

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

— o —

UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
"HOUARI BOUMEDIENE"

— o —

FACULTE DE PHYSIQUE



THESE

présentée pour l'obtention du diplôme de :

MAGISTER

En : *Physique*
Spécialité : *Energétique et Mécanique des Fluides*

Par :

Nacer SADOUN

SUJET :

*CONTRIBUTION A L'ETUDE DU PROBLEME
DE SOLIDIFICATION
Approche Semi-Analytique*

Soutenue publiquement le 02 Juillet 2006, devant le jury composé de :

A. SALEM	Professeur, USTHB-Alger	Président
E.K. SI-AHMED	Professeur, USTHB-Alger	Directeur de Thèse
M. KESSAL	Professeur, UMBB-Boumerdes	Examineur
A. BENZAOUI	Maître de Conférences, USTHB-Alger	Examineur
M. SAIGHI	Maître de Conférences, USTHB-Alger	Examineur

Remerciements

Cette thèse a été réalisée au laboratoire de Mécanique des Fluides Théorique et Appliquée du Département d'Energétique et de Mécanique des Fluides de la Faculté de Physique (USTHB) sous la direction du Professeur E.K. Si-Ahmed. J'ai particulièrement apprécié ses encouragements, ses conseils et la liberté qu'il m'a accordée dans la poursuite de mon travail. Je lui suis aussi très reconnaissant pour m'avoir sensibilisé à l'importance de la communication scientifique, entre autres par le biais de conférences et de publications diverses.

Je suis particulièrement reconnaissant au Professeur A. Salem pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury. J'ai souvent eu l'occasion d'être en contact étroit avec sa personnalité, ses compétences scientifiques, son sérieux et son dynamisme. La gentillesse et la sympathie avec lesquelles il traite ses étudiants sont exemplaires.

Je suis très sensible à la présence dans le jury du Dr. A. Benzaoui, chef du Département d'Energétique et de Mécanique des Fluides (Faculté de Physique, USTHB), malgré ses multiples tâches administratives, pédagogiques et de recherche. Ses encouragements permanents ont été pour moi une autre source de motivation dans l'aboutissement de ce travail. Je tiens à témoigner des sacrifices qu'il ne cesse de consentir pour le bon fonctionnement des différents laboratoires du département.

Je suis également sensible à l'honneur que me font Dr. M. Saighi de la Faculté de Physique (USTHB) et le Professeur M. Kessal de la Faculté des Hydrocarbures et de la Chimie (UMB Boumerdes). Qu'ils trouvent ici l'expression de ma profonde gratitude pour avoir bien voulu accepter de participer au jury.

Je remercie également le Professeur J. Legrand, directeur du CRTT de Saint-Nazaire (Université de Nantes, France), qui m'a donné l'occasion de m'y rendre une fois. Le séjour a donné à ce travail l'accélération nécessaire pour la finalisation de cette thèse.

Je ne saurais oublier l'hospitalité du Professeur J.C. Legros du Service de Chimie-Physique de l'Université Libre de Bruxelles (Belgique) durant mes séjours au Centre de Recherche en Microgravité (MRC), l'intérêt que porte à ce travail Dr. P. Colinet, responsable des séjours, la gentillesse et la disponibilité sans réserve de R. Naji, administrateur du service, l'apport que m'a apporté la bibliothèque personnelle du Dr. M. Hennenberg et surtout la bonne humeur de tous les membres du Service de Chimie-Physique. Ils en ont fait un endroit où il est toujours agréable de travailler. Un grand merci à tous.

Que tous les membres de ma famille soient associés à ses remerciements. Je cite en particulier ma femme pour son amour, sa patience et ses encouragements. Qu'elle trouve ici l'expression de tout mon amour et de toute ma reconnaissance.

Enfin, mes remerciements vont aussi à mes collègues de la Faculté de Physique qui ont contribué de près ou de loin à la finalisation de cette thèse.

Dédicaces

*S'il est vrai que "rien n'est éternel, pas même la reconnaissance¹", c'est également
vrai que "la reconnaissance silencieuse ne sert à personne²".
En reconnaissance à leur présence, leur aide et parfois même leur sacrifice, je dédie
ce modeste travail à*

*ma mère,
la mémoire de mon père Mouloud,
ma femme et ma fille,
mon frère et mes sœurs,
mes neveux et nièces et à
mon ami Chabane Mouas et sa famille.*

¹Extrait du Journal de Jules Renard

²Gladys Bronwyn Stern

Table des matières

Remerciements	i
Dédicaces	iii
Table des matières	vii
Nomenclature	viii
Introduction Générale	1
0.1 Les objectifs de la thèse	3
0.2 Plan général du manuscrit	3
1 Problème de Stefan,	
Généralités et Situation du Sujet	5
1.1 Introduction	5
1.2 Applications	5
1.3 Historique des Etudes pionnières	8
1.4 Classifications du problème	9
1.4.1 Classification phasique	9
1.4.2 Classification cinétique	10
1.4.3 Classification énergétique	10
1.5 Rôle de la convection naturelle	10
1.5.1 Cas de la solidification	11
1.5.2 Cas de la fusion	12
1.5.3 Conclusion	13
1.6 Situation du sujet	14
1.6.1 Température de paroi imposée	15
1.6.2 Température de paroi variable	16
a. Modèles d'El-Genk et Cronenberg	16
b. Modèle de Mennig et Özişik	17
c. Modèle de Caldwell et Kwan	17
d. Modèle de Gupta et Kumar	18
e. Modèle de Savović et Caldwell	19
1.6.3 Comparaison des différents modèles	19
1.6.4 Situation de l'étude	20
1.7 Conclusion	22

2	Formulation du problème	23
2.1	Introduction	23
2.2	Modèle physique	23
2.2.1	Introduction	23
2.2.2	Définition du modèle	23
2.2.3	Hypothèses simplificatrices	24
2.3	Modèles mathématiques	25
2.3.1	Modèles implicites	26
	a. Formulation enthalpique	27
	b. Formulation de la capacité calorifique apparente	28
	c. Formulation du terme source	28
	d. Remarques	28
2.3.2	Modèle explicite	29
2.4	Problème de Stefan avec température de paroi variable	31
2.4.1	Introduction	31
2.4.2	Equations adimensionnelles	31
	a. Modèle dans un domaine mobile	32
	b. Modèle dans un domaine fixe	34
2.4.3	Nombre de Stefan, Ste	34
2.5	Conclusion	35
3	Méthodes	
	Numériques Explicites	36
3.1	Introduction	36
3.2	Méthodes à maillage fixe	37
3.2.1	Modèle de Crank	37
3.2.2	Modèle de Murray et Landis	39
3.2.3	Modèle de Verma et col.	42
3.2.4	Remarques	43
3.3	Méthodes à maillage variable	44
3.3.1	Pas de temps variable	45
	a. Modèle de Douglas et Callie	46
	b. Modèle de Goodling et Khader	47
	c. Modèle de Gupta et Kumar	48
3.3.2	Pas d'espace variable	48
	a. Modèle dans un domaine variable	48
	b. Modèle dans un domaine fixe	50
	c. Discussion	52
3.3.3	Méthode de migration d'isothermes	53
3.4	Modification de la méthode à pas d'espace variable	56
3.4.1	Introduction	56
3.4.2	Schéma numérique équivalent	56
3.4.3	Modèle à pas d'espace variable modifié	57
3.5	Conclusion	58

4	Méthode de l'Intégrale de l'Energie	60
4.1	Introduction	60
4.2	Principe de la méthode	61
4.3	Modèles de Goodman	61
4.3.1	Modèle de l'intégrale de l'énergie	62
4.3.2	Modèle des collocations	62
4.3.3	Modèle de l'intégrale de l'énergie-collocation	63
4.4	Modèles de Wood	64
4.5	Modèles de Mosally et col.	66
4.5.1	Modèle exponentiel	67
4.5.2	Modèle Gaussien	68
4.6	Modèle de Mennig et Özişik	69
4.7	Expressions analytiques la constante de solidification	70
4.8	Intégrale de l'énergie par subdivision	70
4.9	Conclusion	73
5	Méthode de la Double Intégrale	74
5.1	Introduction	74
5.2	Revue bibliographique	74
5.2.1	Sans changement de phase	75
5.2.2	Avec changement de phase	75
a.	Modèle d'Elmas	77
b.	Modèles d'El-Genk et Cronenberg	77
c.	Remarques	78
5.3	Intégrale double dans un domaine mobile	78
5.3.1	Equation intégrale	79
5.3.2	Profil de température	80
5.3.3	Position de l'interface	81
a.	Profil linéaire	81
b.	Profil quadratique	81
c.	Profil de degré 3	82
5.3.4	Conclusion	82
5.4	Résultats et Discussion	83
5.4.1	Méthode d'intégration numérique	83
5.4.2	Température de paroi imposée, $F = 1$	83
5.4.3	Température de paroi variable, $F(\tau)$	87
a.	Variation linéaire : $F(\tau) = 1 - 0.2\tau$	87
b.	Variation périodique : $F(\tau) = 1 - \epsilon \sin(\omega\tau)$	90
5.5	Conclusion	92
	Conclusion Générale et Perspectives	93
	Bibliographie	99
	Table des figures	101
	Liste des tableaux	102

Annexes	i
A Biographie de J. Stefan	i
B Solution	
Analytique Exacte de Stefan	iii
C Rappels Mathématiques	vii
C.1 Développement en série de Taylor	vii
C.2 Formule d'interpolation de Lagrange	viii
C.3 Formule de Leibniz de dérivation sous le signe d'intégration	viii
C.4 Fonction Erreur, <i>erf</i>	ix
D Méthode	
d'Intégration Numérique	x
D.1 Méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, RK4	x
D.2 Méthode de Runge-Kutta-Fehlberg, RKF45	xii
D.3 Méthode Runge-Kutta-Cash-Karp, RKCK	xiii
E Communications et Publications	xvi
E.1 Communications Nationales	xvi
E.2 Communications Internationales	xvi
E.3 Publications Internationales	xvii
E.4 Encadrement de Mémoire d'Ingénieurs	xvii

Nomenclature

a, b	Coefficient dans l'expression du flux à la paroi dans l'étude de Goodling et Khader (§ 3.3.1.a)
c	Chaleur spécifique ($JKg^{-1}K^{-1}$)
\tilde{C}	Chaleur spécifique apparente (éq.2.11) ($JKg^{-1}K^{-1}$)
e	Energie interne spécifique (JKg^{-1})
f	Fonction intermédiaire (éq. 5.22)
$F = \frac{T(0,t)-T_m}{T_r-T_m}$	Température adimensionnelle de la surface d'échange $x = 0$
g_l, g_s	Fractions volumiques liquide et solide (m^{-3})
$h = h_c + h_L$	Enthalpie totale (JKg^{-1}) (éq.2.9)
$h_c = e$	Enthalpie spécifique (JKg^{-1})
h_L	Enthalpie associée au changement de phase (JKg^{-1})
k	Conductivité thermique ($Wm^{-1}K^{-1}$)
l	Longueur de référence (m)
L	Chaleur latente de solidification (JKg^{-1})
N	Nombre de noeuds
\vec{n}	La normale en un point à une surface
p	Paramètre numérique (éqs. 3.2-7)
Q	Quantité de chaleur latente par unité de volume (Jm^{-3})
Q_h	Flux de chaleur échangé par convection à l'interface
$r = \frac{\bar{r}}{\bar{\eta}^2}$	Paramètre numérique (éq.3.1)
$Ste = \frac{\rho c(T_m - T_r)}{\rho L}$	Nombre de Stefan : inverse de la chaleur latente adimensionnelle
t	Temps (s)
T	Température (K)
v	vitesse de l'interface (ms^{-1})
x	Abscisse (m)

Symboles grecques

α	Diffusivité thermique (m^2s^{-1})
β	Facteur de forme dans les expressions de la distribution de température (éqs.4.13 et 4.17)
δ	Position du front de solidification (m)

ζ	Fonction de forme dans l'expression de la distribution de température (éqs.4.1)
$\Delta = \frac{\delta}{l}$	Position adimensionnelle du front de solidification
$\bar{\eta}, \bar{\xi}$	Pas d'incrémentations sur l'espace
θ	Pas d'incrémentations sur la température
$\bar{\tau}$	Pas d'incrémentations sur le temps
$\eta = \frac{x}{l}$	Abscisse adimensionnelle dans le domaine déformable $[0, \delta]$
$\xi = \frac{x}{\delta} = \frac{\eta}{\Delta}$	Variable de Landau ou abscisse adimensionnelle dans le domaine fixe
ϕ	Flux de chaleur (Wm^{-2})
Γ	Interface solide/liquide
λ	Constante de solidification (eq. 1.2)
$\theta = \frac{T-T_m}{T_r-T_m}$	Température adimensionnelle
ϑ	Elément de volume de Ω
ρ	Masse volumique (Kgm^{-3})
$\sigma = \Delta^2$	Carrée de la position adimensionnelle de l'interface
Σ	Surface extérieure entourant le volume Ω
$\tau = \frac{\alpha}{l^2}t$	Temps adimensionnel
ψ_i	Coefficients dans l'équation algébrique (1.7)

Indices et Exposants

i	Relatif au i^{ieme} noeud
j	Relatif au j^{ieme} pas de temps
k	Numéro d'itération
l	Relatif à la phase liquide
m	Point de solidification (<i>melting</i>)
max	valeur maximale
min	valeur minimale
moy	valeur moyenne
n	Relatif au noeud voisin de l'interface
r	Point de référence
s	Relatif à la phase solide

Fonctions et Operateurs

e	Fonction exponentielle
erf	Fonction erreur
f	Fonction analytique (éq.5.22)
\Re	Résidu (éq.4.5)
$\vec{\nabla}$	Vecteur gradient

Introduction Générale

Les méthodes analytiques restent toujours d'actualité malgré la performance des moyens de calcul actuels qui permettent la modélisation et la simulation numérique de problèmes de plus en plus complexes. L'intérêt porté à ces méthodes réside dans leur qualité à fournir, à moindres coûts, des résultats pratiques intéressants et sont parfois indispensables dans l'utilisation des moyens suscités.

Les logiciels disponibles à présent, tels qu'à titre d'exemple FLUENT et FEM-LAB, sont des outils de modélisation numérique performants qui assurent un suivi en continu de l'évolution des propriétés dans divers phénomènes de l'ingénierie. Leurs architectures ouvertes, leurs interfaces soignées et leurs solveurs optimisés permettent de réduire considérablement le temps de modélisation. L'utilisateur peut ainsi s'intéresser uniquement à l'évolution du phénomène physique et se voit déchargé d'une grande partie des soucis de la simulation numérique. Néanmoins, lorsqu'il s'agit de phénomènes évolutifs, ces logiciels requièrent des solutions de démarrage pour l'initialisation de leurs solveurs.

Lorsque l'une, au moins, des conditions initiales associées aux équations de transport constitue une singularité, les processus itératifs des solveurs se heurtent aux problèmes de divergence dès la première itération. Il est alors nécessaire de trouver des solutions pouvant amorcer les itérations et, ainsi, bénéficier de la panoplie des solveurs optimisés de ces logiciels. Le recours aux méthodes analytiques est souvent inévitable. Ainsi, loin de s'opposer aux techniques numériques, ces dernières en sont plutôt complémentaires. Elles ne gardent pas qu'un intérêt historique mais doivent, au contraire, être développées pour constituer un outil à part entière du large panel de méthodes approchées disponibles dans la littérature. Par exemple, il arrive souvent que des modèles numériques fournissent des résultats quantitativement précis sans être efficaces pour décrire qualitativement les mécanismes du phénomène étudié. A cet effet, on peut recourir aux modèles simplifiés analytiques pour les compléter.

Dans de nombreux cas de problèmes de solidification ou fusion, les solutions analytiques approchées sont indispensables pour produire des solutions de démarrage, et fournissent des résultats appréciables pour des applications importantes de l'ingénie-

rie. Les méthodes intégrales introduites par Von Kàrmàn et Pohlhausen [1] sont, parmi les méthodes analytiques, celles qui ont connu un très large développement. La simplicité de leur mise en œuvre et le caractère raisonnablement approché des résultats auxquels elles conduisent ont motivé leurs applications dans beaucoup de domaines [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]. Elles se sont révélées être un puissant outil permettant d'approcher, à moindre coût, les solutions des problèmes de diffusion nonlinéaire [1, 10]. Depuis l'étude de T.R. Goodman [11], la méthode de l'intégrale de l'énergie est devenue incontournable, quand il s'agit de chercher une solution analytique aux problèmes de diffusion thermique avec solidification ou fusion. Ces derniers, appelés *problèmes de Stefan*, posent encore aujourd'hui plusieurs défis, principalement à cause de la non-linéarité introduite par le saut du flux de chaleur au front de changement de phase. L'équation qui en découle, appelée *condition de Stefan*, et le caractère mobile de l'interface rendent délicate toute approche analytique de la solution du problème.

Les nombreuses études qui ont été menées, depuis le travail pionnier de Josef Black [12] sur les transformations eau/glace, n'ont fourni de solutions analytiques exactes que dans un nombre de cas très limité [13, 14, 15]. Les solutions obtenues concernent la solidification (fusion) plane d'un matériau pur occupant l'espace semi-infini. Soit la surface d'échange est refroidie (chauffée) instantannément et maintenue à température constante ou bien elle est soumise à un flux de chaleur constant. Ces solutions font appel aux calculs de séries de puissances et parfois même aux résolutions d'équations transcendantales. De plus, il ne s'agit que de cas particuliers qui ne reflètent guère les réalités physiques du phénomène où, aussi bien la température que le flux de chaleur aux surfaces d'échange sont des fonctions du temps, voire même de l'espace.

Le cas du problème de Stefan à une phase avec température de paroi variable a fait également l'objet de nombreuses études [11, 9, 16, 17, 18, 19, 20, 21]. La considération de ce type de condition à la frontière complique d'avantage la recherche de la solution exacte. Si de plus, la température de paroi subit initialement un changement brusque, alors même l'approche numérique de la solution devient délicate à cause de la singularité posée par la condition initiale. Dans ce cas particulier, le taux initial de changement de phase est indéfini rendant la vitesse initiale de l'interface solide/liquide inconnue. Ces difficultés ont fait que toutes les analyses analytiques et/ou numériques développées jusqu'à présent n'ont abouti qu'à des solutions approchées. Ainsi, le problème reste toujours d'actualité et continue de motiver encore de nombreuses études. Il s'agit d'améliorer la précision des résultats en général et de la localisation du front mobile, en particulier.

0.1 Les objectifs de la thèse

La présente contribution s'inscrit dans le cadre des travaux consacrés à la recherche d'approches analytiques ou semi-analytiques de la solution du problème décrit ci-dessus. Son objectif principal est d'obtenir une solution purement analytique ou sous forme d'équation différentielle ordinaire permettant de suivre explicitement le mouvement du front de changement de phase. Toutefois, d'autres objectifs non moins importants que le premier lui sont également assignés. Il s'agit de :

- i*) faire une étude historique sur les études pionnières,
- ii*) présenter les différentes formulations et modélisations considérées dans la littérature,
- iii*) effectuer une étude des méthodes numériques de suivi de l'interface et de développer, si possible, un schéma numérique plus précis qui permettra de valider la solution analytique ou semi-analytique proposée
- iv*) faire une étude de la méthode de l'intégrale de l'énergie en considérant les différentes procédures de mise en œuvre, d'une part, et les techniques proposées pour l'amélioration de sa précision, d'autre part.

0.2 Plan général du manuscrit

Ce mémoire présente le travail réalisé dans le cadre de cette étude. Il rend compte des travaux antérieurs et présente les modèles développés et les principaux résultats :

Le premier chapitre met en évidence, dans un premier temps, l'importance de l'implication pratique du phénomène de solidification/fusion dans la vie quotidienne de l'homme. Il présente une étude historique des études pionnières en indiquant leurs différents apports à la compréhension du phénomène. Les différentes classifications du problème sont aussi adjointes, permettant ainsi de se familiariser avec la terminologie utilisée dans la littérature. Enfin, il met en évidence le rôle de la convection naturelle dans le phénomène en considérant quelques résultats expérimentaux et numériques disponibles dans la littérature. La seconde partie de ce chapitre situe le sujet de la présente contribution. Les différentes solutions proposées pour le problème de Stefan à une phase avec température de paroi variable sont examinées minutieusement. Justifiant ainsi les motivations du choix de la méthode d'étude.

A travers le deuxième chapitre, un modèle physique simple permet de développer les deux modélisations mathématiques (implicite et explicite) utilisées pour l'étude des problèmes de solidification/fusion. Par la suite, à partir de la modélisation explicite

permettant un suivi permanent du front de changement de phase, deux modèles mathématiques sont établis. Ces derniers sont obtenus en considérant les équations selon la formulation dans un domaine fixe ou lié au front mobile.

Le chapitre 3 présente les méthodes numériques explicites. Elles sont classées et appliquées au problème classique de Stefan à une phase avec température de paroi imposée et dont la solution exacte est connue pour estimer leurs précisions. La méthode d'immobilisation de l'interface, qui se trouve être un cas particulier de la méthode à pas d'espace variable, est modifiée pour améliorer sa précision.

Le quatrième chapitre reprend la méthode de l'intégrale de l'énergie développée par T.R. Goodman et examine les différentes procédures de sa mise en œuvre. Le terme qui est la source principale d'erreur de la méthode est identifié. La précision de cette dernière est mise en évidence quand l'équation intégrale et le profil arbitraire choisi vérifient l'équation de Stefan écrite sous sa forme originelle. Quelques techniques modifiant la méthode pour l'amélioration de sa précision sont fournies.

Le dernier chapitre est consacré à la méthode de l'intégrale double. Un rapport bibliographique complet sur les études ayant utilisé la technique est établi, incluant même celles ne traitant pas du problème. Il développe ensuite la méthode en considérant la formulation du problème dans un domaine mobile permettant ainsi d'envisager son extension au problème de Stefan à deux phases. L'analyse aboutit à trois solutions pour le mouvement du front de solidification. L'une d'elles est purement analytique et deux autres exprimées sous forme d'équations différentielles ordinaires dont le temps est la variable indépendante³. Le chapitre particularise l'application des solutions obtenues, au cas du problème classique de Stefan à une phase, pour apprécier leurs degrés de précision et généralise cette dernière au cas où la température de paroi est variable. Dans ce dernier cas, les résultats numériques sont comparés à ceux fournis par le schéma numérique développé pour cet effet au troisième chapitre.

Enfin, ce *manuscript* s'achève sur une conclusion générale accompagnée de perspectives en guise d'extension possible de ce travail.

³La méthode d'intégration numérique utilisée est détaillée en Annexe D

Chapitre 1

Problème de Stefan, Généralités et Situation du Sujet

1.1 Introduction

La désignation de *problème de Stefan* ne concernait, dans un premier temps, que les problèmes de conduction de la chaleur avec changement de phase liquide/solide. Actuellement, cette appellation englobe tous les problèmes de diffusion dans un domaine déformable que la littérature désigne également par *problèmes à frontières libres ou mobiles*.

Le problème qui a fait, et continue de faire, l'objet de nombreux travaux, intéresse aussi bien les physiciens, les chimistes, les biologistes et les mathématiciens sur le plan fondamental que les mécaniciens, les métallurgistes, les géologues, les médecins et bien d'autres sur le plan pratique.

