg, P., *Approximate analytical model for two-phase solidification problem in a finned phase-change material storage*. Applied Energy, 2004. **77**(2): p. 131-152.
64. Cesari, F., *An enthalpy formulation of the conduction problem with phase changes*. Computers & structures, 1992. **44**(5): p. 983-987.
65. Date, A., *Novel strongly implicit enthalpy formulation for multidimensional Stefan problems*. Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals, 1992. **21**(2): p. 231-251.
66. Ostrach, S., *Natural convection in enclosures*. Journal of Heat Transfer, 1988. **110**(4b): p. 1175-1190.
67. Bejan, A., *A synthesis of analytical results for natural convection heat transfer across rectangular enclosures*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1980. **23**(5): p. 723-726.
68. November, M. and M. Nansteel, *Natural convection in rectangular enclosures heated from below and cooled along one side*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1987. **30**(11): p. 2433-2440.
69. Tong, W., *Aspect ratio effect on natural convection in water near its density maximum temperature*. International journal of heat and fluid flow, 1999. **20**(6): p. 624-633.

70. Frederick, R.L., *On the aspect ratio for which the heat transfer in differentially heated cavities is maximum*. International communications in heat and mass transfer, 1999. **26**(4): p. 549-558.
71. de Vahl Davis, G., *Natural convection of air in a square cavity: a bench mark numerical solution*. International Journal for numerical methods in fluids, 1983. **3**(3): p. 249-264.
72. Ho, C. and J. Chang, *A study of natural convection heat transfer in a vertical rectangular enclosure with two-dimensional discrete heating: effect of aspect ratio*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1994. **37**(6): p. 917-925.
73. Paolucci, S. and D. Chenoweth, *Natural convection in shallow enclosures with differentially heated endwalls*. Journal of heat transfer, 1988. **110**(3): p. 625-634.
74. Prasad, V. and F. Kulacki, *Convective heat transfer in a rectangular porous cavity—effect of aspect ratio on flow structure and heat transfer*. Journal of Heat Transfer, 1984. **106**(1): p. 158-165.
75. Ganzarolli, M.M. and L.F. Milanez, *Natural convection in rectangular enclosures heated from below and symmetrically cooled from the sides*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1995. **38**(6): p. 1063-1073.
76. Watson, A., *The effect of the inversion temperature on the convection of water in an enclosed rectangular cavity*. The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics, 1972. **25**(4): p. 423-446.
77. Lin, D. and M. Nansteel, *Natural convection heat transfer in a square enclosure containing water near its density maximum*. International journal of heat and mass transfer, 1987. **30**(11): p. 2319-2329.
78. Wei, T. and J.N. Koster, *Density inversion effect on transient natural convection in a rectangular enclosure*. International journal of heat and mass transfer, 1994. **37**(6): p. 927-938.
79. McDonough, M. and A. Faghri, *Experimental and numerical analyses of the natural convection of water through its density maximum in a rectangular enclosure*. International journal of heat and mass transfer, 1994. **37**(5): p. 783-801.
80. Wakitani, S., *Numerical study of three-dimensional oscillatory natural convection at low Prandtl number in rectangular enclosures*. Journal of heat transfer, 2001. **123**(1): p. 77-83.
81. Gelfgat, A.Y. and I. Tanasawa, *Numerical analysis of oscillatory instability of buoyancy convection with the Galerkin spectral method*. Numerical Heat Transfer, 1994. **25**(6): p. 627-648.
82. Inaba, H., et al., *Natural convective heat transfer in a shallow rectangular cavity with different end temperatures*. Numerical heat transfer, 1981. **4**(4): p. 459-468.
83. Raithby, G. and H. Wong, *Heat transfer by natural convection across vertical air layers*. Numerical Heat Transfer, 1981. **4**(4): p. 447-457.
84. de Vahl Davis, G. and I. Jones, *Natural convection in a square cavity: a comparison exercise*. International Journal for numerical methods in fluids, 1983. **3**(3): p. 227-248.
85. Ramaswamy, B., T. Jue, and J. Akin, *Finite-element analysis of unsteady two-dimensional Navier-Stokes equations*. Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals, 1992. **21**(2): p. 147-182.
86. Le Quééré, P. and T.A. De Roquefortt, *Computation of natural convection in two-dimensional cavities with Chebyshev polynomials*. Journal of Computational Physics, 1985. **57**(2): p. 210-228.