La première partie de ce chapitre constitue une présentation du problème de solidification. L'importance de l'implication pratique du phénomène dans la vie quotidienne de l'homme est montrée à travers la multitude et la variété de ses applications. Un rappel historique des études pionnières, montrant les différents apports, et la classification des problèmes de Stefan font également l'objet de cette partie. Enfin, celle-ci met en relief le rôle de la conduction dans le phénomène, en faisant appel aux résultats numériques et expérimentaux antérieurs. La seconde partie du chapitre revoit les différentes solutions, proposées pour le problème de Stefan à une phase avec température de paroi variable, situant ainsi le sujet du présent travail.

1.2 Applications

L'intérêt porté au phénomène de solidification-fusion, qui est certainement l'un des phénomènes les plus répandus dans la nature, plonge ses racines dans la plus haute

antiquité. Il reste jusqu'à nos jours l'un des problèmes qui suscite un très grand intérêt à cause de ses implications, tout à fait importantes, non seulement dans des phénomènes naturels mais aussi et surtout dans les technologies de pointe, telles la sûreté nucléaire et l'industrie aérospatiale entre autres.

La formation de la terre, dont la température était supérieure à 2000°C au début, s'est faite par solidification suite à son refroidissement progressif et continu. La chaleur de celle-ci, due aux chocs successifs et répétés des météorites, a fait fondre l'ensemble de ses constituants. Elle a grossi peu à peu, ce qui a augmenté la pression à l'intérieur et provoqué la solidification du manteau et d'une partie du noyau. Les premières études ont été motivées par l'estimation de temps de solidification du globe terrestre en vue de connaître l'âge de notre planète [22, 23, 13, 24].

Les géologues s'intéressent à la solidification de la lave volcanique pour son influence certaine sur l'activité des plaques tectoniques et à la solidification des coulées, en contact de la surface de la terre et de l'atmosphère, à la suite des éruptions pour leur rôle dans la forme des reliefs et sur le climat [25, 26].

Le réchauffement de la planète pose le problème de la fusion des glaces polaires. Le résultat des travaux menés récemment par quelques 300 scientifiques [27], issus de huit pays, prouvent de manière irréfutable que le réchauffement du climat de l'Arctique aura des conséquences néfastes au niveau de la planète entière, en contribuant au réchauffement du climat global et l'élévation du niveau des mers [28]. La fonte de toute la glace qui existe sur notre planète actuellement (environ $0,15 \cdot 10^{15} \text{ m}^3$) entraînerait l'élévation du niveau de la mer d'environ 8 mètres [26, 27, 28], menaçant, à court terme, pas moins de 17 millions d'âmes qui vivent à moins de 1 m au dessus de la mer [26]. Une fonte massive des glaces est d'ores et déjà en cours. Les chercheurs estiment que le niveau de la mer devrait augmenter de 10 cm à 91 cm, voire plus, au 21^{ème} siècle.

Entre autres implications dans des phénomènes naturels, nous citons les transitions de phases (grêle, neige) qui interviennent dans des phénomènes météorologiques et la cristallisation des espèces minérales dans des phénomènes minéralogiques [24].

Le processus de congélation et décongélation des aliments fait partie de notre vie quotidienne. Certains aliments se congèlent mieux que d'autres et la plupart d'entre eux doivent être préparés avant la congélation pour éviter une altération de leur saveur [29].

Le phénomène de solidification/fusion tient, aussi, une place importante dans les procédés de mise en forme des matériaux [30, 31]. Les propriétés thermophysiques de ces derniers dépendent fortement de la façon dont s'est effectué le chauffage, le coulage et ensuite le refroidissement du matériau. Actuellement, avec plus de compréhension du

processus de solidification/fusion, on assiste à des développements de matériaux spéciaux qui sont spécialement étudiés et optimisés pour répondre à des propriétés particulières. Leur définition ne dépend pas d'une composition chimique ou d'une structure métallique mais relève plutôt de leur adaptation spécifique à une utilisation ou à des caractéristiques précises. D'où la technique de solidification dirigée qui fait appel à la maîtrise parfaite des phénomènes qui se produisent dans son processus.

La fabrication des cristaux nécessite aussi la maîtrise du processus de fusion/solidification [30]. Dans la fabrication des verres de lunettes par exemple, le développement des cristaux d'halogénures d'argent nécessaires au phénomène photochromique, n'est possible que grâce à une bonne préparation de la pâte (composition et dosage, mixage et fusion du mélange), de son affinage¹, de sa cuisson avant son refroidissement et enfin sa solidification. La maîtrise de la bonne qualité des cristaux est indispensable aussi dans la fabrication des modules photovoltaïques à partir des cellules photovoltaïques au silicium cristallin (monocristallin ou polycristallin) ou au silicium amorphe. Le silicium monocristallin est employé aussi dans la fabrication des puces électroniques. C'est une matière de grande pureté obtenue soit par tirage en creuset (procédé "Czochralski") soit par fusion par zone.

Dans le domaine des énergies renouvelables et non polluantes, la chaleur est utilisée pour fondre un matériau fusible et emmagasiner ainsi de l'énergie sous forme de chaleur latente et la récupérer en cas de besoin par le processus inverse (solidification)[32, 31]. La procédure est plus intéressante que celle utilisant la thermochimie ou la chaleur spécifique puisque elle permet de stocker et déstocker de grande quantité d'énergie sans faire appel à de grandes variations de température. Un intervalle réduit de part et d'autre de la température de fusion est suffisant pour son application.

Lors de la rentrée dans l'atmosphère terrestre ou planétaire, un véhicule spatial (fusée et navette) subit un freinage important. Les frottements sur les couches gazeuses dégagent une importante énergie qu'il faut dissiper rapidement. Le véhicule peut voir la température de certaines de ses parties portée à plus de 1 500 °C et risque de subir le phénomène d'ablation [33] (conséquence de la fusion) au niveau de ses parties qui subissent le freinage atmosphérique. Le problème de solidification pose aussi celui de la solidification du carburant dans les réservoirs des véhicules spatiaux à leurs sorties de l'atmosphère où la température est très basse. Les problèmes, reliés au phénomène de solidification/fusion, dans l'industrie spatiale ne se limitent pas à ces deux cas suscités. Ils sont présents dès l'usinage des pièces et du revêtement (moulage) du véhicule, d'une

¹Cette étape vise à augmenter la température du verre (jusqu'à 1 600 ° C) afin de le rendre plus liquide pour le débarrasser de toutes les impuretés. A la sortie du four, le verre est parfaitement homogène.

part, et l'assemblage par soudure, d'autre part.

Dans un réacteur nucléaire, le combustible est entouré d'une gaine métallique formant un boîtier étanche pour l'isoler du fluide caloporteur qui extrait et évacue la chaleur du cœur du réacteur. Cette chaleur, qui vient de l'énergie libérée lors de la fission des noyaux d'uranium, est considérable. Une mauvaise circulation du caloporteur entraînerait une augmentation de la température dans le cœur de façon exponentielle et ferait fondre la gaine protectrice du combustible amenant ainsi la dispersion des produits de la fission qui sont radioactifs [34, 35].

Les applications du processus restent encore très nombreuses. On peut citer entre autres l'impression avec jet d'encre, la pose de peinture et des soudures [36, 30, 37], la fabrication des composants électroniques [38], la fabrication de microstructures à l'aide de petites impulsions laser [39], la correction des matériaux par solidification après refusion au laser [40], la conservation des cellules biologiques (cellules sanguines, îlots pancréatiques, hépatocytes, etc..) [41] et la production d'air frais [42] par circulation de ce dernier sur une surface de glace, etc...

1.3 Historique des Etudes pionnières

Bien que le nom de Stefan soit associé aux problèmes de diffusion dans un domaine à frontières mobiles, en général, et à celui de la solidification et fusion en particulier, cet illustre scientifique ne fut pas le premier à s'intéresser à ce phénomène. En effet, bien avant lui J. Black, J.B.J. Fourier, G. Lamé et E. Calpeyron et enfin F. Neumann contribuèrent largement à l'étude du problème. La large diffusion dont les travaux de J. Stefan ont bénéficié et surtout la notoriété (Annexe A) de celui-ci ont fait que le problème porte son nom.

La première étude concernant le phénomène de solidification/fusion fut menée par l'écossais Joseph Black [12]. La série d'expériences qu'il a effectuées entre 1758 et 1762 sur les transformations eau/glace lui ont permis de conclure que la chaleur sensible, seule, ne permettait pas de comprendre le phénomène. C'est ainsi qu'il introduisit l'idée et le terme de la chaleur latente et posa le problème sans pour autant le résoudre.

Après avoir établi l'équation de conduction de la chaleur et en considérant que la terre était à sa température de fusion, le père de la physique-mathématique Jean Baptiste Josef Fourier [22] (1822) tenta d'estimer l'âge de celle-ci à partir du temps de son refroidissement. La chaleur latente dégagée par la solidification n'a pas été prise en compte.

Gabriel Lamé et Emile Clapeyron [23] (1831) ont pu intégrer le terme de la chaleur latente dans les équations gouvernant le phénomène. Ils ont pu montrer que le front de solidification évolue en racine carrée du temps mais sans expliciter l'équation permettant la détermination de la constante de proportionnalité.

La solution complète du problème n'a été obtenue qu'après trois décennies plus tard (vers la fin des années 1860) et fût l'oeuvre de Franz Neumann. La solution présentée par ce dernier dans ses conférences, concerne non seulement le cas de la solidification d'un milieu initialement à son point de fusion, mais englobe également le cas général de la solidification d'un milieu porté au delà de sa température de fusion. La publication des travaux de Neumann, par Weber [43] et survenue dix ans après la publication du premier papier de Stefan. La solution est depuis désignée par solution généralisée de Neumann.

A partir de l'année 1891, Stefan publia une série de papiers portant sur le problème de solidification [44, 12, 45, 13]. Il a ainsi étudié le problème considéré par Lamé et Clapeyron, le problème généralisé de Neumann pour étendre par la suite, la méthode d'étude au problème de contact de deux phases d'un même matériau. Enfin, exploitant les relevés numériques disponibles sur l'évolution de l'épaisseur de la glace polaire et à partir de sa solution appliquée à un *problème de Stefan inverse*, il a pu déduire avec une bonne précision la valeur de conductivité thermique de la glace polaire.

1.4 Classifications du problème

On trouve dans la littérature trois classifications distinctes du problème de Stefan. La première concerne l'état thermique de la phase subissant la transformation, la seconde concerne la nature du mouvement de l'interface et enfin, la dernière rend compte de la forme de la région participant au dégagement (ou absorption) de la chaleur latente.

1.4.1 Classification phasique

Selon l'état thermique de la phase qui subit la transformation, on distingue deux types de problèmes. Le premier, désigné par *problème de Stefan à une phase*, concerne les problèmes où les transferts thermiques ne se font que dans une phase. La seconde phase reste en équilibre thermique durant tout le processus. Si cette dernière ne disparaît pas par le phénomène d'ablation, elle doit être à sa température de changement de phase ou se comporte comme un puit ou une source de chaleur de température uniforme. Dans le cas contraire, si les transferts concernent aussi bien la phase initiale que celle formée, on parle de *problème de Stefan à deux phases*.

1.4.2 Classification cinétique

Cette classification catégorise les problèmes de Stefan, selon le mouvement de l'interface, en trois classes. La première, appelée *problèmes continus*, concerne les cas où l'interface progresse continuellement dans un même sens. Elle correspond à une transformation de phase continue du milieu. Les *problèmes asymptotiques* où la frontière solide/liquide se déplace de façon asymptotique vers une position donnée forment la seconde classe. Il s'agit dans ce cas d'une transformation partielle mais continue du matériau fusible où les deux phases tendent vers un état d'équilibre. Enfin, la dernière classe est désignée par *problèmes de croissance et de décroissance* concerne les cas où une phase se forme dans un milieu et disparaît, partiellement ou complètement, par le phénomène inverse. Le front de changement de phase se déplace dans un sens jusqu'à une certaine position pour rebrousser chemin et revenir en sens inverse.

1.4.3 Classification énergétique

Dans ce cas, la catégorisation dépend de la nature du matériau fusible. Elle distingue les problèmes selon la forme de la région qui participe au dégagement (ou absorption) de la chaleur latente de changement de phase. Dans le cas des corps purs, la transformation d'état se fait à température constante et la zone qui participe au dégagement (ou absorption) de chaleur latente est une surface. On parle dans ce cas de *transformation de phase franche* ou *isotherme*. Par contre, les corps composés, tels que les polymères, se transforment dans une plage de température et la région concernée par le changement de phase est un volume. La plage de température est limitée par les isothermes du liquidus et du solidus entre lesquelles la chaleur latente est libérée ou absorbée. On dit qu'ils subissent une *transformation de phase étalée*.

1.5 Rôle de la convection naturelle

La convection naturelle peut apparaître dans une phase fluide dès que des gradients (de températures, de concentration) créent des variations de densités dans le milieu. Dans le champ de gravité, ceci induit des forces de volumes et en général l'apparition d'un écoulement. Dans un mélange binaire par exemple, les gradients de concentration peuvent se coupler aux gradients de température et induire des forces de volumes d'origine solutale qui renforcent ou réduisent, suivant les cas, l'effet des forces d'origine thermique et donnent naissance à des rouleaux convectifs. Aussi, des gradients de température importants à la surface libre d'un liquide chauffé, peuvent être à l'origine des forces de tension superficielle donnant lieu à la convection thermocapillaire. Notons que relativement à la première, les convections thermocapillaire et thermosolutale sont

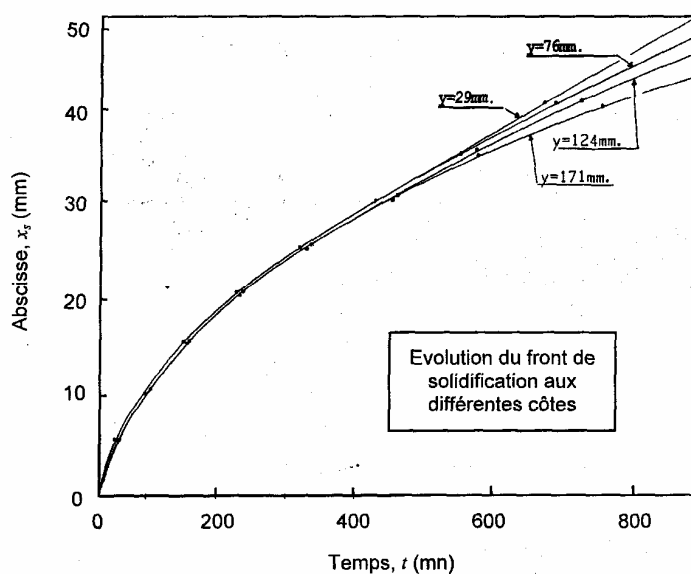
peu étudiées.

Bien que le cycle fusion-solidification apparaisse comme réversible, il en est tout autrement du point de vue de la cinétique, car le rôle de la convection naturelle dans la phase liquide n'étant pas le même dans les deux processus.

1.5.1 Cas de la solidification

Dans le cas de la solidification, l'énergie est extraite à travers une couche solide qui s'épaissit progressivement à partir de la surface d'échange et dont la résistance thermique est proportionnelle au rapport de cette épaisseur sur la conductivité thermique. Le liquide se refroidit progressivement jusqu'à la température de solidification. Bien que les phénomènes convectifs soient présents, dans le cas où le liquide est surchauffé, ils se produisent pendant un temps relativement bref au début de la solidification jouent un rôle négligeable devant les transferts conductifs.

FIG. 1.1 – Evolution du front de solidification pour différentes positions verticales [46].

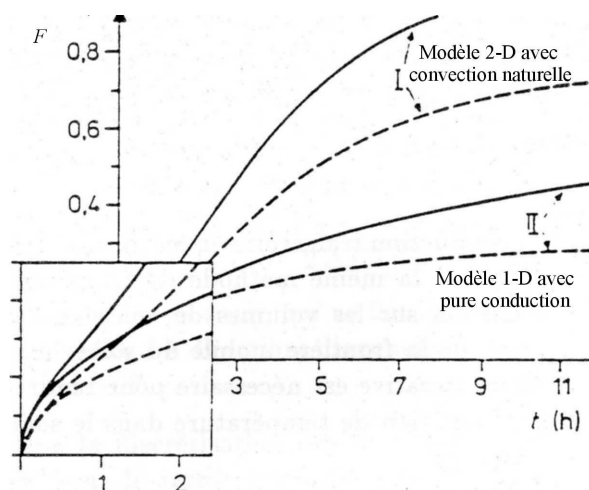


La figure 1.1 présente l'évolution dans le temps du front de solidification obtenue expérimentalement par Delaunay [46] pour différentes positions verticales. On peut noter la superposition des ces évolutions pendant une grande partie de la période de solidification. Même les écarts observés après 800 mn restent négligeables, le mouvement du front est retardé d'environ 5% à mesure que nous montons en hauteur.

1.5.2 Cas de la fusion

Dans le cas de la fusion, une gaine se forme entre la surface active (front de fusion) et la phase initiale encore solide. Les transferts de chaleur s'y produisent par conduction et dans de nombreux cas par convection naturelle, de ce fait, le transfert est sensiblement augmenté et donc la cinétique de fusion est plus rapide. Le modèle numérique développé par D. Gobin [47] a montré que la convection naturelle lors de la fusion a pour effet de doubler pratiquement le volume fondu. La figure ci-dessous (FIG. 1.2) montre clairement ce résultat, elle donne les simulations numériques des évolutions de la variation de la fraction fondue F en fonction du temps t dans le cas où la convection naturelle est prise en compte dans les équations du problème et dans celui où elle est négligée. Notons également que la figure rend très bien compte du rôle insignifiant, aussi bien dans le cas du problème à deux phases qu'à une phase, que joue la convection naturelle au début du processus. En effet, durant les 30 premières minutes, les mouvements du front de fusion prédits par les deux modèles sont confondus.

FIG. 1.2 – Résultats de simulation numérique [47] : Influence de la convection naturelle sur la fraction fondue F en fonction du temps t pour $Ste = 0.2$ dans le cas des problèmes à une phase (courbes continues) et à deux phases en (courbes discontinues).

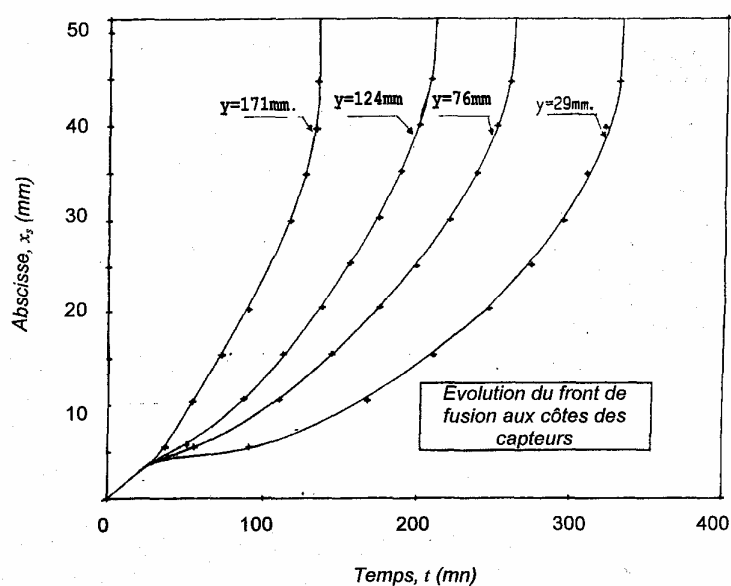


A travers une étude comparative synthétisant les résultats de plusieurs investigations numériques, relatives à la simulation de la fusion contrôlée par la convection naturelle le long d'une paroi verticale isotherme d'une cavité rectangulaire, O. Bertrand et col. [48] montrent que le processus de fusion passe par deux périodes. Au début, les transferts de chaleur sont purement conductifs et l'interface se déplace parallèlement à

la surface d'échange. Par la suite, au fur et à mesure que la couche liquide augmente en épaisseur, des courants convectifs se développent à partir de la partie supérieure de la cavité et gagnent progressivement toute la couche fondue pour dominer les transferts thermiques. Le temps nécessaire au développement de ces rouleaux convectifs dépend de la nature du matériau. Il est d'autant plus long que celui-ci est caractérisé par un nombre de Prandtl faible (rapport de la viscosité cinématique sur la diffusivité thermique).

La figure suivante (FIG. 1.3) fournie également par l'étude expérimentale, de Delaunay met bien en évidence ce rôle négligeable que joue la convection naturelle au début du processus. Elle montre également l'importance de l'influence de celle-ci à mesure que l'épaisseur de la couche fondue s'épaissit. Le front de fusion est accéléré dans la partie supérieure sous l'effet des courants de convection.

FIG. 1.3 – Evolution du front de fusion pour différentes positions verticales [46].



1.5.3 Conclusion

Le rôle joué par la convection naturelle dans les phénomènes de solidification et fusion apparaît particulièrement au niveau de la forme du front de changement de phase. Dans le cas de la solidification, où les transferts conductifs sont dominants, la couche solidifiée présente une épaisseur uniforme, d'où un front de solidification parallèle à la surface d'échange (solidification quasi-unidimensionnelle). Alors que dans

le cas de la fusion, les courants convectifs, qui nécessitent du temps pour se développer, augmentent la vitesse de fusion à mesure qu'on monte en hauteur amenant la couche fondue à s'épaissir progressivement de bas en haut. Des études antérieures, aussi bien numériques [49, 50] qu'expérimentales [51, 52], ont mis en évidence ces différents rôles que joue la convection naturelle sur la forme de l'interface solide/liquide selon qu'il s'agisse de la solidification ou de la fusion.

1.6 Situation du sujet

L'importance de la conduction unidimensionnelle dans les phénomènes de solidification et de fusion, mise en évidence par la section précédente (§1.5), explique l'intérêt qu'elle continue de susciter. Les résultats, aussi bien numériques qu'expérimentaux, montrent que lorsque la solidification est initiée à partir d'une surface verticale, l'interface se déplace en restant parallèle à celle-ci. Ce constat est également valable pour le front de fusion au début du processus de changement de phase. Ainsi, l'étude du problème de solidification contrôlée par la conduction unidimensionnelle peut rendre compte du taux de changement de phase et fournir des premiers résultats tout à fait intéressants de point de vue pratique. Cependant, et malgré les nombreuses études qui lui ont été consacrées, le problème reste toujours d'actualité et continue de faire l'objet de beaucoup d'intérêt aussi bien dans la recherche appliquée que fondamentale [18, 21, 38, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60].

La présente étude concerne un problème de Stefan à une phase, isotherme, continu et avec température de paroi dépendant du temps. Le cas d'une température fixée à la surface d'échange correspond au *problème classique de Stefan à une phase*. L'étude a pour ambition de fournir une approche analytique ou semi-analytique qui permet de suivre le mouvement de l'interface solide/liquide avec une bonne précision. Il s'agit également de déterminer une solution purement analytique pour la constante de solidification pour le cas où la température de la surface d'échange est maintenue à température fixée.

Le modèle physique considère la solidification plane d'un liquide occupant le demi-espace² $\eta \geq 0$ et se trouvant initialement à son point de fusion $\theta_m = 0$. Le changement de phase est initié à partir de la surface d'échange $\eta = 0$ en portant sa température F de façon instantanée à une valeur inférieure à celle de changement de phase. Elle demeurera constante, dans le premier cas, traduisant le problème classique de Stefan, ou bien elle évoluera, devenant un problème de Stefan à température de paroi variable,

²Les variables introduites dans ce chapitre sont celles définies au chapitre suivant dans la modélisation mathématique du problème

dans le second cas.

Le modèle mathématique est décrit par une équation de diffusion instationnaire et unidimensionnelle dans un domaine limité par une frontière dont la position, $\eta = \Delta(\tau)$, est une inconnue à priori. En outre, la condition de saut de flux au niveau de cette dernière complique d'avantage l'analyse mathématique en introduisant la nonlinéarité.

En désignant par Ste , le nombre de Stefan qui exprime la chaleur latente adimensionnelle, cette condition se traduit mathématiquement par

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\eta=\Delta} = -\frac{1}{Ste} \frac{d\Delta}{d\tau} \quad (1.1)$$

Dans ce qui suit, l'évolution exacte de la position de l'interface obtenue par Stefan est rapportée. Elle est valable quand la température de la surface d'échange est imposée (constante). Les solutions analytiques et numériques approchées obtenues quand la température appliquée est variable sont également rapportées et discutées.

1.6.1 Température de paroi imposée

Le problème de Stefan à une phase avec température fixée sur la surface d'échange $\eta = 0$ présente une solution exacte. C'est la solution de Stefan (voir Annexe B) qui exprime la position de l'interface sous forme

$$\Delta(\tau) = 2\lambda\sqrt{\tau} \quad (1.2)$$

où le paramètre de proportionnalité λ , appelée constante de solidification, est solution de l'équation transcendente suivante

$$\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{Ste}{\sqrt{\pi}} \quad (1.3)$$

erf est la fonction erreur (Annexe C.4).

Il faut noter que la solution requière une procédure numérique. Plusieurs travaux ont approché la constante λ avec une expression purement analytique permettant ainsi d'éviter la procédure numérique. Des expressions de plus en plus précises sont obtenues dont quelques unes sont rapportées par les chapitres 4 et 5. En outre, on remarquera que la vitesse initiale ($\tau = 0$) de solidification, déduite de la solution (1.2), n'est pas définie.

Finalement, il est constaté que les investigations, même plus récentes [56, 57, 21, 58] traitant du sujet, omettent rarement de rapporter la solution de Stefan. Deux raisons peuvent être invoquées, à savoir : elle sert d'outil pour valider les modèles développés et permet de fournir des solutions de démarrage pour les schémas numériques dont la solution initiale constitue une singularité.

1.6.2 Température de paroi variable

Le cas du problème de Stefan avec température de paroi variable a reçu également beaucoup d'attention sans pour autant aboutir à la solution exacte. Plusieurs solutions approchées sont développées en utilisant les méthodes analytiques et numériques. Les premières se basent principalement sur la méthode de l'intégrale de l'énergie [16, 17, 11, 61, 62, 9] et à un degré moindre sur la méthode des perturbations [18]. Les méthodes numériques, pour lesquelles nous nous limitons aux techniques explicites, utilisent des procédures d'adaptation de maillage pour suivre le mouvement de l'interface [21, 19].

a. Modèles d'El-Genk et Cronenberg

El-Genk et Cronenberg [16] utilisent la méthode de l'intégrale double, développée sur la base de la méthode de l'intégrale de l'énergie. La méthode aboutit à une équation différentielle ordinaire non linéaire que les auteurs linéarise, soit en limitant la solution à une valeur moyenne (§5.2.2.a) ou bien en forçant un profil de température, à trois paramètres, à vérifier quatre conditions aux limites (§5.2.2.b). Les deux procédures aboutissent aux solutions suivantes

- *Moyenne des valeurs limites (MVL)*

Ce modèle est basé sur la définition d'un paramètre de solidification moyenné par ses valeurs limites. Ces dernières sont déterminées en considérant la distribution de température sous le signe intégrale égale soit à la valeur maximale ou à la valeur minimale.

$$\Delta^2(\tau) = \frac{Ste (SteF + 2 + 2\sqrt{SteF + 1})}{2(SteF + 1)} \int_0^\tau F d\tau \quad (1.4)$$

- *Profil quadratique (DIPQ)*

Pour plus de précision, les auteurs substituent à la distribution de température un profil quadratique à trois paramètres. Une équation supplémentaire, déduite de la combinaison de l'équation de la chaleur et du bilan thermique à l'interface, est utilisée pour exprimer la vitesse, $\frac{d\Delta}{d\tau}$, du front de solidification en fonction de la position, Δ , de celui-ci et de la température de la paroi d'échange, $F(\tau)$. L'analyse aboutit à la solution suivante

$$\Delta^2(\tau) = \frac{12Ste}{SteF + 5 + \sqrt{1 + 2Ste}} \int_0^\tau F d\tau \quad (1.5)$$

b. Modèle de Mennig et Özişik

La méthode de l'intégrale de l'énergie de Goodman est également sollicitée par Mennig et Özişik [17] pour suivre le mouvement de la frontière solide/liquide. Pour évaluer le flux à la surface d'échange $\eta = 0$, les auteurs considèrent une variation linéaire de celui-ci dans la couche solidifiée pour l'exprimer en fonction de l'épaisseur et des températures aux frontières de cette couche d'une part et à la chaleur latente générée par le changement de phase d'autre part. La variation de l'énergie interne du solide est évaluée en utilisant la formule des trapèzes pour approcher le terme intégrale. La procédure aboutit à l'expression suivante pour la position de l'interface

$$\Delta^2(\tau) = \frac{8Ste \int_0^\tau F(4 + SteF)d\tau}{(4 + SteF)^2} \quad (1.6)$$

Comme il sera examiné au chapitre 4 (§4.6), l'intérêt de cette procédure, de mise en œuvre de la méthode de l'intégrale de l'énergie, réside dans le fait qu'une détermination explicite de l'expression du profil de température, substitué à la distribution exacte dans l'équation intégrale de l'énergie, n'est pas nécessaire selon les auteurs.

L'étude considère une température variant dans le temps selon la loi $F(\tau) = 1 - 0.2\tau$ au niveau de la frontière $\eta = 0$. Les résultats numériques, donnés sous forme de tables pour les valeurs 0.2, 1 et 5 du nombre de Stefan, concernent les instants de passage de l'interface par des positions particulières dans le milieu.

c. Modèle de Caldwell et Kwan

Caldwell et Kwan [18] développent une solution numérique à partir de la méthode des perturbations basée sur des développements en séries des puissances du nombre de Stefan, Ste . Le modèle mathématique est reformulé, au préalable, pour rendre le temps τ implicite dans les équations. De plus, la position de l'interface Δ est supposée une fonction monotone du temps pour pouvoir la substituer à ce dernier comme variable indépendante dans les équations.

La solution à l'ordre 3 du paramètre des perturbations est donnée par

$$\left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^3 + \psi_1(\tau, \Delta) \left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^2 + \psi_2(\tau, \Delta) \frac{d\Delta}{d\tau} + \psi_3(\tau, \Delta) = 0 \quad (1.7)$$

où les coefficients ψ_1 , ψ_2 et ψ_3 ont pour expressions

$$\begin{aligned}\psi_1(\tau, \Delta) &= -\frac{SteF}{\Delta} \left[1 - \frac{Ste}{3}F + \frac{7Ste^2}{45}F^2 \right] \\ \psi_2(\tau, \Delta) &= Ste^2F \frac{dF}{d\tau} \left[\frac{1}{6} - \frac{25Ste}{72}F \right] \\ \psi_3(\tau, \Delta) &= -Ste^3F\Delta \left[\frac{5}{36} \left(\frac{dF}{d\tau} \right)^2 - \frac{13}{360}F \frac{d^2F}{d\tau^2} \right]\end{aligned}$$

A chaque pas de temps, une procédure numérique est requise pour déterminer la vitesse de l'interface $\frac{d\Delta}{d\tau}$ qu'il faudra intégrer numériquement pour déterminer la position de l'interface, Δ . De plus, le démarrage de la procédure d'intégration nécessite une solution autre que la condition initiale qui constitue une singularité. Pour obtenir cette solution, les auteurs supposent que les dérivées première et seconde de la fonction F n'influent pas sur la solution quand celle-ci est limitée à des valeurs petites pour le temps τ . En annulant ces dérivées dans les expressions de ψ_1 , ψ_2 et ψ_3 , ils obtiennent la relation suivante³

$$\Delta^2(\tau) = 2Ste \int_0^\tau F \left[1 - \frac{Ste}{3}F + \frac{7Ste^2}{45}F^2 \right] d\tau \quad (1.8)$$

qui est utilisée pour déterminer la solution de démarrage. Il faut noter que cette solution n'est autre que la solution du problème de Stefan avec température de paroi imposée, $F = 1$, qui peut s'avérer parfois loin de la réalité physique du phénomène.

Les auteurs ont considéré l'efficacité de la méthode pour un nombre de Stefan égal à 0.2 et pour une température de paroi $F = 1 - 0.2\tau$ telle que considérée par les deux études précédentes.

d. Modèle de Gupta et Kumar

Gupta et Kumar [19, 20] développe une méthode numérique explicite sur la base d'une approximation aux différences finies explicite (§3.3.1.c). Une procédure itérative de prédiction-corrrection permet d'adapter le pas de temps au mouvement de l'interface pour que la distance parcourue par celle-ci durant chaque intervalle de temps corresponde à la distance inter-nodale. La condition de saut découlant du flux de chaleur à l'interface est utilisée pour les prédictions et comme test de convergence.

Comme dans le cas du modèle précédent, la condition initiale constitue une singularité pour le schéma numérique qui requière donc une solution de démarrage. D'un autre côté, la méthode est très couteuse en temps de calcul du fait du critère d'instabilité du

³Dans le papier, il manque sous le signe intégrale le terme F extérieur aux crochets

schéma numérique d'une part et de la procédure itérative d'autre part. La considération d'un schéma implicite, qui est plus stable, ne permet pas un gain significatif en temps de calcul. En effet, dans ce cas, la nature nonlinéaire du modèle mathématique augmente le nombre d'itérations. Enfin, la méthode ne permet pas de suivre dans le temps la trace de la frontière mobile mais fournit les instants de son passage par les nœuds du maillage.

e. Modèle de Savović et Caldwell

Le modèle numérique utilisé par Savović et Caldwell [21] considère également une technique explicite qui se base sur la modification du maillage. Au lieu de procéder par des prédictions-corrrections, les auteurs déterminent la position de l'interface à chaque pas de temps pour pouvoir la coïncider avec un nœud du maillage (§3.3.2.b). La condition nonlinéaire, approximée par une représentation explicite, sert d'outil de localisation de l'interface. La discrétisation de l'équation de la chaleur suivant une représentation aux différences finies explicite permet le calcul de la distribution de température.

L'étude fait appel à la solution exacte de Stefan pour déterminer une solution de démarrage, nécessaire pour amorcer la procédure numérique. Contrairement au modèle de Gupta et Kumar, ce modèle permet de suivre le mouvement de l'interface en permettant de connaître sa position à tout instant par modification du pas de temps.

Les résultats numériques fournis dans le papier concernent une évolution périodique de la température de paroi dans le cas de trois valeurs du nombre de Stefan, à savoir 0.2, 1 et 2. Deux fonctions sinusoïdales sont également considérées pour la température de paroi $F = 1 + 0.5 \sin(\frac{\pi}{2}\tau)$ et $F = 1 + 0.9 \sin(\frac{\pi}{2}\tau)$

1.6.3 Comparaison des différents modèles

Il faut noter que la méthode des perturbations présente certains inconvénients non négligeables. Le plus important réside dans son domaine d'application qui se restreint aux faibles valeurs du paramètre de perturbations, Ste , et aux seules variations continues et monotones pour la température de la surface d'échange. En outre, la technique requière, à chaque pas de temps, la résolution d'une équation algébrique nonlinéaire d'une part et l'intégration d'un système d'équations différentielles d'autre part. Enfin, comme dans le cas des méthodes numériques, le démarrage du processus itératif nécessite une solution autre que la condition initiale qui constitue une singularité.

Les différentes solutions sont examinées dans le cas d'un saut initial de la température de paroi précisée par la fonction $F = 1 - 0.2\tau$. Les résultats numériques sont

rapportés pour $Ste = 0.2$, dans le cas de la méthode des perturbations et pour les valeurs 0.2, 1 et 5 du nombre de Stefan pour les autres solutions (TAB. 5.3). Les résultats concernent la localisation de l'interface à différents instants. Il est important de noter que parmi les méthodes numériques explicites (dans le sens de suivi de l'interface ou méthodes à deux phases), celle qui consiste à modifier le pas d'espace est la plus précise et la plus économique [15, 59, 56, 21].

Les résultats mettent en évidence le rôle du nombre de Stefan, Ste , sur le mouvement du front de solidification dont la vitesse augmente avec la valeur de ce dernier. Par conséquent, des pas d'intégration numérique plus réduits doivent être considérés augmentant ainsi le temps de calcul. Les méthodes analytiques, par contre, sont insensibles à la valeur du nombre de Stefan.

Les résultats montrent également un bon accord entre les positions de l'interface solide/liquide fournies par les différentes méthodes. Cependant, la comparaison des différentes prédictions de la localisation du front mobile avec celles données par la méthode numérique à pas d'espace variable, montre que la méthode de l'intégrale double développée sur la base d'un profil quadratique (DIPQ) présente des solutions nettement plus proches. Pour de faibles valeurs de Ste , la méthode peut se suffire d'un profil linéaire pour fournir des résultats assez précis.

1.6.4 Situation de l'étude

La section précédente a montré que les méthodes développées sur la base de la méthode de l'intégrale de l'énergie permettent d'approcher la solution tout en gardant la simplicité de cette dernière. Il convient de noter cependant que :

- la méthode de l'équation de l'intégrale couplée de Mennig et Özişik [17] n'améliore la méthode de l'intégrale de l'énergie que dans le domaine $0.1 \leq Ste \leq 8$ (voir § 4.6). Ce qui explique le choix par les auteurs des valeurs 0.2, 1 et 5.
- l'approche de la double intégrale considérée par El-Genk et Cronenberg [16] est obtenue à l'aide de la formulation du problème qui s'appuie sur un domaine fixe. De ce fait, son extension au problème de Stefan à deux phases peut s'avérer délicate. De plus, les auteurs ont fait appel à la condition de Stefan sous ses deux formes, alternatives et originelle. Une étude récente de Wood [53] a montré que la condition de Stefan sous sa forme alternative a pour effet de réduire la précision de la méthode de l'intégrale, particulièrement quand elle est utilisée dans l'équation intégrale.

Il serait donc judicieux de reprendre la méthode de l'intégrale de l'énergie et la technique de la double intégrale en considérant le modèle mathématique selon la for-

TAB. 1.1 – Résultats comparatifs des différentes méthodes sur la localisation de l’interface solide/liquide pour trois nombres de Stefan et dans le cas d’une température de paroi donnée par : $F(\tau) = 1 - 0.2\tau$

Ste	Temps, τ	El-Genk et Cronenberg		Gupta et Kumar [19]	Mennig et Özişik [17]	Savović et Cadwell [21]	Caldwell et Kwan [18]
		MVL [16]	DIPQ [16]				
0.2	$0.6239 \cdot 10^{-2}$	0.0478	0.0484	0.0500	0.0487	0.0484	0.0484
	$0.2618 \cdot 10^{-1}$	0.0978	0.0991	0.1000	0.0997	0.0991	0.0991
	0.1068	0.1968	0.1994	0.2000	0.2008	0.1994	0.1994
	0.2441	0.2958	0.2995	0.3000	0.3017	0.2996	0.2995
	0.4425	0.3948	0.3993	0.4000	0.4027	0.3997	0.3996
	0.7094	0.4939	0.4989	0.5000	0.5037	0.4997	0.4995
	1.0570	0.5932	0.5981	0.6000	0.6047	0.5997	0.5994
	1.5080	0.6931	0.6972	0.7000	0.7062	0.6999	0.6995
	2.1030	0.7933	0.7955	0.8000	0.8079	0.7999	0.7995
2.9510	0.8946	0.8927	0.9000	0.9104	0.8999	0.9000	
1.0	$0.6206 \cdot 10^{-2}$	0.0951	0.0981	0.1000	0.0996	0.0977	-
	$0.2561 \cdot 10^{-1}$	0.1930	0.1992	0.2000	0.2023	0.1984	-
	$0.5816 \cdot 10^{-1}$	0.2906	0.2998	0.3000	0.3047	0.2986	-
	0.1040	0.3881	0.4002	0.4000	0.4071	0.3987	-
	0.1634	0.4856	0.5005	0.5000	0.5096	0.4988	-
	0.2367	0.5832	0.6007	0.6000	0.6124	0.5990	-
	0.3242	0.6807	0.7007	0.7000	0.7155	0.6990	-
	0.4265	0.7784	0.8005	0.8000	0.8188	0.7990	-
	0.5443	0.8762	0.9001	0.9000	0.9227	0.8991	-
0.6783	0.9741	0.9994	1.0000	1.0270	0.9992	-	
5.0	$0.1964 \cdot 10^{-2}$	0.0987	0.0941	0.1000	0.0934	0.0936	-
	$0.8496 \cdot 10^{-2}$	0.2052	0.1956	0.2000	0.1944	0.1947	-
	$0.1949 \cdot 10^{-1}$	0.3107	0.2963	0.3000	0.2945	0.2949	-
	$0.3495 \cdot 10^{-1}$	0.4159	0.3967	0.4000	0.3946	0.3948	-
	$0.5490 \cdot 10^{-1}$	0.5210	0.4970	0.5000	0.4949	0.4946	-
	$0.7935 \cdot 10^{-1}$	0.6259	0.5973	0.6000	0.5954	0.5944	-
	0.1083	0.7307	0.6976	0.7000	0.6964	0.6941	-
	0.1418	0.8354	0.7979	0.8000	0.7978	0.7938	-
	0.1799	0.9400	0.8983	0.9000	0.8997	0.8936	-
0.2226	1.0445	0.9987	1.0000	1.0023	0.9933	-	

mulation dans un domaine variable. La condition alternative de Stefan sera mise à profit pour améliorer la courbure du profil de température substitué à la distribution exacte.

Les avantages que présente la méthode numérique de suivi de l'interface qui s'appuie sur la modification du pas d'espace, et en particulier la précision avec laquelle elle permet la localisation du front mobile, motive son étude afin d'améliorer encore plus cette dernière. Dans ce cas, les solutions fournies par la méthode de l'intégrale modifiée peuvent être validées dans le cas du problème de Stefan avec température de paroi variable.

1.7 Conclusion

Le présent chapitre a permis de rapporter et de classer les différentes études pionnières concernant le problème de Stefan et l'importance des différentes contributions. Il justifie l'intérêt que continue de susciter le problème de solidification plane contrôlée par la conduction en s'appuyant sur des résultats numériques et expérimentaux disponibles dans la littérature. Enfin, en examinant les différentes études consacrées au problème de Stefan avec température de paroi variable, il permet de situer l'objet de la présente contribution.

Chapitre 2

Formulation du problème

2.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre concerne la mise en équations de la solidification contrôlée par la conduction transitoire. Les équations sont établies dans le cas général de conduction tridimensionnelle dans un premier temps. Toutes les formulations mathématiques développées dans la littérature, à partir des modèles explicites et implicites, sont ainsi revues.

Enfin, le chapitre établit deux modèles explicites pour le phénomène de solidification dans le cas réduit d'un problème de Stefan à une phase et à une dimension. Le premier est établi sur la base d'un domaine mobile, alors que le second utilise un domaine transformé qui fixe l'interface solide/liquide.

2.2 Modèle physique

2.2.1 Introduction

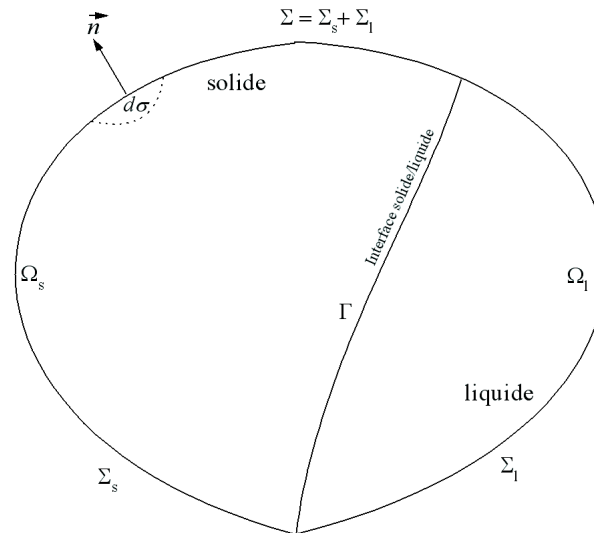
La formulation du problème passe par la définition d'un modèle physique qui servira d'assise pour la mise en équation du problème de solidification/fusion contrôlée par la conduction tridimensionnelle. A ce titre, les deux formulations utilisées dans la littérature et les différentes modélisations développées sont introduites.

2.2.2 Définition du modèle

Nous considérons, comme modèle physique, la solidification au sein d'un matériau fusible qui se trouve initialement, entièrement à l'état liquide et à une température plus importante que son point de fusion T_m . Nous désignons par Ω le volume de contrôle délimité par sa surface extérieure Σ (FIG. 2.1). La solidification est initiée à partir de la surface extérieure en portant celle-ci instantannément à une température inférieure

à T_m . Nous désignons également par Γ la surface de séparation des volumes liquide Ω_l et solide Ω_s à un instant $t > 0$ tel que $\Omega = \Omega_s \cup \Omega_l \cup \Gamma$.

FIG. 2.1 – Volume de contrôle Ω contenant l'interface solide/liquide de surface extérieure $\Sigma = \Sigma_l \cup \Sigma_s$.



Afin d'établir les équations gouvernant le transfert de chaleur et le taux de solidification, les hypothèses simplificatrices appliquées au modèle mathématique sont d'abord présentées.

2.2.3 Hypothèses simplificatrices

Le transfert de chaleur avec solidification peut faire intervenir des phénomènes tellement complexes que la modélisation en elle même peut constituer une tâche difficile. Il est donc nécessaire d'effectuer un certain nombre d'hypothèses pour simplifier la formulation mathématique du problème.

Les principales hypothèses simplificatrices de base sur lesquelles est construit le modèle de solidification (ou fusion) contrôlée par la diffusion transitoire de la chaleur sont les suivantes :

- i*) Les transferts thermiques se font uniquement par conduction transitoire. Comme nous l'avons vu au chapitre précédent (§1.5), cette hypothèse peut être considérée même dans le cas de la fusion mais en se limitant au début du processus.

- ii*) Tout autre phénomène de transport de chaleur est négligé devant les transferts conductifs.
- iii*) On admet que la conduction microscopique est parfaitement décrite par la loi de Fourier.
- iv*) Les propriétés thermophysiques des phases liquide et solide sont constantes et indépendantes de la température. Elles peuvent être différentes pour les deux phases.
- v*) Le matériau est homogène et isotrope.
- vi*) Le matériau est parfaitement pur de sorte à considérer un changement de phase isotherme.
- vii*) L'interface est lisse et mécaniquement stable, écartant toute formation de dendrites.
- viii*) Le mouvement du front de solidification est dû uniquement au changement de phase. Les variations de vitesses dues au saut de densités à l'interface sont négligeables.

2.3 Modèles mathématiques

L'équation qui gouverne les variations de température dans le matériau fusible est déduite à partir du principe de conservation d'énergie appliqué à un volume de contrôle contenant le matériau fusible. Nous désignerons par e l'énergie interne spécifique du matériau et par ϕ et Q , respectivement, le flux de chaleur conduit par unité de surface et la quantité de chaleur latente produite par unité de volume. Considérons enfin, un élément de volume Ω délimité par sa surface extérieure Σ .