87. Markatos, N.C. and K. Pericleous, *Laminar and turbulent natural convection in an enclosed cavity*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1984. **27**(5): p. 755-772.
88. Chenoweth, D. and S. Paolucci, *Natural convection in an enclosed vertical air layer with large horizontal temperature differences*. Journal of Fluid Mechanics, 1986. **169**: p. 173-210.
89. Hortmann, M., M. Perić, and G. Scheuerer, *Finite volume multigrid prediction of laminar natural convection: bench-mark solutions*. International journal for numerical methods in fluids, 1990. **11**(2): p. 189-207.
90. Lo, D., D. Young, and C. Tsai, *High resolution of 2D natural convection in a cavity by the DQ method*. Journal of computational and applied mathematics, 2007. **203**(1): p. 219-236.
91. Ghassemi, M., M. Pirmohammadi, and G. Sheikhzadeh, *A numerical study of natural convection in a tilted cavity with two baffles attached to its isothermal walls*. WSEAS Transactions on Fluid Mechanics, 2007. **2**(3): p. 61-68.
92. Laaroussi, N., *Contribution à la simulation numérique des transferts de chaleur par conduction, rayonnement et convection thermosolutale dans des cavités*. 2008, Université Paris-Est.
93. Shewchuk, J.R., *An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain*. 1994, Carnegie-Mellon University. Department of Computer Science.
94. D., B.A.a.G., *Transferts de chaleur avec changement d'état solide-liquide. Techniques de l'ingénieur. . Techniques de l'ingénieur. BE 8 240*; p. 1-14 p.
95. Ozisik, M.N., *Heat conduction*. 1993.
96. Voller, V. and M. Cross, *Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1981. **24**(3): p. 545-556.
97. Carslaw, H.S. and J.C. Jaeger, *Conduction of heat in solids*. Oxford: Clarendon Press, 1959, 2nd ed., 1959.
98. Ozisik, M., *Heat Conduction, A Wiley-Interscience Publication*. 1980, John Wiley & Sons, New York, USA.
99. Carslaw, H. and J. Jaeger, *Heat in solids*. Vol. 1. 1959: Clarendon Press, Oxford.
100. Miyawaki, O., T. Abe, and T. Yano, *Theoretical model for freezing of food gels with temperature-dependent fraction of frozen water*. Agricultural and Biological Chemistry, 1988. **52**(12): p. 2995-3000.
101. Patankar, S.V., *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publication Corporation, Washington, 1980.

Résumé

Les phénomènes de changement de phase solide-liquide sont généralement présents dans des processus naturels et dans un grand nombre d'applications industrielles. L'objet de cette étude consiste à résoudre un problème de solidification d'un matériau pur. Le premier chapitre est consacré à une synthèse bibliographique. Dans le second chapitre, on a appliqué une méthode inverse de conduction thermique associée à un processus de changement de phase solide/liquide dans une géométrie unidimensionnelle sphérique. Les résultats obtenus sont comparés à une solution exacte construite. La solution est sensible aux bruits introduit dans les données. Pour rétablir le caractère bien-posé. On a d'une part, filtré les données et d'autre part, introduit une technique de régularisation de la solution. Les résultats obtenus montrent l'algorithme mis au point est efficace. Dans le second chapitre, on a modélisé un problème de solidification d'un matériau pur en géométrie (1-d) par la méthode enthalpique

Une étude de la convection naturelle bidimensionnelle est menée dans le dernier chapitre en vue de l'appliquer à un problème d'optimisation. La comparaison des résultats numériques obtenus est en bon accord avec ceux trouvés dans la littérature.

Mots clés : *changement de phase, interface solide/liquide, inverse problème, méthode enthalpique, convection naturelle, volumes finis.*

Abstract

Solid-liquid phase change phenomena are generally present in natural processes and in a large number of industrial applications. The purpose of this study is to solve a problem of solidification of a pure material. The first chapter is devoted to a bibliographical synthesis. In the second chapter, we applied an inverse method of thermal conduction associated with a solid/liquid phase change process in a one-dimensional spherical geometry. The results obtained are compared to an exact solution constructed. The solution is sensitive to noise introduced into the data. To restore the well-posed character. On the one hand, filtered the data and on the other hand, introduced a technique of regularization of the solution. The results obtained show the algorithm developed is effective. In the second chapter, we modeled a problem of solidification of a pure material in geometry (1-d) by the enthalpic method.

A study of two-dimensional natural convection is conducted in the last chapter in order to apply it to an optimization problem. The comparison of the numerical results obtained is in good agreement with those found in the literature.

Keywords: phase change, interface solid/liquid, inverse problem, enthalpic method; natural convection, finite volume

ملخص

يتغير تطور الصلب إلى السائل في عدد كبير من التطبيقات الصناعية. الغرض من هذه الدراسة هو حل مشكلة تصلب مادة نقية. يكرس الفصل الأول لتوليف المراجع. في الفصل الثاني، طبقنا طريقة عكسية للتوصيل الحراري المرتبط بتغير الطور الصلب/السائل في هندسة كروية أحادية البعد. تتم مقارنة النتائج إلى حل دقيق شديت. الحل حساس للضوضاء. لاستعادة الطابع الجيد. من ناحية، تصفية البيانات، ومن ناحية أخرى، قدم تقنية لتنظيم الحل. النتائج التي تحققت فعالة. في الفصل الثاني، قمنا بنمذجة مشكلة تصلب مادة نقية في الهندسة (1-د) بالطريقة الانتلبيية

في الفصل الأخير، دراسة الحمل الحراري ثنائي الأبعاد المقارنة بين النتائج العددية التي تم الحصول عليها في توافق جيد مع تلك الموجودة في المراجع.