L'expression du principe de conservation d'énergie appliquée à Ω se traduit par une équation reliant la variation de son énergie interne à la quantité de chaleur traversant sa frontière extérieure d'une part, et à la chaleur latente générée par le processus de changement d'état d'autre part. Soit :

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial e}{\partial t} d\vartheta + \int_{\Omega} \dot{Q} d\vartheta + \int_{\Sigma} \vec{\phi} \cdot \vec{n} d\sigma = 0 \quad (2.1)$$

où $d\vartheta$ est un élément de volume de Ω , \vec{n} un vecteur unitaire normal à l'élément de surface $d\sigma$ de $d\vartheta$ et dirigé suivant la direction sortante de ce dernier. \dot{Q} est la quantité de chaleur latente dégagée par unité de volume du matériau fusible et par unité de temps.

L'énergie interne par unité de masse e est donnée par :

$$e = \int_{T_r}^T cdT \quad (2.2)$$

T est la température et T_r celle d'un point de référence. Le flux de chaleur obéit à la loi de Fourier, soit :

$$\vec{\phi} = -k\vec{\nabla}T \quad (2.3)$$

Si nous désignons par L la chaleur latente par une unité de masse, nous pouvons exprimer la quantité d'énergie emmagasinée sous forme de chaleur latente par unité de temps \dot{Q} par :

$$\dot{Q} = \rho L \frac{\partial g_l}{\partial t} \quad (2.4)$$

où g_l ($0 \leq g_l \leq 1$) la fraction liquide par unité de volume. En désignant de façon analogue par g_s la fraction solide, nous avons $g_l = 1 - g_s$. Ces deux paramètres sont déterminés en fonction de la température T .

Deux modèles mathématiques sont construits sur la base des équations établies : *le modèle à une phase* ou *implicite* et *le modèle à deux phases* ou *explicite*. Dans le premier cas, l'équation de l'énergie est écrite de façon à vérifier implicitement le bilan thermique à l'interface dont la localisation n'est pas nécessaire pour aboutir à la solution du problème. Elle est déduite de l'évolution de la distribution de température dans le domaine. Par contre, le second modèle considère l'équation de l'énergie dans chaque phase séparément et développe une équation de couplage en vérifiant le bilan thermique à l'interface et à partir de laquelle on localise cette dernière.

Dans le présent travail, nous nous intéresserons à une méthode explicite pour approcher la solution d'un problème de Stefan. Le suivi de l'interface constitue l'objectif principale de la solution. Il est donc naturel que nous adoptions, dans ce qui suit, les désignations de modèles implicite et explicite, au lieu de modèles à une phase ou à deux phases.

2.3.1 Modèles implicites

Dans les modèles implicites, le domaine solide/liquide est traité comme une seule phase. Le terme source de chaleur latente est présent implicitement dans une équation d'énergie valable sur tout le domaine Ω . Ils sont appelés également *modèles à une phase* ou *enthalpiques*.

Compte tenu de l'expression de la source de chaleur \dot{Q} (éq.2.4), l'équation de conservation d'énergie (éq.2.1) peut s'écrire sous la forme :

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial}{\partial t} [e + Lg_l] d\vartheta = - \int_{\Sigma} \vec{\phi} \cdot \vec{n} d\sigma \quad (2.5)$$

Afin de déduire l'équation locale, l'analyse transforme l'intégrale de surface de membre de droite de l'équation précédente en une intégrale de volume en utilisant le théorème de la divergence (Gauss). Cependant, cette opération n'est valable que si la fonction sous le signe intégrale est continue sur tout le domaine Ω . Ce qui n'est pas le cas du flux de chaleur ϕ qui présente une discontinuité, au niveau de l'interface Γ , à cause de la chaleur latente de changement de phase. Cette entorse, que fait cette formulation, au critère de validité du théorème de Gauss fait que certains auteurs la désignent également de *formulation faible*. En tenant compte de la définition du flux (éq.2.3), l'analyse aboutit à l'équation suivante :

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} [e + Lg_l] = k \nabla^2 T \quad (2.6)$$

A partir de ce point et selon le traitement réservé au terme entre crochets de l'équation (2.6) , nous distinguons trois formulations :

a. Formulation enthalpique

Définissons l'enthalpie totale [63] du matériau fusible h comme étant la somme de la chaleur sensible h_c et de la chaleur latente associée au changement de phase h_L . Soit :

$$h = h_c + h_L = e + Lg_l \quad (2.7)$$

La chaleur sensible n'est, en fait, que l'énergie interne e dans ce cas. Ainsi, l'équation (2.6) relie les variations d'enthalpie du volume de contrôle aux flux de chaleur traversant sa surface extérieure. Elle s'écrit simplement :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} = k \nabla^2 T \quad (2.8)$$

avec h donné par :

$$h(T) = \int_{T_r}^T c dT + Lg_l \quad (2.9)$$

b. Formulation de la capacité calorifique apparente

La formulation introduit un changement de variable au niveau de l'équation (2.6) et isole le terme de variation temporelle de la température comme suit :

$$\rho \left[\frac{\partial e}{\partial T} + L \frac{\partial g_l}{\partial T} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T \quad (2.10)$$

L'identification des différents termes de cette équation montre que le terme entre crochets, qui prend en compte l'évolution de la chaleur latente, est équivalent à une chaleur spécifique. Compte tenu de la définition de e (éq. 2.2), une capacité calorifique équivalente peut être définie. Désignée par \tilde{C} , est s'exprime par

$$\tilde{C}(T) = c + L \frac{\partial g_l}{\partial T} \quad (2.11)$$

L'équation de l'énergie est alors remplacée par une nouvelle équation

$$\rho \tilde{C}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T \quad (2.12)$$

qui, contrairement à la formulation précédente, présente l'avantage de s'adapter facilement aux programmes développés pour l'équation de diffusion instationnaire de la chaleur.

c. Formulation du terme source

La formulation prend en compte la chaleur latente libérée ou absorbée à travers un terme représentant une source, exothermique ou endothermique, liée au front de changement de phase. La définition de celle-ci, basée sur la fraction volumique qui a subi la transformation d'état [64], est obtenue en isolant le terme de variation temporelle de cette dernière dans l'équation (2.6), soit :

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T + \rho L \frac{\partial g_s}{\partial t} \quad (2.13)$$

Le problème se ramène, ainsi, à une équation de diffusion instationnaire avec un terme source dépendant de l'espace et du temps.

d. Remarques

Les formulations implicites, que nous venons d'établir, nécessitent la connaissance de la fonction $h(T)$ pour la première, ou $\tilde{C}(T)$ pour la seconde, ou bien $g_s(T)$ ($= 1 - g_l(T)$) pour la troisième pour qu'elles soient complètes. C'est une fonction qui

définit le matériau fusible et donnée souvent sous forme de tables. C'est le cas des matériaux à fusion étalée, tels que les polymères, où le changement de phase se fait dans une plage de température, limitée par le *liquidus* et le *solidus*, et où les deux phases coexistent.

Dans le cas de matériau fusible pur caractérisé par un changement de phase isotherme, le liquide et le solide sont séparés par une surface. Les fractions solide et liquide g_s et g_l sont représentées par la fonction échelon (heavyside)

$$g_l = \begin{cases} 0, & \text{si } T \neq T_m \\ 1, & \text{si } T = T_m \end{cases}$$

faisant que l'enthalpie, $h(T)$, (éq.2.9) et la capacité calaorifique apparente, $\tilde{C}(T)$, (éq.2.12) présentent respectivement un saut et un pic au niveau de la température de changement de phase. Ces discontinuités rendent difficile, si ce n'est impossible, toute approche analytique et délicate toute approche numérique. Les approches développées par Voller [63] pour la méthode enthalpique, Bonacina et col. [65] pour la méthode de la capacité calorifique apparente et Voller et Swaminathan [64] pour la méthode du terme source, qui consistent à étaler la zone de changement de phase, de part et d'autre de l'isotherme T_m , où $h(T)$, $\tilde{C}(T)$ ou bien $g_s(T)$ varient linéairement, engendrent des solutions qui oscillent autour de la solution exacte.

Les traitements numériques réservés à ces modèles mathématiques, développés sur la base de la formulation implicite, ne font pas l'objet de cette étude, dès lors que celle-ci s'intéresse aux méthodes de suivi de l'interface (explicites). Cependant, il convient d'indiquer que pour des résultats similaires, la méthode enthalpique classique présente l'avantage d'être la plus économique en temps de calcul.

Le lecteur peut trouver plus de détails, concernant la mise en œuvre de ces modèles, dans la revue bibliographique de Voller et col. [66] ou dans les thèses de L. Clavier [67] et de S. Couturier [68] qui se sont intéressés, entre autres, à l'étude des performances de ces méthodes.

2.3.2 Modèle explicite

Dans le modèle explicite, la formulation mathématique du problème considère l'équation de transport dans les domaines solide et liquide de façon séparée. Les variations de température dans les deux phases sont régies par l'équation de diffusion instationnaire de la chaleur. Soit dans chaque domaine Ω_s et Ω_l , une équation du type

$$\rho_i c_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = k_i \nabla^2 T_i; \quad i = s, l \quad (2.14)$$

couplées l'interface solide/liquide, représentée par $\Gamma := \{\delta(x, y, z, t) = 0\}$, par la continuité de température d'une part et le bilan thermique d'autre part

$$T_i|_{\Gamma} = T_m; \quad i = s, l \quad (2.15)$$

$$k_l \vec{\nabla} T_l \cdot \vec{n}|_l - k_s \vec{\nabla} T_s \cdot \vec{n}|_s = \rho L v_n \quad (2.16)$$

ou sous une autre forme

$$k_l \left. \frac{\partial T_l}{\partial n} \right|_{\Gamma} - k_s \left. \frac{\partial T_s}{\partial n} \right|_{\Gamma} = \rho L v_n$$

où v_n est la composante normale de la vitesse de l'interface et \vec{n} la normale à celle-ci au point considéré. Compte tenu de l'équation (2.15) et de l'équation de l'interface, celles-ci sont données par

$$v_n = \vec{v} \cdot \vec{n} = -\frac{\partial \delta}{\partial t} \frac{1}{|\vec{\nabla} \delta|} = -\frac{\partial T_i}{\partial t} \frac{1}{|\vec{\nabla} T_i|}; \quad i = s, l \quad (2.17)$$

$$\vec{n} = \frac{\vec{\nabla} \delta}{|\vec{\nabla} \delta|} = \frac{\vec{\nabla} T_i}{|\vec{\nabla} T_i|}; \quad i = s, l \quad (2.18)$$

Les équations (2.16) et (2.15) sont appelées respectivement la première et la seconde condition de Stefan. Dans la présente étude, il sera référé à l'équation (2.16) par condition originelle de Stefan.

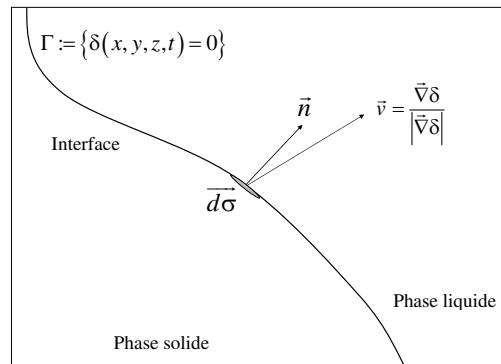
Le caractère isotherme de la solidification est également utilisé pour développer d'autres équations. En effet, en considérant la différentielle totale de la température à l'interface solide/liquide dont la température est fixe et connue, on peut écrire

$$dT_i|_{\Gamma} = 0; \quad i = s, l \quad (2.19)$$

et de là en déduire

$$\left. \frac{\partial T_i}{\partial t} \right|_{\Gamma} + \vec{v}_{\Gamma} \cdot \vec{\nabla} T_i|_{\Gamma} = 0; \quad i = s, l \quad (2.20)$$

FIG. 2.2 – Elément de surface sur le front de changement de phase solide/liquide



2.4 Problème de Stefan avec température de paroi variable

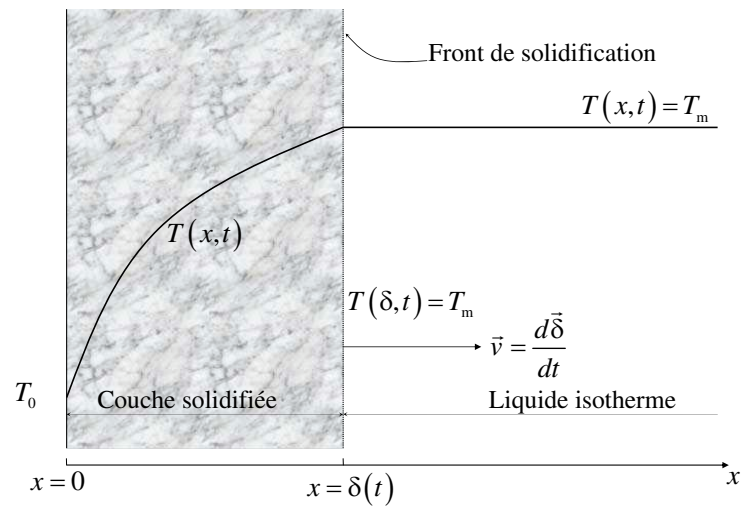
2.4.1 Introduction

Les différents modèles mathématiques formulés dans les sections précédentes sont obtenus dans le cas général d'un problème de solidification ou fusion contrôlée par la conduction thermique tridimensionnelle. Même si nous posons les conditions aux limites et initiales associées à chaque modèle (fermeture mathématique), il serait utopique d'envisager l'approche de la solution avec des méthodes explicites (méthodes de suivi d'interface). Nous considérons dans ce qui suit, le cas simple d'un problème de Stefan à une phase avec température de paroi variable dans le temps (FIG. 2.3). Les hypothèses simplificatrices suivantes sont également considérées

- i*) conduction unidimensionnelle
- ii*) l'interface est plane et parallèle à la surface d'échange. En principe c'est une conséquence de l'hypothèse précédente.
- iii*) le liquide reste en équilibre thermique parfait durant tout le processus de changement de phase.

2.4.2 Equations adimensionnelles

L'adimensionnement de l'équation de transfert de chaleur (2.14) et de l'équation de Stefan (2.16) est effectué à partir d'une température et d'une longueur de référence, T_r et l_r , et d'un temps exprimé à l'aide de la diffusivité thermique, α , et de la longueur de référence. L'abscisse est adimensionnée soit en utilisant la longueur de référence

FIG. 2.3 – Modèle physique de solidification plane avec température de paroi, $T_0(t)$, variable

dans le cas du modèle dans un domaine mobile, soit en faisant appel à la position de l'interface, $\delta(t)$, dans le cas du modèle dans un domaine fixe

a. Modèle dans un domaine mobile

Nous introduisons les variables adimensionnelles Δ , θ , η et τ , respectivement position de l'interface, température, abscisse et temps telles que définies par TAB.2.1 ci-dessous. Les équations prennent, avec ces variables, la forme adimensionnelle suivante :

TAB. 2.1 – Définition des variables adimensionnelles

$\eta = \frac{x}{l_r}$: abscisse
$\tau = \frac{x^2}{l_r^2}$: temps
$\Delta = \frac{\delta}{l_r}$: position de l'interface
$\theta = \frac{T - T_m}{T_r - T_m}$: température

Pour $\tau > 0$:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2}; \quad 0 < \eta < \Delta(\tau) \quad (2.21)$$

En $\eta = \Delta(\tau)$, l'équation de la chaleur doit vérifier les conditions suivantes :

$$\theta(\eta = \Delta(\tau), \tau) = 0 \quad (2.22)$$

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\Delta} = -\frac{1}{Ste} \frac{d\Delta}{d\tau} \quad (2.23)$$

où Ste est le nombre de Stefan (§ 2.4.3). Les conditions initiales, $\tau = 0$, sur la température et la position du front mobile sont données par :

$$\theta(\eta, \tau = 0) = 0 \quad (2.24)$$

$$\Delta(\tau = 0) = 0 \quad (2.25)$$

- *Equation de Stefan alternative*

L'équation de Stefan alternative est une relation qui combine les équations de conduction de la chaleur et de Stefan d'une part, et l'équation (2.20) écrite dans le cas unidimensionnel d'autre part. En éliminant la vitesse de l'interface entre cette dernière et l'équation de Stefan (2.23), on obtient :

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \right|_{\Delta} = Ste \left(\left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\Delta} \right)^2 \quad (2.26)$$

En admettant, par la suite, que le domaine de validité de l'équation de la chaleur (2.21) inclut même l'interface solide/liquide, on peut éliminer de l'équation précédente (2.26) la dérivée partielle de la température par rapport au temps pour aboutir à une équation où le temps devient une variable implicite. Soit :

$$\left. \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} \right|_{\Delta} = Ste \left(\left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\Delta} \right)^2 \quad (2.27)$$

En général, les méthodes explicites (de suivi de l'interface) font appel à l'un des deux modèles développés ci-dessus. Cependant, l'utilisation de la méthode des perturbations nécessite une reformulation de l'équation de transport pour l'exprimer en variable η et Δ pour rendre le temps implicite. La formulation combine l'équation de la chaleur à la condition de Stefan et élimine la variable τ pour obtenir l'équation suivante

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} = -Ste \left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\Delta} \frac{\partial \theta}{\partial \Delta}$$

b. Modèle dans un domaine fixe

Un autre modèle mathématique est développé par Landau [14] à partir de l'équation de diffusion (1.6) et des conditions initiales et aux limites associées (1.7-10). Sa formulation repose sur la technique d'immobilisation de la frontière solide/liquide à l'aide d'un changement de variable adéquat. En posant

$$\xi = \frac{x}{\delta(t)} = \frac{\eta}{\Delta(\tau)} \quad (2.28)$$

Landau transforme le domaine physique déformable $x \in [0, \delta(t)]$ en un domaine de calcul fixe, $\xi \in [0, 1]$. Ainsi, le front de changement de phase reste, à tout instant, lié à la frontière fixe $\xi = 1$. La variable ξ est désignée depuis par *variable de Landau*.

Dans le nouveau système de coordonnées (ξ, τ) , le modèle mathématique décrit par les équations (1.6-10) devient pour $\tau > 0$;

$$\Delta^2 \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\xi}{2} \frac{d\Delta^2}{d\tau} \frac{\partial \theta}{\partial \xi}; \quad 0 < \xi < 1 \quad (2.29)$$

En $\xi = 1$, l'équation de la chaleur doit vérifier les conditions suivantes :

$$\theta(\xi = 1, \tau) = 0 \quad (2.30)$$

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} = -\frac{1}{2Ste} \frac{d\Delta^2}{d\tau} \quad (2.31)$$

La Formulation de Landau permet de transformer le domaine de calcul déformable, dont la position et la forme d'une frontière sont des inconnues a priori, en un domaine défini. Elle introduit toutefois, une complexité au niveau de l'équation de la chaleur (éq.2.29) dont la nonlinéarité devient plus explicite.

2.4.3 Nombre de Stefan, Ste

L'adimensionnement des équations gouvernant la diffusion de la chaleur et le taux de solidification fait apparaître un nombre sans dimensions. Désigné dans la littérature par Ste et appelé *nombre de Stefan*, il représente l'inverse de la chaleur latente adimensionnelle¹. Son expression est donnée par la relation :

$$Ste = \frac{\rho c (T_m - T_r)}{\rho L} \quad (2.32)$$

Il est caractéristique du phénomène de changement de phase et représente le rapport de deux quantités de chaleur. Celle nécessaire au refroidissement de la couche solide

¹Certains auteurs travaillent avec les paramètres ϵ où $\beta = Ste^{-1}$ qui représentent la chaleur latente adimensionnelle au lieu du nombre de Stefan, Ste

de sa température de solidification à la température de référence, T_r , d'une part et celle libérée par la transformation d'état liquide-solide. On constate que la cinétique de déplacement du front de solidification, ou simplement le taux de solidification, est directement proportionnelle à ce nombre.

Il convient de noter que l'ordre de grandeur du nombre de Stefan pour la plupart des matériaux fusibles usuels dépasse rarement l'unité. A titre d'exemples, les rapports $\frac{Ste}{(T_m - T_r)}$ de l'eau, de la parafine commerciale et du cuivre sont respectivement de $0.63 \cdot 10^{-2}$, $0.4 \cdot 10^{-2}$ et $0.17 \cdot 10^{-2}$.

2.5 Conclusion

Le problème de conduction avec solidification ou fusion est gouverné par un seul paramètre adimensionnel. C'est le nombre de Stefan caractérisant le rapport de la chaleur sensible que peut stocker le matériau à la chaleur latente associée au changement de phase. Cependant, le saut du flux au niveau de l'interface solide/liquide et la mobilité de ce dernier font que la recherche de solutions explicites, même dans des modèles simplifiés, constitue une tâche délicate. Cette difficulté a motivé le développement de plusieurs modélisations afin de cerner celle permettant d'aboutir à la solution.

Chapitre 3

Méthodes Numériques Explicites

3.1 Introduction

Ce chapitre concerne les techniques numériques explicites qui constituent une partie des méthodes numériques appliquées au problème. Ces dernières sont tellement nombreuses et variées que la littérature ne s'est pas encore accordée sur une classification donnée. Pour notre part, nous les distinguerons, selon la formulation des équations, en deux grandes classes.

La première concerne *les méthodes implicites* ou *méthodes à une phase* dont lesquelles la solution ne nécessite pas la connaissance de la position de la frontière solide/liquide. Celle-ci peut être déduite à partir des distributions de température ou d'enthalpie par des techniques d'interpolation. Par contre dans la seconde classe, l'interface entre les deux phases constitue une partie indispensable de la solution et doit être localisée à chaque pas de temps. Il s'agit des *méthodes explicites* ou *méthodes à deux phases*.

L'objet du présent travail est de développer une approche analytique de suivi de l'interface pour un problème de changement de phase isotherme. Par conséquent, nous nous intéresserons, dans ce chapitre, qu'à la seconde classe de méthodes numériques que nous catégoriserons en trois types : *les méthodes à maillage fixe*, celles à *maillage variable* et *la méthode de migration d'isotherme*. Le lecteur peut se référer à la revue bibliographique de Voller et col. [66] sur les méthodes implicites qui traitent de la conduction pure et à celle de Samarski et col. [69] incluant les études qui tiennent compte du couplage conduction/convection.

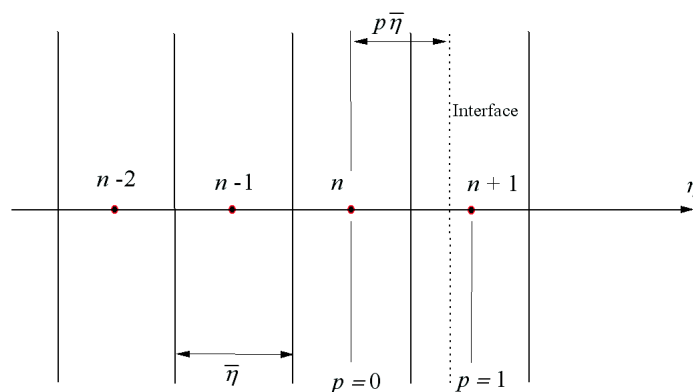
3.2 Méthodes à maillage fixe

Le principe des méthodes à maillage fixe est introduit par Crank [70] et est revu depuis par Murray et Landis [71] et récemment par Verma et col. [60]. La discrétisation du domaine espace-temps repose sur un grillage fixe où la frontière liquide/solide se déplace. En utilisant les formules d'interpolation au voisinage de la zone de changement de phase, des équations sont établies pour suivre le mouvement de l'interface entre les nœuds du maillage.

3.2.1 Modèle de Crank

La méthode à maillage fixe développée par Crank [70] consiste à subdiviser le domaine en régions d'égale épaisseur $\bar{\eta}$ et à suivre l'évolution des températures nodales et de la position de l'interface par pas de temps régulier $\bar{\tau}$. Cette dernière est localisée, à chaque instant, par rapport à ses deux nœuds voisins n et $(n + 1)$ à travers un paramètre p tel que $\Delta(\tau) = (n - 1 + p)\bar{\eta}$ où $0 \leq p \leq 1$ (FIG. 3.1). Les valeurs particulières $p = 0$ et $p = 1$ correspondent aux positions des nœuds n et $(n + 1)$.

FIG. 3.1 – Localisation de l'interface dans le domaine discrétisé selon le modèle de Crank.



Désignons par θ_i^j la température, à l'instant $\tau^j = j\bar{\tau}$, du i^{ieme} nœud placé en $\eta_i = (i - 1)\bar{\eta}$, par Δ^j la position de l'interface et par p^j la valeur du paramètre p à cet instant. En dehors de la zone de changement de phase, l'équation de la chaleur peut être discrétisée à l'aide d'un schéma aux différences classique. Soit en considérant le schéma explicite

Pour $\eta \leq \delta(\tau)$

$$\theta_i^{j+1} = r\theta_{i-1}^j + (1 - 2r)\theta_i^j + r\theta_{i+1}^j; \quad i = 1, 2, \dots, n - 1 \quad (3.1)$$

où $r = \frac{\bar{\tau}}{(\bar{\eta})^2}$.

Dans la zone de changement de phase, cette discrétisation peut s'avérer loin de la réalité physique à cause de la discontinuité de la distribution de température, particulièrement quand la chaleur latente est importante. Pour déterminer la température du $n^{ième}$ nœud, le terme du membre de droite de l'équation de la chaleur est approché à l'aide de la formule d'interpolation de Lagrange à trois points (Annexe C2). En considérant les nœuds $(n - 1)$, n et la position de l'interface comme les points d'interpolation, l'équation suivante est obtenue au voisinage du front de solidification

$$\theta_n^{j+1} = \theta_n^j + 2r \left(\frac{1}{1 + p^j} \theta_{n-1}^j - \frac{1}{p^j} \theta_n^j + \frac{1}{p^j(1 + p^j)} \theta_m \right); \quad (3.2)$$

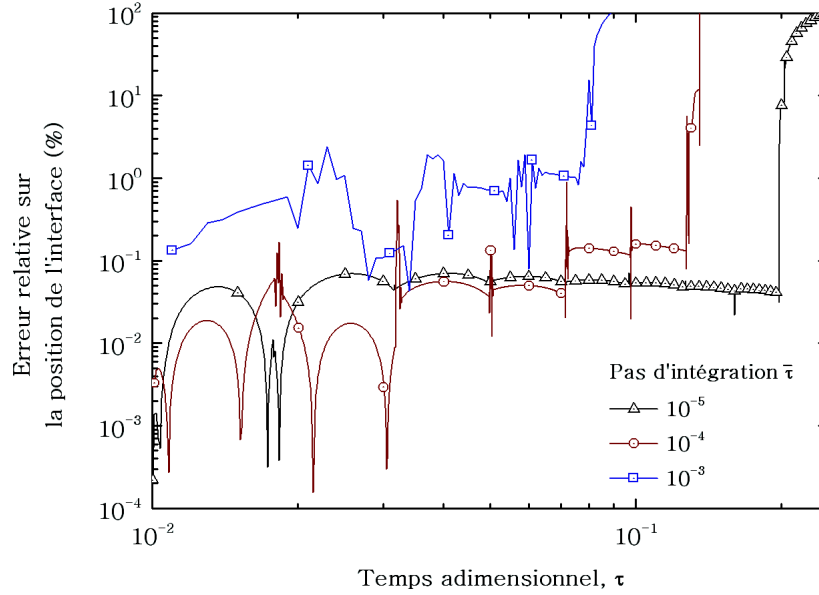
La variation du paramètre p est obtenue à partir de la discrétisation de l'équation de Stefan, qui est effectuée en considérant également la formule d'interpolation à trois points de Lagrange pour remplacer le flux à l'interface. Soit :

$$p^{j+1} = p^j - rSte \left(\frac{p^j}{1 + p^j} \theta_{n-1}^j - \frac{1 + p^j}{p^j} \theta_n^j + \frac{1 + 2p^j}{p^j(1 + p^j)} \theta_m \right); \quad (3.3)$$

La procédure de calcul est très simple et directe. A partir des valeurs connues des températures nodales et du paramètre p à l'instant τ^j , on détermine les valeurs des températures θ_i^{j+1} ($i = 1, 2, \dots, n$) à l'aide de l'équation (3.1) et celles de θ_n^{j+1} et p^{j+1} à partir des équations (3.2) et (3.3) respectivement. La suite des calculs dépend de la valeur de p^{j+1} . Si la nouvelle valeur du paramètre p est toujours inférieure à l'unité alors nous utilisons les valeurs obtenues à l'instant τ^{j+1} pour déterminer les valeurs des températures et de p à l'instant τ^{j+1} . Si elle est plus grande que 1 alors on augmente n et on diminue p d'une unité et on reprend la procédure. La température du nouveau nœud n , θ_n^{j+1} , est déduite d'une interpolation de Lagrange à trois points, les nœuds $n - 2$, $n - 1$ et la position de l'interface.

La procédure permet de suivre le mouvement de l'interface même à l'intérieur d'une maille et son extension à un problème de Stefan à deux phases est directe. Cependant, le schéma est instable, non seulement du fait de la nature explicite du schéma numérique qu'on peut éviter avec le choix d'un pas d'intégration adéquat, mais surtout à cause de la division par p qui passe par des valeurs très petites (même non nulles) dans les équations (3.2,3) (FIG. 3.2).

FIG. 3.2 – Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par la méthode numérique de Crank.



3.2.2 Modèle de Murray et Landis

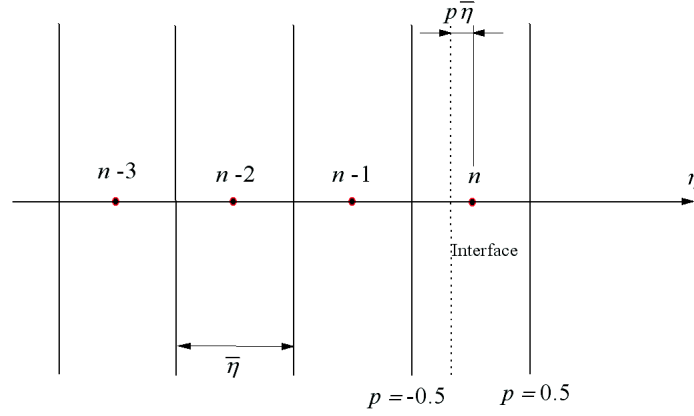
La méthode numérique la plus populaire (citée), construite sur la base d'un maillage fixe, est sans doute celle développée par Murray et Landis [71]. Elle est basée sur une amélioration de la méthode de Crank où la modification concerne la solution au voisinage du front de changement de phase. Les auteurs proposent de suivre la trace de ce dernier, non pas entre deux noeuds mais dans une maille (FIG. 3.3). De plus, ils proposent d'affecter une température fictive au noeud correspondant et dont la valeur est déduite de celles des noeuds voisins, incluant la position de l'interface dans la température est connue.

Désignons par n le noeud de la maille contenant l'interface à l'instant donnée $\tau_j = j\bar{\tau}$. La position de celle-ci est donnée par $\Delta(\tau) = (n - 1 + p)\bar{\eta}$ où le paramètre p est défini par $-0.5 \leq p \leq 0.5$. La première maille est d'épaisseur $\frac{\bar{\eta}}{2}$ localisant ainsi le premier noeud sur la frontière $\eta = 0$. En considérant les noeuds $(n - 2)$, $(n - 1)$ et la position de l'interface comme points d'interpolation, la procédure d'interpolation de Lagrange à trois points permet d'écrire

$$\theta_n^j = \frac{2}{(1 + p^j)(2 + p^j)}\theta_m - \frac{p^j}{(2 + p^j)}\theta_{n-2}^j + \frac{2p^j}{(1 + p^j)}\theta_{n-1}^j \quad (3.4)$$

Enfin, la discrétisation de l'équation de Stefan permet de fournir une relation ex-

FIG. 3.3 – Localisation de l'interface dans le domaine discrétisé selon le modèle de Murray et Landis.



plicite pour la détermination du paramètre p . Elle est obtenue en considérant le développement de Taylor limité aux deux premiers termes pour le flux. Soit :

$$p^{j+1} = p^j - \frac{rSte}{2} \left((3 + 2p^j)\theta_n^{j+1} - 4(1 + p^j)\theta_{n-1}^{j+1} + (1 + 2p^j)\theta_{n-2}^{j+1} \right) \quad (3.5)$$

Connaissant les températures nodales à l'instant τ^j , la procédure de calcul consiste à :

- i*) Interpoler la température, θ_n^j , du n^{ieme} noeud à l'aide de l'équation (3.4).
- ii*) Calculer les températures nodales θ_i^j pour $i = 1, 2, \dots, n - 1$, en résolvant le système d'équations algébriques (3.1) en tenant compte de la condition à la frontière d'échange.
- iii*) Evaluer le paramètre p^{j+1} à partir de l'équation de Stefan discrétisée (3.5) et déduire ainsi la nouvelle position de l'interface, $\Delta(\tau^{j+1})$.
- iv*) Si la valeur de $p^{j+1} \geq 0.5$, le front de changement de phase est localisé dans la maille suivante. La valeur de n est augmentée d'une unité et le paramètre p^{j+1} est diminué d'une unité. La température θ_n^{j+1} du nouveau noeud est déterminée à partir de l'équation (3.4). Dans le cas contraire, $-0.5 < p^{j+1} < 0.5$, on conserve la valeur de n .
- v*) A partir des valeurs θ_i^{j+1} , $i = 1, 2, \dots, (n - 1)$ et de p^{j+1} , calculées, on reprend la procédure à partir de l'étape *i*.) pour calculer les valeurs des températures nodales θ_i^{j+2} pour $i = 1, 2, \dots, n$ à l'instant $\tau^{j+2} = (j + 2)\bar{\tau}$.

La procédure permet effectivement de disposer d'équations évaluant le paramètre p et la température du noeud voisin de l'interface θ_n^j sans les termes source d'instabilités (éqs.3.4,5). Les résultats numériques montrent que même si des instabilités subsistent localement, elles n'influencent pas globalement, l'erreur de la méthode (FIG. 3.4). Ces instabilités sont dues principalement à la procédure d'interpolation utilisée pour déterminer p^{j+1} et θ_n^j . La figure (3.5) montre l'évolution, dans le temps, du paramètre p et de l'erreur relative sur la détermination de l'interface dans deux mailles voisines. On peut remarquer que ces instabilités correspondent aux valeurs négatives de p , la procédure d'interpolation, qui est dans ce cas une extrapolation, n'est pas strictement valable puisque la fonction interpolée (la température) n'est pas continue dans le domaine considéré à cause de la chaleur latente générée à l'interface. Enfin, notons que l'extension de la méthode à un problème de Stefan à deux phases introduit une deuxième température fictive du côté de la phase solide compliquant ainsi la procédure. Dans ce cas, à chaque pas d'intégration, nous devons interpoler une température fictive et extrapoler l'autre rendant les instabilités résiduelles permanentes.

FIG. 3.4 – Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par la méthode numérique de Murray et Landis.

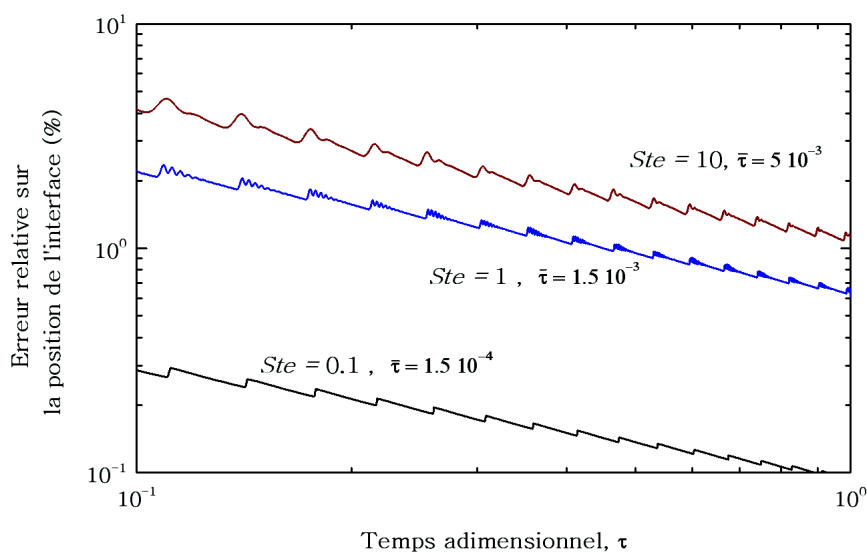
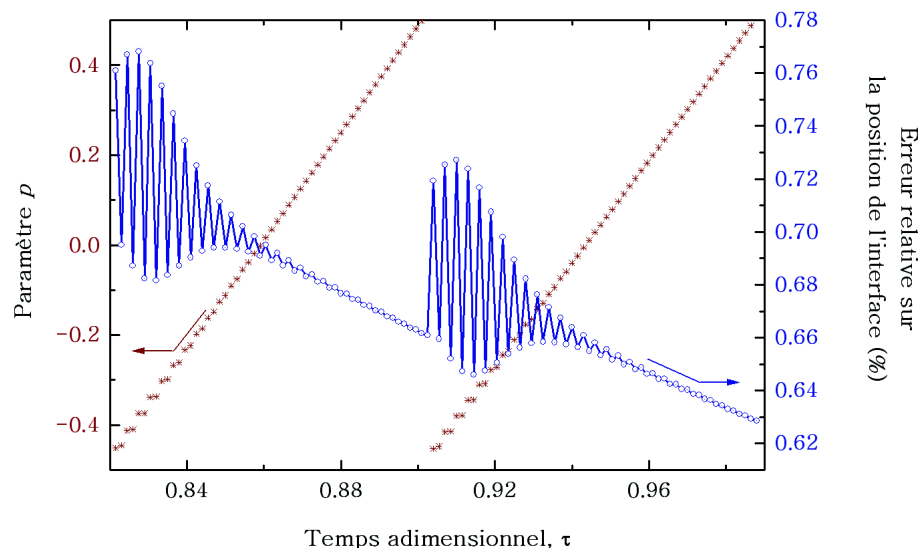


FIG. 3.5 – Evolution de l'erreur relative et du paramètre de localisation de l'interface, p , dans deux mailles voisines selon la procédure de Murray et Landis pour $Ste = 1$ et $\bar{\tau} = 0,0015$.



3.2.3 Modèle de Verma et col.

Récemment, Verma et col. [60] ont montré que la technique développée par Crank peut être améliorée sans avoir recours à l'introduction d'une température fictive. Ils reconsidèrent la méthode en modifiant le traitement de l'équation de la chaleur au voisinage de l'interface tout en tenant compte de la procédure de localisation de l'interface de Murray et Landis. Ils suivent le mouvement de l'interface dans la maille centrée en n et discrétisent, dans cette région, l'équation de la chaleur à l'aide de la méthode des volumes finis [72]. Le volume de contrôle est représenté par la maille centrée au noeud $(n - 1)$. Le flux de chaleur à la face gauche est calculé à l'aide des températures des noeuds voisins $(n - 2)$ et $(n - 1)$. Le flux qui traverse la face de droite est déduit des températures de ces deux derniers et de celle de l'interface θ_m en utilisant l'interpolation de Lagrange à trois points. La procédure fournit l'équation suivante :

$$\theta_{n-1}^{j+1} = \theta_{n-1}^j + 2r \left(\frac{1}{2 + p^j} \theta_{n-2}^j - \frac{1}{1 + p^j} \theta_{n-1}^j + \frac{1}{(1 + p^j)(2 + p^j)} \theta_m \right); \quad (3.6)$$

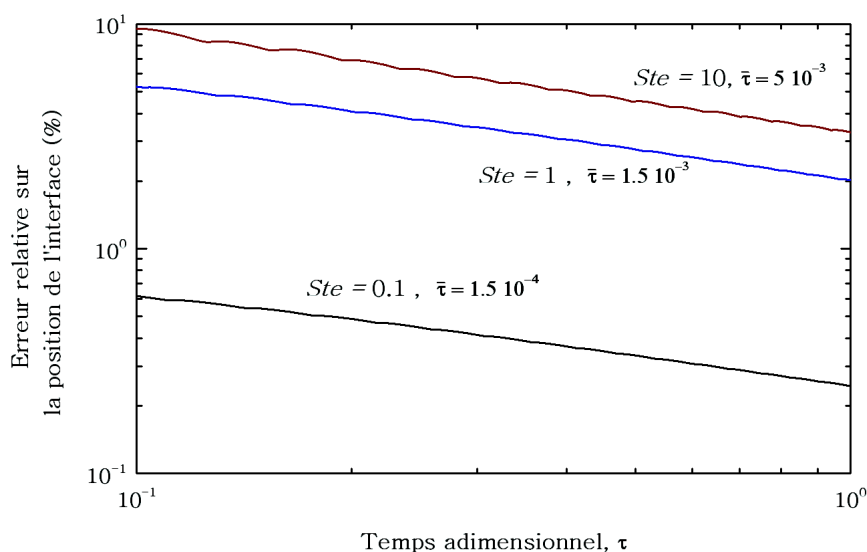
La procédure d'interpolation à trois points est utilisée une seconde fois pour évaluer la tangente à la distribution de température au niveau de l'interface. Le résultat permet

d'écrire l'équation de Stefan sous la forme discrétisée suivante :

$$p^{j+1} = p^j - rSte \left(\frac{1 + p^j}{2 + p^j} \theta_{n-2}^{j+1} - \frac{2 + p^j}{1 + p^j} \theta_{n-1}^{j+1} + \frac{3 + 2p^j}{(1 + p^j)(2 + p^j)} \theta_m \right); \quad (3.7)$$

Ainsi l'interface constitue la frontière du domaine d'interpolation permettant une application correcte de la formule d'interpolation. La procédure d'intégration est identique à celle suivie dans le modèle précédant. La comparaison de ces deux dernières méthodes montre que la procédure due à Verma et col. améliore effectivement la stabilité (FIGS. 3.5,3.7) de la méthode mais perd en précision (FIGS. 3.4,3.6) par rapport à celle développée par Murray et Landis.

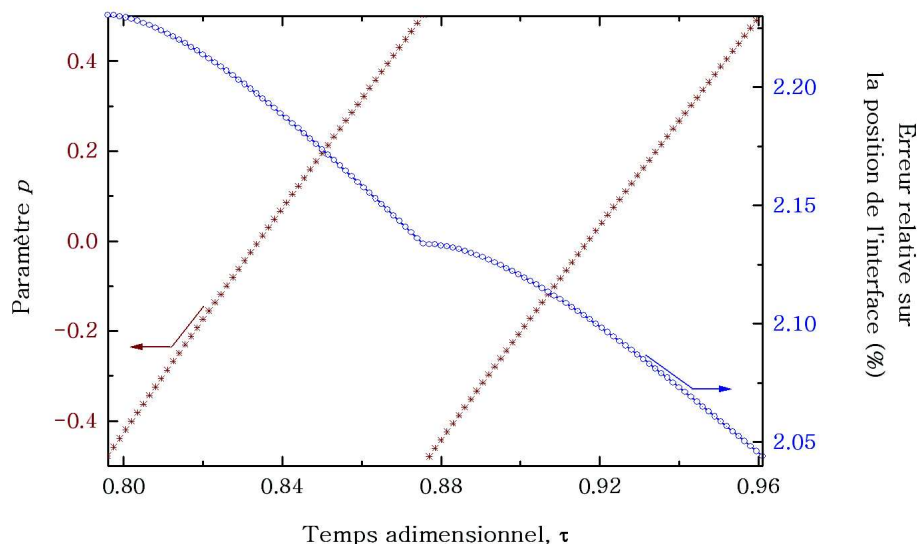
FIG. 3.6 – Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par la méthode numérique de Verma et col.[60]



3.2.4 Remarques

Les résultats numériques ont été obtenus en utilisant un pas d'intégration légèrement inférieur au pas donné par le critère de stabilité du schéma numérique explicite ($\bar{\tau} = \frac{\bar{\eta}^2}{2}$). Les calculs ont montré que la considération de ce dernier rend la méthode instable à cause de l'irrégularité du pas de discrétisation au voisinage de l'interface. FIG.3.4 et FIG.3.6 montrent que, globalement, l'erreur relative des deux procédures est d'autant plus faible que la quantité de chaleur latente libérée est faible. Les méthodes

FIG. 3.7 – Evolution de l'erreur relative et du paramètre de localisation de l'interface, p , dans deux mailles voisines selon la procédure de Verma et col. pour $Ste = 1$ et $\bar{\tau} = 0,0015$



sont d'autant plus précises que le nombre de Stefan est faible et d'un autre côté, pour un nombre de Stefan donné, la précision augmente quand le taux de changement de phase diminue.

3.3 Méthodes à maillage variable

Afin d'éviter la perte de précision et les complications introduites par l'irrégularité du maillage au voisinage immédiat du front de solidification (ou fusion), il est associé un maillage variable aux méthodes numériques. Plusieurs procédures, permettant de garder le maillage spatial du domaine régulier, sont mises en œuvre, en adaptant soit le pas d'intégration ou le pas de discrétisation spatial au mouvement de l'interface.

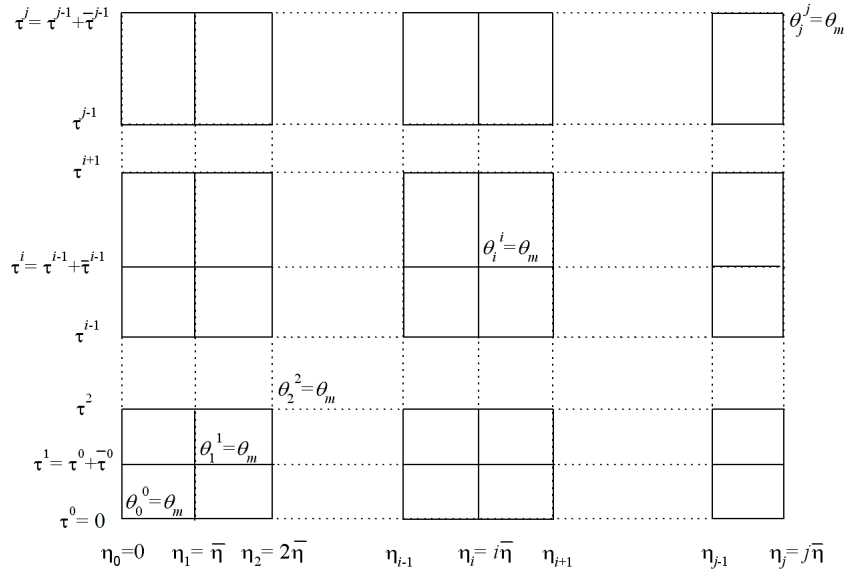
Les différentes méthodes développées dans la littérature sont détaillées dans ce qui suit. Un intérêt particulier est réservé aux techniques variant le pas de discrétisation spatial qui sont plus économiques. Les méthodes utilisant un pas de temps variable requièrent des procédures itératives dans la quête du temps nécessaire à l'interface pour parcourir la distance inter-nodale.

3.3.1 Pas de temps variable

La méthode consiste à fixer le pas d'espace $\bar{\eta}$ et d'adapter le pas de temps $\bar{\tau}$ au mouvement de l'interface solide/liquide. Ce dernier est choisi, à chaque étape, de telle façon à ce que le front de solidification parcourt la distance séparant deux nœuds consécutifs.

Le domaine (η, τ) est maillé tel que le représente la figure 3.8. Tout point (η_i, τ^j) est donné par ses coordonnées $(i\bar{\eta}, \sum_{l=0}^{j-1} \bar{\tau}^l)$ où $\bar{\tau}^j$ est le temps que met l'interface à passer du nœud $j\bar{\eta}$ au nœud suivant $(j+1)\bar{\eta}$. Connaissant les températures nodales θ_i^j ($i = 0, 1, \dots, j$) et la position de l'interface $\Delta^j = j\bar{\eta}$ à l'instant τ^j , on peut déduire les nouvelles valeurs de celles-ci à l'instant $\tau^{j+1} = \tau^j + \bar{\tau}^j$ en utilisant une procédure itérative de prédiction-corrrection.

FIG. 3.8 – Discrétisation du domaine η - τ avec un pas de temps dépendant de la position de l'interface.



L'équation de la chaleur est approchée par le système d'équations discrétisées suivant :

$$-r^{(k)}\theta_{i-1}^{j+1(k)} + (1 + 2r^{(k)})\theta_i^{j+1(k)} - r^{(k)}\theta_{i+1}^{j+1(k)} = \theta_i^j; \quad i = 1, 2, \dots, j \quad (3.8)$$

où $r^{(k)} = \frac{\bar{\tau}^{j(k)}}{\bar{\eta}^2}$ et en vertu des conditions aux limites, nous avons $\theta_0^{j+1} = \theta_0$ et $\theta_{j+1}^{j+1} = \theta_m = 0$. L'exposant k désigne l'indice d'itération pour la procédure de prédiction-

correction. Il faut noter que le fait que le pas de temps soit variable et inconnu impose l'utilisation d'un schéma aux différences implicite donc inconditionnellement stable.

a. Modèle de Douglas et Callie

Douglas et Callie [73], à qui nous devons le développement de cette méthode, ont étudié le cas de la fusion d'un solide, initialement à son point de changement de phase, T_m , initiée par un flux imposé à la paroi $\eta = 0$. La procédure de correction du pas de temps est obtenue à partir de l'équation de transfert macroscopique de chaleur. La méthode de Goodman [11] a été appliquée à cet effet.

$$\int_0^{\Delta^{j+1}} \theta(\eta, \tau) d\eta = -\frac{1}{Ste} \Delta^{j+1} - \int_0^{\tau^{j+1}} \left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} d\tau \quad (3.9)$$

L'étude de Douglas et Callie s'est limitée au cas particulier où aussi bien le flux que le nombre de Stefan sont fixés à la valeur -1 . La constance du flux à la surface d'échange simplifie considérablement l'évaluation de l'intégrale du second terme du membre de droite de l'équation précédente qui peut s'écrire dans ce cas comme :

$$\bar{\tau}^{j(k+1)} = -\tau^j + \bar{\eta} \left[\sum_{l=1}^j \theta_l^{j+1(k)} - (j+1) \right] \quad (3.10)$$

Les auteurs n'ont pas examiné l'application de cette procédure de correction du pas dans le cas d'autres conditions à la frontière d'échange. Pourtant, son extension au cas plus général est immédiate si nous faisons appel à la formule des trapèzes pour évaluer le terme introduisant l'intégrale du flux à la paroi.

Dans ce qui suit, nous développons cette procédure, mais sans faire de calcul, pour inclure le nombre de Stefan d'une part et d'autre part une condition à la paroi plus générale comme la condition mixte, considérée par Goodling et Khader [74]. Ces derniers, en traitant le problème par une autre procédure (§3.3.1.b ci-dessous), imposent un flux à la paroi variant suivant la loi $a\theta(0, \tau) + b$. Compte tenu de cette expression du flux et de la formule des trapèzes, nous pouvons écrire l'équation de l'intégrale de l'énergie de Goodman (éq.3.9) sous la forme :

$$\bar{\tau}^{j(k+1)} = -\tau^j - \frac{\bar{\eta}}{\frac{a}{2} (\theta_0^{j+1(k)} + \theta_0^0) + b} \left(\frac{j+1}{Ste} + \sum_{l=1}^j \theta_l^{j+1(k)} \right) \quad (3.11)$$

qui correspond bien à l'équation proposée par Douglas et Callie (éq.3.10) si les paramètres Ste , a et b prennent les valeurs -1 , 0 et -1 respectivement.

La solution est obtenue selon la procédure suivante :

- i*) Choisir la valeur de $\bar{\tau}^{j(0)}$ en considérant, par exemple, la valeur du pas précédent $\bar{\tau}^{j-1}$

- ii) Résoudre le système d'équations algébriques (3.8) pour déterminer les températures nodales $\theta_i^{j+1(0)}$ pour $i = 1, 2, \dots, j$ en utilisant l'algorithme de Tomas par exemple.
- iii) Utiliser ces valeurs dans l'équation (3.11) pour corriger le pas de temps. On obtient ainsi une nouvelle valeur $\bar{\tau}^{j(1)}$.
- iv) Evaluer la différence entre les valeurs prédite $\bar{\tau}^{j(0)}$ et corrigée $\bar{\tau}^{j(1)}$ du pas. Si celle-ci est jugée importante, on reprend la procédure à partir de l'étape i) en considérant $\bar{\tau}^{j(1)}$ comme pas de temps pour calculer les températures nodales $\theta_i^{j+1(1)}$ pour $i = 1, 2, \dots, j$ et corriger le pas de temps $\bar{\tau}^{j(2)}$.

La procédure itérative continue jusqu'à convergence de la solution. Dans ce cas, on augmente d'une unité la valeur de l'indice j et on reprend les calculs pour déterminer le temps $\bar{\tau}^{j+1}$ que mettra le front de solidification pour arriver au nœud $(j+1)\bar{\eta}$. Ainsi le mouvement de l'interface sera suivi de nœud en nœud.

b. Modèle de Goodling et Khader

Goodling et Khader [74] utilisent la méthode pour étudier le cas du problème de Stefan avec une condition mixte à la surface d'échange. La mise en œuvre de la procédure itérative de correction du pas de temps est sensiblement différente de celle de Douglas et Callie. Ils proposent de d'associer l'équation de Stefan à la condition à la paroi fixe au lieu de l'équation de l'intégrale de l'énergie de Goodman. Les auteurs se donne une valeur arbitraire $\theta_j^{j+1(k)}$ pour la température de l'avant dernier nœud et utilisent l'équation de Stefan (éq.2.11) pour prédire la valeur du pas de temps

$$\bar{\tau}^{j(k)} = \frac{1}{Ste} \frac{\bar{\eta}^2}{\theta_j^{j+1(k)} - \theta_m} \quad (3.12)$$

Le système d'équations algébriques (3.8) est résolu à l'aide d'une méthode itérative pour déterminer les températures nodales $\theta_i^{j+1(k)}$ ($i = 1, 2, \dots, j$). La condition à la paroi fixe est utilisée pour tester la précision des résultats, soit :

$$\theta_1^{j+1(k)} - (1 + a\bar{\eta})\theta_0^{j+1(k)} = b\bar{\eta} \quad (3.13)$$

où a et b sont des constantes données avec la condition mixte à la paroi $\eta = 0$. Si cette dernière n'est pas satisfaite à la valeur près de l'erreur tolérée, ils choisissent une autre valeur pour la température arbitraire $\theta_j^{j+1(k+1)}$ et ils reprennent les calculs. Notons que la procédure du choix de cette température n'a pas été précisée dans les auteurs.

c. Modèle de Gupta et Kumar

Gupta et Kumar [20] ont repris la méthode développée précédemment en apportant quelques modifications. Au début, ils ont considéré la méthode telle qu'elle est développée par Goodling et Khader mais en précisant la procédure du choix de la température $\theta_j^{j+1(k)}$. Ils proposent de lui affecter la température du nœud qui se trouve juste à l'amont calculée à l'instant précédent, c'est à dire $\theta_{j-1}^{j(k)}$. Mais ils constatent que la procédure itérative nécessite beaucoup d'itérations et qu'elle devient instable par moment, même pour un critère de précision peu sévère. De plus, l'erreur au niveau du test de convergence (éq.3.13) présente un comportement irrégulier. Ils proposent de modifier la procédure itérative en forçant la solution à satisfaire la condition, non pas à la paroi, mais à l'interface solide/liquide. L'équation (3.12), utilisée pour corriger le pas de temps et aussi tester la convergence de la solution, est modifiée comme suit :

$$\bar{\tau}^{j(k+1)} = \frac{1}{Ste} \frac{\bar{\eta}^2}{\theta_j^{j+1(k)} - \theta_m} \quad (3.14)$$

D'autre part, pour le calcul des températures nodales, ils proposent la résolution simultanée des équations algébriques par la méthode de Gauss au lieu de la procédure itérative, source d'instabilité. La procédure utilisée consiste à affecter la valeur $\bar{\tau}^{j-1}$ au pas de temps $\bar{\tau}^j$, au début du processus de prédiction-corrrections, et à le corriger à l'aide de l'équation (3.14). La température $\theta_j^{j+1(k)}$ est affectée de la valeur donnée par la solution du système d'équations (3.8).

Le tableau 3.1. montre que pour une précision donnée des résultats, la technique numérique de Gupta et Kumar permet des vitesses de convergence plus grandes que les deux autres. La méthode est encore assez coûteuse, mais elle évite le problème de perte précision à cause de l'irrégularité du maillage.

3.3.2 Pas d'espace variable

Deux méthodes numériques explicites adoptent la technique de variation de l'épaisseur spatiale des mailles en utilisant la position prédite de l'interface. Cette prédiction sur la position de la frontière solide/liquide permet d'éviter l'irrégularité du maillage dans la région de changement de phase et par conséquent la perte de précision signalée précédemment. Les deux méthodes considèrent les équations obtenues par la formulation explicite mais font appel aux modèles mathématiques différents, soit celui obtenu en considérant un domaine variable pour l'une ou un domaine fixe pour l'autre.

TAB. 3.1 – Résultats comparatifs de la vitesse de convergence des trois procédures de mise en oeuvre de la méthode à pas de temps variable. ($Ste = 1$ et $\bar{\eta} = 0.01$)

Position de l'interface, Δ	Temps nécessaire, $\bar{\tau}$, pour parcourir la distance $\bar{\eta}$		
	Douglas et Callie [73]	Goodling et Khader [74]	Gupta et Kumar [20]
0.1	0.0025 (2)	0.0025 (5)	0.0025 (2)
0.2	0.0038 (2)	0.0038 (6)	0.0038 (2)
0.3	0.0052 (3)	0.0052 (2)	0.0052 (2)
0.4	0.0065 (3)	0.0065 (2)	0.0065 (2)
0.5	0.0078 (3)	0.0078 (8)	0.0078 (2)
0.6	0.0091 (6)	0.0091 (9)	0.0091 (2)
0.7	0.0104 (2)	0.0104 (8)	0.0104 (2)
0.8	0.0117 (2)	0.0117 (9)	0.0117 (3)
0.9	0.0130 (5)	0.0130 (12)	0.0130 (3)
1.0	0.0142 (6)	0.0143 (14)	0.0143 (1)

a. Modèle dans un domaine variable

Murray et Landis [71] proposent de lier l'interface solide liquide au dernier nœud du maillage et de subdiviser le domaine en N régions d'égale épaisseur. Ainsi, le pas d'espace, défini par $\bar{\eta}(\tau) = \frac{\Delta(\tau)}{N}$, varie en fonction de la position de l'interface $\Delta(\tau)$ mais reste régulier (FIG. 3.9). Le pas de temps $\bar{\tau}$ est considéré fixe tout le long de l'intégration numérique.

Les auteurs considèrent l'équation de la chaleur en suivant le i ème nœud dans son mouvement. Soit, pour $2 \leq i \leq N - 1$ et $\tau > 0$:

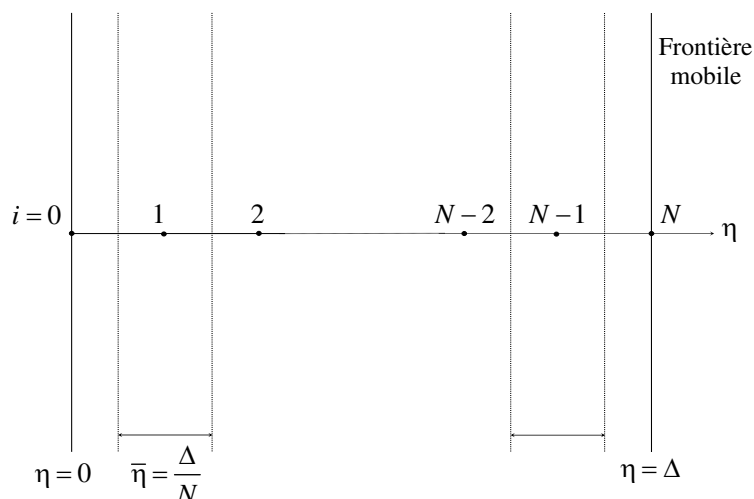
$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \right|_i = \frac{\eta_i}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_\tau + \left. \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} \right|_\tau \quad (3.15)$$

dont l'approximation aux différences finies explicites s'écrit

$$\theta_i^{j+1} = \theta_i^j + \frac{\bar{\tau}}{2\bar{\eta}^j} \frac{\eta_i^j}{\Delta^j} \frac{d\Delta}{d\tau} \Big|_i^j (\theta_{i+1}^j - \theta_{i-1}^j) + \frac{\bar{\tau}}{(\bar{\eta}^j)^2} (\theta_{i+1}^j - 2\theta_i^j + \theta_{i-1}^j) \quad (3.16)$$

où $\bar{\eta}^j = \frac{\Delta^j}{N}$ et $\eta_i^j = \frac{i\Delta^j}{N}$. La vitesse de l'interface à l'instant τ^j et sa position à l'instant τ^{j+1} sont déduites de l'équation de Stefan. En remplaçant le flux de chaleur à l'interface

FIG. 3.9 – Discrétisation du domaine physique avec fixation de l'interface à un nœud du maillage dans un domaine variable.



par une approximation aux différences à trois points décentrée à gauche tel que suggéré récemment par Kutluay et col. [56]

$$\left. \frac{d\Delta}{d\tau} \right|^j = \frac{\Delta^{j+1} - \Delta^j}{\bar{\tau}} = -\frac{Ste}{2\bar{\eta}^j} (3\theta_N^j - 4\theta_{N-1}^j + \theta_{N-2}^j) \quad (3.17)$$

θ_N^j est la température de l'interface solide/liquide ($\theta_N^j = 0$). La fermeture mathématique du problème est obtenue en vertu de la condition à la surface d'échange, $\eta = 0$, et des conditions initiales sur la distribution de température et la position de l'interface.

Connaissant les valeurs de θ_i^j , Δ^j et $\bar{\eta}^j$ à l'instant $\tau^j = j\bar{\tau}$, la mise en œuvre de la procédure de calcul consiste à :

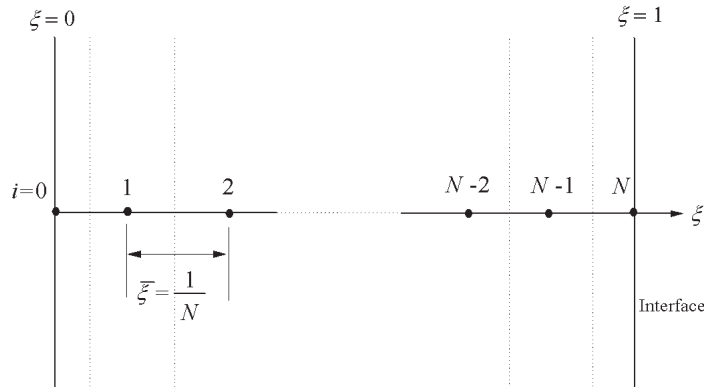
- i*) Calculer la valeur de la vitesse à cet instant à l'aide de l'équation (3.17).
- ii*) Evaluer les températures nodales θ_i^{j+1} pour $i = 2, 3, \dots, N-1$ à partir du système d'équations (3.16).
- iii*) Utiliser l'équation (3.17) pour évaluer la nouvelle position de l'interface Δ^{j+1} .
- iv*) Dédire le nouveau pas d'espace $\bar{\eta}^{j+1} = \frac{\Delta^{j+1}}{N}$, et à l'aide des températures nodales déterminées à l'étape *ii*) on reprend la procédure de l'étape *i*) pour calculer la nouvelle position de l'interface et les températures nodales à l'instant τ^{j+2} .

b. Modèle dans un domaine fixe

Comme nous l'avons vu au chapitre précédent (§2.4.2.b), il est aussi possible de fixer la frontière mobile en utilisant la modélisation mathématique de Landau [14] formulée dans un domaine fixe. Le premier modèle numérique construit sur la base des équations de Landau est du à Crank [70] qui le désigne par *méthode d'immobilisation de l'interface*. Récemment, Kutluay et Esen [57] l'ont appliquée au problème de Stefan avec flux exponentiel à la paroi d'échange, $\eta = 0$, mais dans le cas particulier du nombre de Stefan égal à l'unité.

La méthode numérique consiste à subdiviser le domaine $0 \leq \xi \leq 1$ en N mailles telles que les mailles frontalières présentent une épaisseur moitié des mailles internes. Cette subdivision engendre ainsi N nœuds équidistants et dont les extrêmes sont localisés sur les frontières du domaine (FIG. 3.10).

FIG. 3.10 – Discrétisation du domaine physique avec fixation de l'interface à un nœud du maillage dans un domaine fixe.



Le schéma numérique aux différences finies explicite de l'équation de la chaleur est donné par :

$$\theta_i^{j+1} = \theta_i^j + \frac{\bar{\tau}}{2\bar{\xi}} \frac{\xi_i}{\Delta^j} \frac{d\Delta}{d\tau} \Big|_j (\theta_{i+1}^j - \theta_{i-1}^j) + \frac{\bar{\tau}}{\bar{\xi}^2} \frac{1}{(\Delta^j)^2} (\theta_{i+1}^j - 2\theta_i^j + \theta_{i-1}^j) \quad (3.18)$$

où nous avons désigné par $\xi_i = i\bar{\xi}$ la position du i ème nœud ($i = 0, 1, \dots, N$), par $\theta_i^j = \theta(i\bar{\xi}, j\bar{\tau})$ sa température à l'instant $\tau^j = j\bar{\tau}$ où $j \geq 0$ et $\bar{\tau}$ le pas de temps et par Δ^j la position de l'interface solide/liquide à cet instant. Pour garder l'erreur du même ordre par rapport à $\bar{\tau}$ et $\bar{\xi}$ dans l'intégration de l'équation de Stefan, Kutluay et Esen

[57] utilise une discrétisation à trois points décentrée à gauche pour le flux de chaleur. Ainsi, la vitesse et la position de l'interface, aux instants τ^j et τ^{j+1} respectifs, sont déduites de l'équation suivante :

$$\left. \frac{d\Delta}{d\tau} \right|^j = \frac{\Delta^{j+1} - \Delta^j}{\bar{\tau}} = -\frac{Ste}{2\xi\Delta^j} (3\theta_N^j - 4\theta_{N-1}^j + \theta_{N-2}^j) \quad (3.19)$$

Les conditions aux frontières restent inchangées par rapport aux schéma précédent. C'est à dire, pour $j > 0$ nous avons $\theta_1^j = \theta_0$ et $\theta_N^j = \theta_m = 0$. A partir des valeurs à l'instant τ^j de la position et de la vitesse de l'interface d'une part et des températures nodales d'autre part, le calcul des ce variables à l'instant $\tau^{j+1} = \tau^j + \bar{\tau}$ suit la même procédure que précédemment (§3.3.2.a).

c. Discussion

Le principal inconvénient de ces deux schémas numériques est qu'ils requièrent une solution de départ qu'ils ne peuvent produire d'eux mêmes. Les solutions exactes des problèmes plus simplifiés sont généralement sollicitées à cet effet [59, 70, 71].

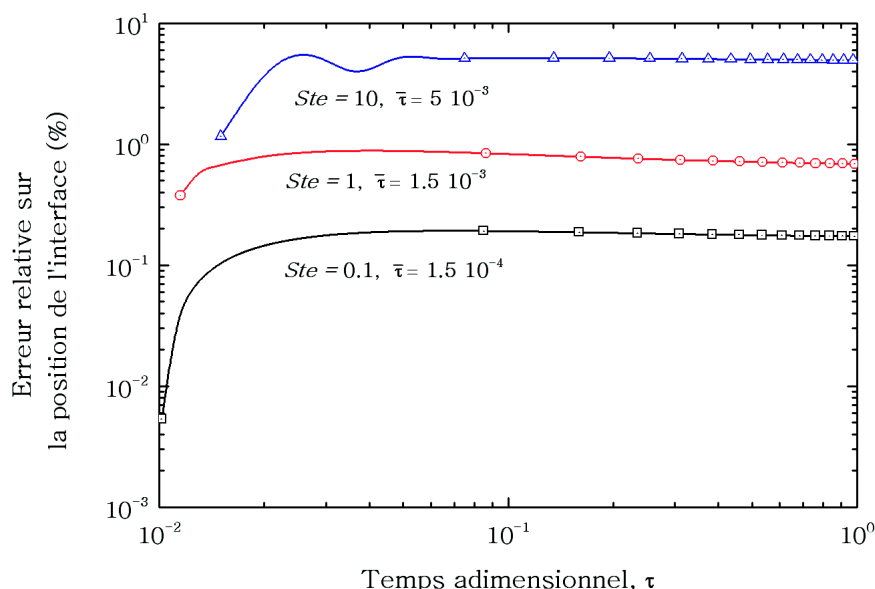
Les résultats de calculs, effectués dans le cadre de cette étude, montrent une concordance parfaite (FIG. 3.11) des solutions fournies par les deux modèles numériques. Ce qui est prévisible dès lors que les schémas obtenus constituent deux expressions différentes d'une solution unique (voir §3.4.2). En effet, la seconde méthode n'est qu'un cas particulier de la première. Cette dernière considère la formulation des équations en suivant un nœud quelconque dans son mouvement alors que dans celle de la première (méthode à domaine fixe), ce nœud correspond à celui qui est placé sur l'interface mobile.

Dans une étude récente¹[59], Kutluay a utilisé ces deux derniers modèles pour suivre le mouvement de l'interface dans un problème de Stefan à une phase avec présence de terme source, $f(\eta, \tau)$, dans l'équation de la chaleur (la valeur $f = 0$ correspond au problème classique de Stefan). L'auteur présente ses résultats numériques sous forme de tables et conclut que les deux méthodes convergent vers la solution exacte quand nous raffinons le maillage. D'après les valeurs tabulées par l'auteur, les résultats numériques obtenus sont différents et montrent clairement que la méthode utilisant le domaine variable prédit mieux la position de l'interface. Cet écart entre les deux solutions n'a suscité aucun commentaire de la part de l'auteur.

La section 3.4 reprend plus en détail les deux schémas numériques fournis par les deux modèles. Elle se propose de montrer, dans un premier temps, que les deux schémas sont équivalents et de chercher par la suite une procédure d'amélioration de la précision.

¹parue le 15 Septembre 2005

FIG. 3.11 – Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par les deux méthodes numériques variant le pas d'espace pour différents nombres de Stefan.



3.3.3 Méthode de migration d'isothermes

La méthode se propose de suivre les traces d'isothermes obtenues par la subdivision de l'écart de température défini par les températures des parois extérieures, θ_0 et θ_m . L'isotherme de changement de phase, que nous cherchons justement à localiser, fait partie de ces isothermes.

La technique est proposée, indépendamment, par Dix et Cizek [75] et Chernousko [76] et développée depuis par Crank [15] et Özis [77], Wood [78] et Kutluay et Esen [57]. Tout récemment, ces derniers [57] ont montré que la méthode, même si elle ne s'applique pas directement au problème de Stefan avec une condition à la paroi autre que du premier type, peut être adaptée et appliquée avec succès pour des problèmes avec des conditions mixtes.

La technique permute entre les variables dépendante et indépendante. Elle consiste à substituer la variable θ à la variable indépendante η et à chercher la solution $\eta(\theta, \tau)$ au lieu de $\theta(\eta, \tau)$. Le modèle mathématique est donné par la formulation du problème dans le nouveau repère (θ, τ) . Soit pour $\tau > 0$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \left(\frac{\partial \eta}{\partial \theta} \right)^{-2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial \theta^2}; \quad 0 \leq \theta \leq \theta_0(\tau) \quad (3.20)$$

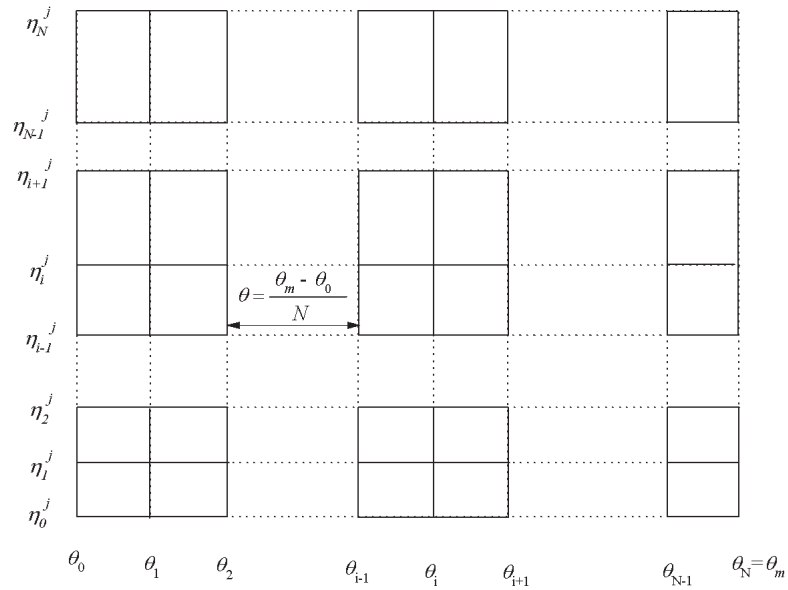
$$\eta = 0; \quad \theta = \theta_0(\tau) \quad (3.21)$$

$$\eta = \Delta(\tau); \quad \theta = 0 \quad (3.22)$$

$$\frac{d\Delta}{d\tau} = -Ste \left(\frac{\partial \eta}{\partial \theta} \right)_{\theta_m=0}^{-1}; \quad \theta = 0 \quad (3.23)$$

Désignons par η_i^j la position à l'instant $\tau^j = j\bar{\tau}$ de l'isotherme $\theta_i = i\bar{\theta}$ ($\bar{\theta} = \frac{\theta_N - \theta_0}{N}$ est le pas de discrétisation suivant θ). La position de l'interface, $\Delta(\tau^j)$, est donnée par la position η_N^j de l'isotherme de solidification $\theta_m = 0$ (FIG. 3.12).

FIG. 3.12 – Maillage du domaine (θ, τ) à l'instant τ^j par la méthode de migration d'isotherme.



Les représentations aux différences finies explicite de l'équation d'évolution des isothermes d'une part et de l'équation de Stefan d'autre part, sont données respectivement par les équations (3.27) et (3.28) suivantes :

$$\eta_i^{j+1} = \eta_i^j + 4\bar{\tau} \frac{\eta_{i+1}^j - 2\eta_i^j + \eta_{i-1}^j}{(\eta_{i+1}^j - \eta_{i-1}^j)^2} \quad (3.24)$$

$$\eta_N^{j+1} = \eta_N^j - 2Ste \frac{\bar{\theta}}{3\eta_N^j - 4\eta_{N-1}^j + \eta_{N-2}^j} \quad (3.25)$$

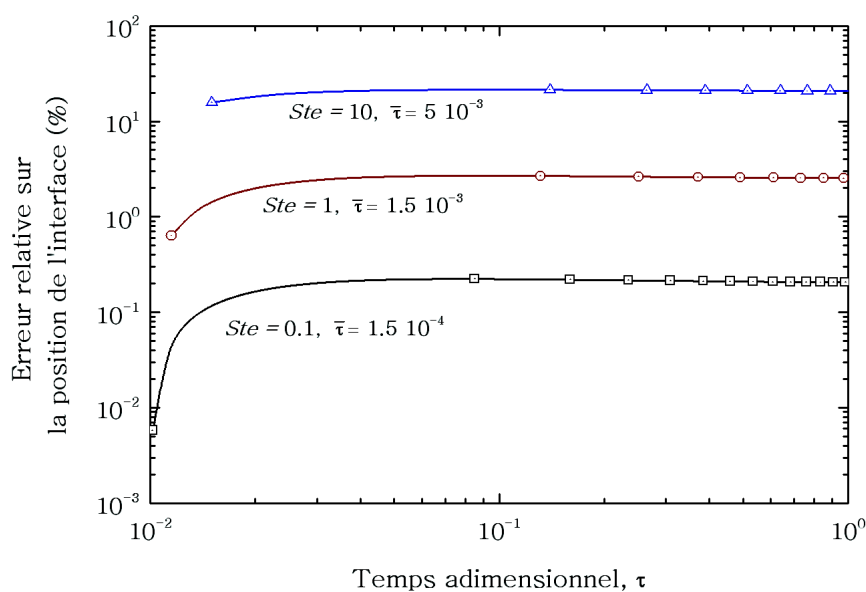
où η_N^{j+1} et η_N^j sont les positions de l'isotherme de changement d'état aux instants τ^{j+1} et τ^j . Elles correspondent donc aux positions de l'interface à ces instants, soient Δ^{j+1} et Δ^j .

Les conditions aux frontières du domaine sont données respectivement aux isothermes $\theta_0(\tau)$ et $\theta_m = 0$ par les relations suivantes :

$$\eta_0^j = 0; \quad j \geq 0 \quad (3.26)$$

$$\eta_N^j = \Delta(j\bar{\tau}); \quad j \geq 0 \quad (3.27)$$

FIG. 3.13 – Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par la méthode numérique de migration d'isothermes pour différentes valeurs du nombre de Stefan, Ste .



La stabilité du schéma numérique produit par la méthode est conditionnée. L'analyse de stabilité classique ne permet pas de déduire le critère à cause de la nonlinéarité de l'équation (3.24). Dix et Cizek [75] ont montré que la stabilité du schéma peut être assurée à travers le choix d'un pas de temps respectant la condition suivante

$$\bar{\tau} \leq \min_{1 \leq i \leq N-1} \frac{1}{8} \left(\eta_{i+1}^j - \eta_{i-1}^j \right)^2 \quad (3.28)$$

Les graphes (FIG. 3.13) donnant l'évolution de l'erreur relative sur la position de l'interface montrent que la méthode est 10 fois moins précise que la méthode d'immobilisation de l'interface.

3.4 Modification de la méthode à pas d'espace variable

3.4.1 Introduction

Les méthodes numériques explicites basées sur l'adaptation du pas d'espace au mouvement du front mobile sont non seulement les plus précises (TAB. 3.2) mais aussi et surtout les plus simples à mettre en œuvre. En outre, contrairement aux méthodes à maillage fixe, elles utilisent un maillage régulier d'une part et par rapport aux modèles variant le pas de temps, elles ne requièrent aucune itération interne pour avancer dans le temps. Ces avantages ont motivé son étude détaillée afin d'améliorer sa précision.

TAB. 3.2 – Ordres de grandeur de l'erreur relative sur la localisation de l'interface telle qu'elle est donnée par les différents modèles explicites pour différents nombres de Stefan, Ste .

Modèle numérique	Ste		
	0.1	1.0	10
Pas d'espace fixé (Crank)	Aléatoire		
Pas d'espace fixé (Murray et col.)	0.0029	0.020	0.050
Pas d'espace fixé (Verma et col.)	0.6000	0.050	0.095
Migration d'Isotherme	0.0020	0.025	0.200
Pas d'espace variable	0.0018	0.007	0.050

3.4.2 Schéma numérique équivalent

Les deux schémas numériques construits sur la base des équations (3.29,3.30) d'une part et (3.18,3.19) d'autre part sont considérés en substituant à $\bar{\eta}^j$, η_i^j , $\bar{\xi}$ et ξ_i leurs expressions en fonction de i , N et Δ^j . Les équations discrétisées de la chaleur (3.16) et (3.18) fournissent la relation suivante

$$\theta_i^{j+1} = \theta_i^j + \frac{i\bar{\tau}}{2\Delta^j} \frac{d\Delta}{d\tau} \Big|_j (\theta_{i+1}^j - \theta_{i-1}^j) + \frac{\bar{\tau}N^2}{(\Delta^j)^2} (\theta_{i+1}^j - 2\theta_i^j + \theta_{i-1}^j) \quad (3.29)$$

et les équations discrétisées de Stefan (3.17) et (3.19) aboutissent à la forme unique donnée par

$$\left. \frac{d\Delta}{d\tau} \right|^j = \frac{\Delta^{j+1} - \Delta^j}{\bar{\tau}} = -Ste \frac{N}{2\Delta^j} \left(3\theta_N^j - 4\theta_{N-1}^j + \theta_{N-2}^j \right) \quad (3.30)$$

Ainsi donc, les deux schémas numériques développés à partir des modèles variant le pas d'espace et s'appuyant sur les formulations à domaine fixe et variable sont deux expressions d'une solution unique. A partir d'une solution de départ, il suffit de se donner le nombre de subdivisions, N , à partir duquel est déterminé le pas de temps, $\bar{\tau}$, assurant la stabilité du schéma pour amorcer le processus itératif.

3.4.3 Modèle à pas d'espace variable modifié

Nous avons repris le schéma numérique équivalent précédent (éqs.3.18,19) et introduit une légère modification dans la discrétisation. On considère que l'équation de conduction doit être satisfaite au nœud i et à l'instant $\tau^{j+\frac{1}{2}}$. La discrétisation conduit à l'équation suivante

$$\theta_i^{j+1} = \theta_i^j + \frac{i\bar{\tau}}{2\Delta^{j+\frac{1}{2}}} \left. \frac{d\Delta}{d\tau} \right|^{j+\frac{1}{2}} \left(\theta_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - \theta_{i-1}^{j+\frac{1}{2}} \right) + \frac{\bar{\tau}N^2}{(\Delta^{j+\frac{1}{2}})^2} \left(\theta_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - 2\theta_i^{j+\frac{1}{2}} + \theta_{i-1}^{j+\frac{1}{2}} \right) \quad (3.31)$$

où la vitesse et la position de l'interface, $\frac{d\Delta}{d\tau}$ et Δ , à l'instant $\tau^{j+\frac{1}{2}}$ sont déduites des équations suivantes

$$\left. \frac{d\Delta}{d\tau} \right|^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta^{j+1} - \Delta^j}{\bar{\tau}} = -Ste \frac{N}{2\Delta^{j+\frac{1}{2}}} \left(3\theta_N^{j+\frac{1}{2}} - 4\theta_{N-1}^{j+\frac{1}{2}} + \theta_{N-2}^{j+\frac{1}{2}} \right) \quad (3.32)$$

Pour éviter un schéma implicite et la procédure itérative qui lui est associée, à cause de la nonlinéarité, et garder le même type de schéma que précédemment, nous supposons que les quantités $(\theta_{i+1} - \theta_{i-1})$, $(\theta_{i+1} - 2\theta_i + \theta_{i-1})$ et $(3\theta_N - 4\theta_{N-1} + \theta_{N-2})$ varient peu entre les instants τ^j et $\tau^{j+\frac{1}{2}}$. En outre, on admet que la position de l'interface à ce dernier instant peut être remplacée par la valeur moyenne de ses positions aux instants τ^j et τ^{j+1} , soit :

$$\Delta^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta^{j+1} + \Delta^j}{2} \quad (3.33)$$

Compte tenu de ces hypothèses, les équations (3.31) et (3.32) conduisent au schéma aux différences suivant

$$\theta_i^{j+1} = \theta_i^j + \frac{i\bar{\tau}}{2\Delta^{j+\frac{1}{2}}} \left. \frac{d\Delta}{d\tau} \right|^{j+\frac{1}{2}} \left(\theta_{i+1}^j - \theta_{i-1}^j \right) + \frac{\bar{\tau}N^2}{(\Delta^{j+\frac{1}{2}})^2} \left(\theta_{i+1}^j - 2\theta_i^j + \theta_{i-1}^j \right) \quad (3.34)$$

et

$$\left. \frac{d\Delta}{d\tau} \right|^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta^{j+1} - \Delta^j}{\bar{\tau}} = -Ste \frac{N}{2\Delta^{j+\frac{1}{2}}} \left(3\theta_N^j - 4\theta_{N-1}^j + \theta_{N-2}^j \right) \quad (3.35)$$

Enfin, en remplaçant dans cette dernière équation $2\Delta^{j+\frac{1}{2}}$ par $(\Delta^{j+1} + \Delta^j)$ (éq.3.33) et en séparant les variables, nous pouvons linéariser l'équation résultante et en déduire l'expression de la position de l'interface, Δ , à l'instant τ^{j+1} . Elle est donnée par

$$\Delta^{j+1} = \sqrt{(\Delta^j)^2 - SteN\bar{\tau} \left(\theta_{i+1}^j - 2\theta_i^j + \theta_{i-1}^j \right)} \quad (3.36)$$

A partir des valeurs de θ_i^j et Δ^j à l'instant $\tau^j = j\bar{\tau}$, la mise en œuvre de la procédure de calcul consiste à :

- i*) Calculer la position de l'interface à l'instant τ^{j+1} à l'aide de l'équation (3.36) qui permet d'approcher les valeurs, à l'instant intermédiaire $\tau^{j+\frac{1}{2}}$, de la position (éq.3.33) et de la vitesse (éq.3.35) de l'interface.
- ii*) Evaluer les températures nodales θ_i^{j+1} pour $i = 2, 3, \dots, N-1$ à partir du système d'équations (3.34) à l'aide desquelles on reprend la procédure de l'étape *i*) pour calculer la position de l'interface et les températures nodales à l'instant τ^{j+2} .

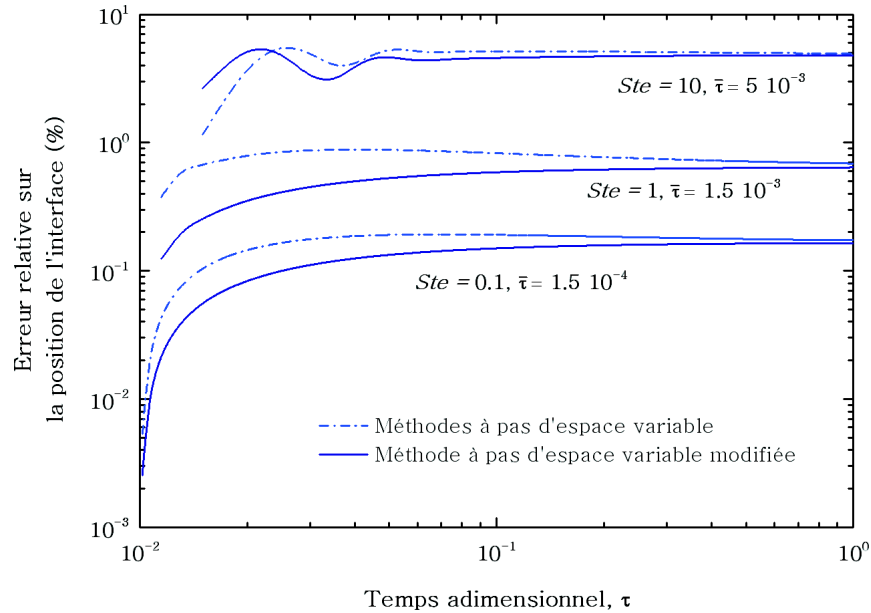
La comparaison de la solution fournie par ce schéma numérique par rapport aux précédents montre que cette modification apporte une amélioration sensible à la précision de la méthode (FIG. 3.14). De plus, il faut noter que ce gain de précision n'affecte pas le temps de calcul de la méthode.

3.5 Conclusion

La nonlinéarité introduite par le mouvement de l'interface solide/liquide dans le modèle mathématique a motivé le développement de diverses et nombreuses techniques numériques. Les méthodes explicites revues dans ce chapitre ne constituent qu'une partie des méthodes proposées pour la solution du problème, mais elles sont les plus importantes et les plus utilisées pour suivre la trace du front mobile particulièrement dans le cas des problèmes unidimensionnels.

L'inconvénient principal des méthodes explicites réside dans leur dépendance vis à vis d'autres procédures pour leurs fournir des solutions de démarrage. En outre, la complexité de leur extension aux problèmes à deux ou trois dimensions, pour lesquels les méthodes implicites sont plus flexibles, et leur coût en temps de calcul, particulièrement pour de faibles valeurs du nombre de Stefan, constituent des inconvénients non moins importants que le premier.

FIG. 3.14 – Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par les méthodes numériques variant le pas d'espace et la méthode modifiée pour différents valeurs du nombre de Stefan, Ste .



Pour démarrer les procédures de calcul dans le cas de ce chapitre, nous avons considéré au départ 3 nœuds et sollicité la solution exacte de Stefan pour calculer la solution à l'instant $\tau_0 = 0.01$. Les calculs numériques montrent que les méthodes qui adaptent le pas de discrétisation spatiale au mouvement de l'interface sont économiques et surtout plus précises. Les calculs montrent également que les deux modèles numériques construits sur la base d'un pas d'espace variable ne sont en fait que deux expressions d'une solution unique remettant en cause les résultats de l'étude de Kutluay [59].

Chapitre 4

Méthode de l'Intégrale de l'Energie

4.1 Introduction

Nous avons noté, à travers le chapitre précédent, que les méthodes numériques explicites sont non seulement coûteuses en temps de calcul mais aussi et surtout dépendantes des méthodes analytiques, qui leurs permettent d'amorcer la procédure de calcul en leurs fournissant les solutions de démarrage. A cet effet, les solutions exactes sont les plus sollicitées [56, 57, 21, 58] même si elles ne concernent que le cas d'une température imposée à la paroi. Sinon, on a recours aux solutions de démarrage obtenues à partir des méthodes des perturbations, celles du développement de séries ou les méthodes intégrales. Parmi ces dernières, la méthode de l'intégrale de Van-Karman et Pohlhausen, qui consiste à considérer le transfert macroscopique, se révèle être la plus simple tout en restant flexible dans sa mise en œuvre pour inclure les différentes conditions aux limites. Dans beaucoup de cas pratiques, elle a permis de fournir des solutions suffisamment précises motivant ainsi beaucoup de travaux dédiés à son amélioration et à l'extension de son domaine d'application.

Ce chapitre est consacré à la méthode de l'intégrale appliquée au transfert de chaleur avec changement de phase. Après la description du principe de la méthode, il rapporte le travail original de Goodman et les procédures développées plus tard pour son amélioration. Des graphes, montrant l'écart de chaque solution proposée par rapport à la solution analytique exacte, sont tracés pour apprécier la précision de chacune d'elles. Appréciation qui a conduit à ne traiter dans ce cas que le problème de Stefan à une phase où la température de la paroi $\eta = 0$ est imposée et constante.

4.2 Principe de la méthode

La méthode de l'intégrale de l'énergie constitue un puissant outil pour la solution des problèmes de diffusion non linéaires. La méthode est développée par Von Karmann et Pauhlhausen [1] pour le problème de diffusion de la quantité de mouvement en théorie de couche limite hydrodynamique. Goodman a montré qu'elle peut être aussi efficace pour l'étude des problèmes de diffusion thermique. Il a testé ses performances aussi bien dans le cas où la nonlinéarité est introduite par la dépendance des propriétés thermophysiques [11] de la température, que dans celui où elle l'est par le changement de phase [10].

Dans le cas présent, la technique consiste à

- i*) Choisir un profil de température arbitraire, $\theta(\eta, \tau)$, qui approche le mieux possible la distribution exacte dans le domaine de définition de l'équation de diffusion ;
- ii*) Forcer le profil à vérifier les conditions aux frontières du domaine ;
- iii*) Transformer l'équation de diffusion de la forme aux dérivées partielles en une équation intégrale exprimant le transfert macroscopique. Elle est obtenue en intégrant une fois par rapport à l'espace l'équation de diffusion sur tout le domaine ;
- iv*) Enfin, substituer le profil de température choisi en *i*) dans l'équation intégrale de l'énergie obtenue en *iii*). L'opération fournit une équation différentielle ordinaire, où le temps est une variable indépendante, pour la position de front mobile.

Ainsi donc, la méthode de l'intégrale, même approximative, présente l'avantage de transformer les équations aux dérivées partielles en équations différentielles ordinaires dont l'intégration est, relativement aux premières, beaucoup plus simple à aborder.

4.3 Modèles de Goodman

Suivant la procédure décrite par la section précédente (§4.2), Goodman substitue à la distribution de température dans la couche solidifiée, un profil quadratique à trois paramètres¹. Compte tenu des conditions aux frontières, il se met sous la forme suivante

$$\theta(\eta, \tau) = \zeta \left(1 - \frac{\eta}{\Delta}\right) + (1 - \zeta) \left(1 - \frac{\eta}{\Delta}\right)^2 \quad (4.1)$$

Où ζ est une fonction de forme pouvant dépendre du temps pour adapter le profil (éq.4.1) à l'évolution de la distribution réelle de température.

Dans la deuxième étape, il développe l'équation de l'intégrale de l'énergie en procédant par une intégration de l'équation de l'énergie (2.21) sur toute l'épaisseur de la

¹Goodman pose $\theta(\eta, \tau) = a(\eta - \Delta)^2 + b(\eta - \Delta) + c$ où a , b et c sont les 3 paramètres

couche solidifiée. En utilisant la formule de Leibniz (Annexe C.3), l'intégration aboutit à

$$\frac{d}{d\tau} \int_{\eta=0}^{\eta=\Delta} \theta d\eta = \left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\Delta} - \left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} \quad (4.2)$$

Elle exprime l'égalité entre la quantité de chaleur cumulée dans toute la couche et la différence entre les quantités de chaleur qui traversent ses frontières. C'est l'équation de transfert macroscopique de chaleur communément appelée *l'intégrale de l'énergie de Goodman*.

La suite de la procédure peut suivre plusieurs directions comme l'a montré Wood [53] dont deux ont été exploitées par Goodman. En plus de ces deux approches, basées sur la méthode de l'intégrale de l'énergie, Goodman a aussi considéré la méthode des collocations par points. Nous décrivons ci-après les trois propositions de Goodman.

4.3.1 Modèle de l'intégrale de l'énergie

Dans cette approche, Goodman [10] substitue au flux de chaleur à la surface d'échange $\eta = 0$, présent dans les équations intégrale de l'énergie (4.2) et de Stefan (2.23), son expression obtenue en dérivant le profil de température précédent (éq.4.1). L'équation de Stefan aboutit à l'équation différentielle ordinaire suivante

$$\frac{d\Delta^2}{d\tau} = 2Ste\zeta \quad (4.3)$$

Cette équation ne suffit pas à résoudre le problème puisqu'elle comporte deux inconnues qui sont la position de l'interface, Δ , et la fonction de forme, ζ . Une équation supplémentaire est nécessaire pour la fermeture du système.

Compte tenu de la solution exacte (éq.1,2), l'équation précédente montre que le paramètre de forme ζ est indépendant du temps.

D'autre part, dans l'équation de l'intégrale de l'énergie obtenue, il substitue au flux à l'interface, son expression en fonction de la vitesse de celle-ci en utilisant l'équation de Stefan (2.23) et évalue l'intégrale de température en considérant le profil choisi (éq.4.1). Le résultat est une équation différentielle ordinaire dont l'intégration fournit

$$\Delta^2(\tau) = 2 \left[\sqrt{(Ste + 6)^2 + 12Ste} - (Ste + 6) \right] \tau \quad (4.4)$$

4.3.2 Modèle des collocations

Trois années plus tard, Goodman [79] reconsidère le problème pour essayer d'améliorer la précision de la méthode de l'intégrale de l'énergie en faisant appel à la méthode de

collocation. Son étude aboutit à deux nouvelles solutions analytiques dont la première associe les deux méthodes (§4.3.3) alors que la seconde est le résultat de la combinaison de la méthode de collocation avec l'équation de Stefan.

Comme la méthode de l'intégrale, la méthode de collocation fait partie de famille des techniques de calcul de résidus. Elle consiste dans le cas présent à

- i*) choisir, comme dans le cas de la méthode intégrale, un profil de température arbitraire qui vérifie les conditions aux limites,
- ii*) éliminer le temps dans l'équation de la chaleur pour exprimer celle-ci uniquement en fonction de l'espace,
- iii*) considérer la position du front de solidification, $\eta = \Delta$, comme point de collocation et enfin
- iv*) minimiser le résidu ci-dessous (éq.4.5) en substituant à la température, le profil obtenu en *i*).

$$\mathfrak{R}(\Delta) = \left. \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} \right|_{\Delta} - Ste \left(\left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\Delta} \right)^2 \quad (4.5)$$

Les deux premières étapes de la procédure aboutissent à des résultats déjà obtenus, à savoir, le profil de température choisi avec la méthode de l'intégrale (éq.4.1) d'une part et l'équation alternative de Stefan (éq.2.27) d'autre part. Annulant ensuite le résidu $\mathfrak{R}(\Delta)$, on ajuste le paramètre ζ à la solution du problème. L'opération aboutit à une équation algébrique de second degré dont la racine positive est donnée par

$$\zeta = \frac{-1 + \sqrt{1 + 2Ste}}{Ste} \quad (4.6)$$

Substituant ce résultat au paramètre ζ dans l'équation de Stefan où le flux à l'interface est évalué en dérivant le profil choisi (éq.4.3), on obtient la solution suivante pour la position de l'interface

$$\Delta(\tau) = \sqrt{2(-1 + \sqrt{1 + 2Ste})} \sqrt{\tau} \quad (4.7)$$

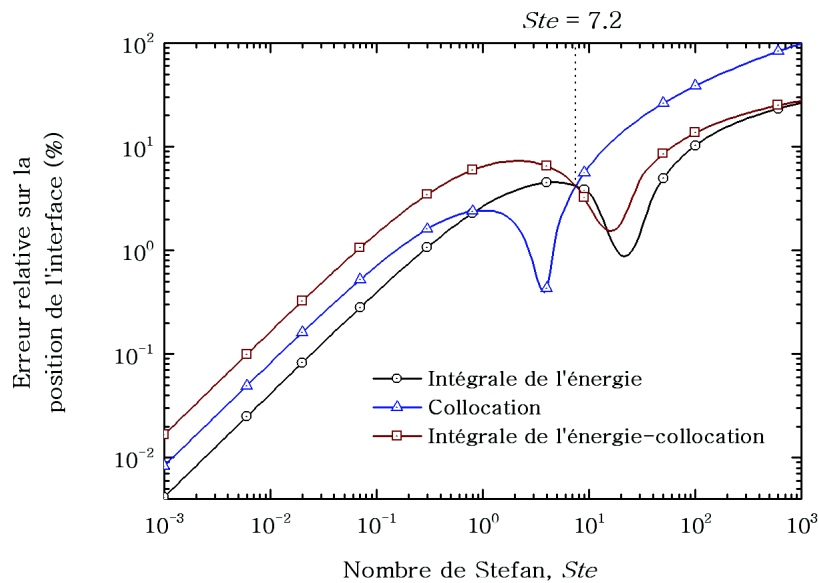
4.3.3 Modèle de l'intégrale de l'énergie-collocation

Cette approche combine les deux méthodes précédentes. La méthode de collocation est utilisée pour déterminer l'expression de ζ pour l'associer à l'équation de l'intégrale

de l'énergie, traitée dans ce cas de la même façon que dans le modèle de l'intégrale de l'énergie (§4.3.1). L'expression suivante est obtenue pour la position de l'interface

$$\Delta(\tau) = 2\sqrt{3\frac{2Ste + 1 - \sqrt{1 + 2Ste}}{2Ste + 5 + \sqrt{1 + 2Ste}}}\sqrt{\tau} \quad (4.8)$$

FIG. 4.1 – Erreur relative sur la position de l'interface fournie par les solutions analytiques de Goodman.



Nous avons représenté sur la figure (4.1) les graphes donnant l'erreur relative sur la localisation de l'interface en fonction du nombre de Stefan, Ste , telle qu'elle est donnée par les solutions analytiques de Goodman. Globalement, la méthode de l'intégrale de l'énergie prédit mieux la position du front de solidification que les deux autres méthodes. Cependant, pour $0.8 < Ste < 7.2$, la méthode des collocations offre une meilleure précision.

4.4 Modèles de Wood

Wood [53] a montré qu'il y a six possibilités de mise en œuvre de la méthode de l'intégrale de l'énergie de Goodman. Elles aboutissent à quatre solutions analytiques différentes pour la position de l'interface, dont une fait appel à une procédure numérique pour évaluer le facteur de forme.

La table 4.1 ci-dessous résume ces différentes procédures de mises en œuvre. La méthode de l'intégrale de l'énergie associée à un profil quadratique nécessite la détermination de deux paramètres, la fonction de forme ζ et la position de l'interface Δ ,

pour lesquels deux équations sont nécessaires. La première équation est fournie par l'une des deux conditions de Stefan. On peut utiliser la forme originale qui exprime la vitesse de l'interface (équ.2.23) (options 1,2,3) où la forme alternative obtenue en considérant l'équation de diffusion à l'interface (équ.2.27) (options 4,5,6). Pour la deuxième équation, Wood considère l'équation de transfert macroscopique de chaleur (équ.4.2). Il utilise la distribution arbitraire choisie pour la température afin d'évaluer l'intégrale du membre de gauche et le flux à la surface d'échange $\eta = 0$. Il aboutit à

$$\frac{\zeta + 2}{6} \frac{d\Delta}{dt} = \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\Delta} + \frac{2 - \zeta}{\Delta} \quad (4.9)$$

Cette équation peut être évaluée de trois manières différentes. Pour remplacer le terme de flux au front de solidification, nous utilisons soit l'équation originale de Stefan (options 1,4), soit nous l'évaluons en dérivant le profil de température (options 2,4) ou soit en faisant appel à la condition de Stefan sous sa forme alternative (options 3,6).

Les deux premières options (1 et 2) sont équivalentes et fournissent la même solution. C'est celle obtenue par Goodman à l'aide de la méthode de l'intégrale de l'énergie (équ.4.4). De même, l'option 4 n'est autre que la méthode de l'énergie-collocation due à Goodman (équ.4.8).

Les options 5 et 6 aboutissent à l'expression suivante pour la position de l'interface

$$\Delta(\tau) = 2 \sqrt{6 \frac{Ste + 1 - \sqrt{1 + Ste}}{2Ste - 1 + \sqrt{1 + Ste}}} \sqrt{\tau} \quad (4.10)$$

Enfin, la considération de l'option 3 fournit une solution en fonction du paramètre ζ

$$\Delta(\tau) = \sqrt{2Ste\zeta} \sqrt{\tau} \quad (4.11)$$

qui doit être inclus dans l'intervalle $[0, 1]$, pour vérifier l'équation alternative de Stefan, et est la racine de l'équation suivante

$$(1 + 2\zeta) \left[2\zeta e^{\zeta} (1 + Ste) + (1 - e^{\zeta}) Ste \right] - 2\zeta = 0 \quad (4.12)$$

La figure (4.2) montre les graphes donnant les variations, en fonction du nombre de Stefan Ste , des erreurs relatives associées aux différentes procédures de mise en œuvre de la méthode. On peut noter que la solution donnée par l'option 3 n'est pas applicable dans le domaine $0.4 \leq Ste \leq 3$ où le paramètre $\zeta > 1$. La comparaison des différentes courbes montrent que l'utilisation de la condition alternative de Stefan a pour effet de réduire la précision de la méthode de l'intégrale de l'énergie. La procédure de mise en œuvre la plus efficace est celle qui force le flux de chaleur à la surface d'échange $\eta = 0$ à vérifier la condition originale de Stefan aussi bien pour la détermination du profil à substituer que dans l'équation intégrale de l'énergie.

TAB. 4.1 – Différentes possibilités de mise en œuvre de la méthode de l'intégrale d'énergie.

Option	Equation de Stefan	Equation de l'intégrale de l'énergie
1		$\frac{\zeta + 2}{6} \frac{d\Delta}{d\tau} = -\frac{1}{Ste} \frac{d\Delta}{d\tau} + \frac{2 - \zeta}{\Delta}$
2	$\frac{\partial\theta}{\partial\eta}\Big _{\Delta} = -\frac{1}{Ste} \frac{d\Delta}{d\tau}$	$\frac{\zeta + 2}{6} \frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{-\zeta}{\Delta} + \frac{2 - \zeta}{\Delta}$
3		$\frac{\zeta + 2}{6} \frac{d\Delta}{d\tau} = -\frac{1}{\Delta} \sqrt{\frac{2(1 - \zeta)}{Ste}} + \frac{2 - \zeta}{\Delta}$
4		$\frac{\zeta + 2}{6} \frac{d\Delta}{d\tau} = -\frac{1}{Ste} \frac{d\Delta}{d\tau} + \frac{2 - \zeta}{\Delta}$
5	$\frac{\partial\theta}{\partial\eta}\Big _{\Delta} = -\frac{1}{\Delta} \sqrt{\frac{2(1 - \zeta)}{Ste}}$	$\frac{\zeta + 2}{6} \frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{-\zeta}{\Delta} + \frac{2 - \zeta}{\Delta}$
6		$\frac{\zeta + 2}{6} \frac{d\Delta}{d\tau} = -\frac{1}{\Delta} \sqrt{\frac{2(1 - \zeta)}{Ste}} + \frac{2 - \zeta}{\Delta}$

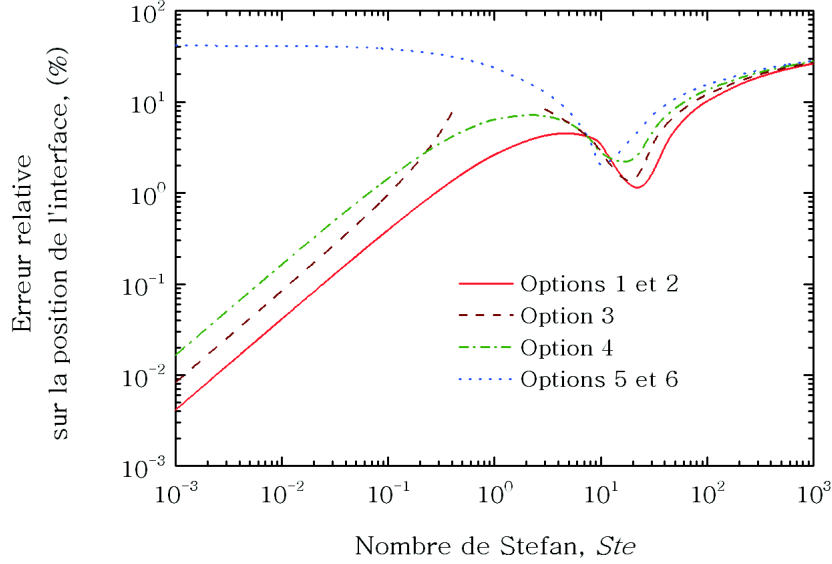
Remarque

Enfin, il convient de noter qu'en plus de ces procédures exploitées par Wood, on peut développer d'autres techniques de mise en œuvre de la méthode de l'intégrale de l'énergie. On peut combiner entre, par exemple, les deux conditions de Stefan pour développer une nouvelle équation qu'on peut associer à l'équation de la chaleur où le flux à la surface $\eta = 0$ est évalué selon les trois façons utilisées par Wood. Cependant, dès lors que nous faisons appel à la condition alternative de Stefan, les nouvelles procédures ne peuvent apporter une amélioration conséquente à la précision de la méthode.

4.5 Modèles de Mosally et col.

Inspirés par l'expression du développement limité de la fonction erreur et particulièrement par le premier terme ηe^{-x^2} et considérant les propriétés du processus de transfert de chaleur (loi de Fourier), Mosally et col. [54] considèrent la méthode de

FIG. 4.2 – Erreur relative sur la position de l'interface fournie par les solutions analytiques de Wood.



l'intégrale de l'énergie en optant pour un profil de forme exponentielle dans un premier temps et gaussienne par la suite.

4.5.1 Modèle exponentiel

L'expression du profil exponentiel choisi, vérifiant les conditions aux limites, est de la forme

$$\theta(\eta, \tau) = 1 - \frac{1 - e^{\beta \frac{\eta}{\Delta}}}{1 - e^{\beta}} \quad (4.13)$$

La substitution de ce profil dans l'équation de Stefan aboutit à

$$\frac{1}{2} \frac{d\Delta^2}{d\tau} = Ste \frac{\beta e^{\beta}}{e^{\beta} - 1} \quad (4.14)$$

qui montre que l'interface progresse en racine carrée du temps. Sa position évolue selon la relation suivante

$$\Delta = 2 \sqrt{\frac{Ste}{2} \frac{\beta e^{\beta}}{e^{\beta} - 1}} \sqrt{\tau} \quad (4.15)$$

L'équation de l'intégrale de l'énergie considérée avec le profil de température précédent fournit une équation reliant le paramètre β à la vitesse de solidification. En combinant le résultat avec l'équation de Stefan, on peut déduire une équation pour la détermination de β . Soit

$$[(Ste + 1)\beta - Ste] e^{2\beta} - (2\beta - Ste)e^{\beta} + \beta = 0 \quad (4.16)$$

4.5.2 Modèle Gaussien

Le profil gaussien considéré en tenant compte des conditions aux limites s'écrit

$$\theta(\eta, \tau) = 1 - \frac{\eta}{\Delta} e^{\beta} \left[\left(\frac{\eta}{\Delta} \right)^2 - 1 \right] \quad (4.17)$$

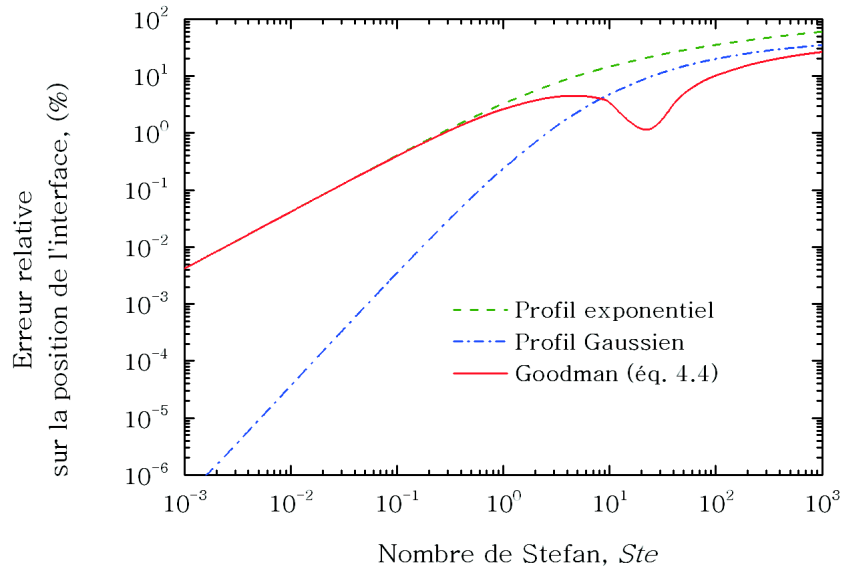
En suivant la même procédure que précédemment, on a l'expression suivante pour la localisation du front de solidification

$$\Delta = 2\sqrt{\frac{Ste}{2}(1+2\beta)}\sqrt{\tau} \quad (4.18)$$

où β est racine de l'équation transcendante suivante

$$(1+2\beta) \left[2\beta e^{\beta}(1+Ste) + (1-e^{\beta})Ste \right] - 2\beta = 0 \quad (4.19)$$

FIG. 4.3 – Erreur relative sur la position de l'interface en fonction du nombre de Stefan telle que fournie par les solutions de Mosally et col.



Dans cette étude, Mosally et col. [54] ont examiné le comportement de la méthode de l'intégrale de l'énergie avec un profil exponentiel. Ils ont choisi les profils de température, à partir des propriétés de la distribution exacte (développement limité de la fonction erf), ce qui n'est pas le cas pour un problème quelconque où nous n'avons, a priori, aucune information sur cette distribution. De plus, les résultats obtenus nécessitent la résolution d'équation transcendante pour achever les solutions, ce qui est le cas de la solution exacte de Neumann. Le solution fournie par l'utilisation d'un profil exponentiel coïncide avec la solution de Goodman pour $Ste \leq 0.2$ et devient moins précise au delà de cette valeur (Figure 4.3). Le profil gaussien améliore de façon notable

la précision de la méthode pour $Ste \leq 8$ et devient moins précis que la méthode de l'intégrale de l'énergie pour $Ste \geq 8$ mais, par rapport au profil exponentiel, il permet une meilleure localisation de l'interface.

4.6 Modèle de Mennig et Özişik

Mennig et Özişik [17] développent une nouvelle approche qui se propose d'améliorer la méthode de l'intégrale de l'énergie de Goodman. Désignée par *approche de l'équation intégrale couplée*, elle consiste à développer une nouvelle équation pour éliminer le terme du flux à la surface d'échange de l'équation intégrale.

L'approche développée, qui est plutôt plus mathématique, se résume à évaluer l'intégrale du flux à l'aide de la formule des trapèzes. On obtient une équation reliant l'épaisseur de la couche solidifiée aux écarts de flux et de températures aux bornes de celle-ci. Compte tenu de l'équation de Stefan, cette équation s'écrit

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_0 = \frac{1}{Ste} \frac{d\Delta}{d\tau} + 2 \frac{\theta(\Delta, \tau) - \theta(0, \tau)}{\Delta} \quad (4.20)$$

La formule des trapèzes a été également utilisée par les auteurs pour évaluer l'intégrale de la distribution de température dans l'équation du bilan thermique. Soit, en tenant compte également de l'équation de Stefan

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_0 = \left[-\frac{1}{Ste} - \frac{\theta(\Delta, \tau) + \theta(0, \tau)}{2} \right] \frac{d\Delta}{d\tau} \quad (4.21)$$

Ainsi, selon les auteurs, la dérivation d'une distribution arbitraire de température peut être évitée dans l'analyse en combinant ces deux dernières équations. Considérant les conditions aux frontières sur la température, les auteurs ont obtenu une équation différentielle ordinaire dont l'intégration fournit l'expression de la position de l'interface sous forme

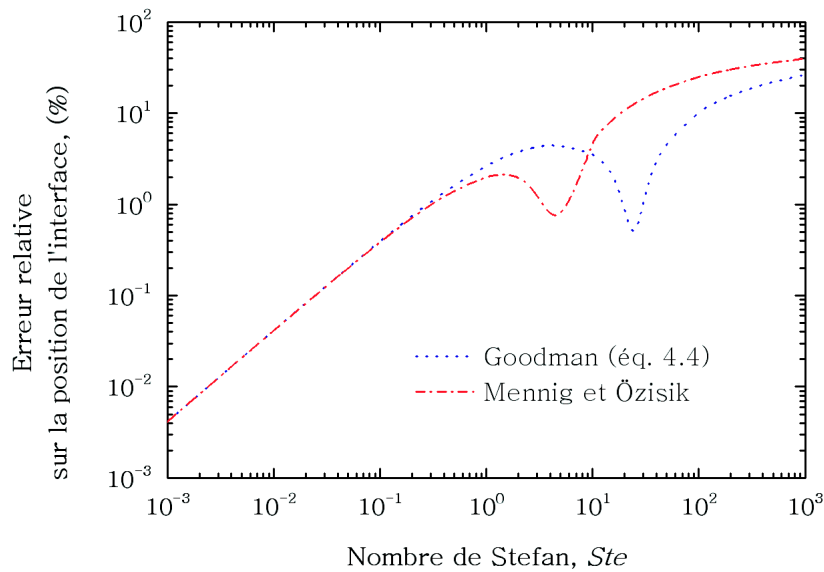
$$\Delta = 2 \sqrt{\frac{2Ste}{2 + Ste}} \sqrt{\tau} \quad (4.22)$$

Effectivement, les auteurs n'ont pas explicité la forme de la distribution de température dans cette analyse, toutefois, en utilisant la formule des trapèzes, un profil de température est considéré implicitement. La formule d'intégration des trapèzes suppose que la fonction à intégrer varie linéairement dans l'intervalle d'intégration. Donc, l'analyse développée utilise de façon implicite deux profils de température, un de forme linéaire dans l'équation de l'énergie (4.20) et un autre de forme quadratique (le flux varie linéairement) dans l'approximation du flux à l'interface (éq.4.21).

La comparaison de la solution de Mennig et Özişik avec la solution de l'intégrale de l'énergie (Figure 4.4) montre que la précision n'est améliorée que dans un domaine

réduit défini par $0.1 < Ste < 8$. Les deux solutions apparaissent confondues pour des valeurs plus petites du nombre de Stefan alors que pour des valeurs plus grandes, la procédure développée par les auteurs diminue la précision de la méthode de l'intégrale de l'énergie.

FIG. 4.4 – Erreur relative sur la position de l'interface en fonction du nombre de Stefan telle que fournie par la méthode de l'intégrale de l'énergie et l'approche de l'équation intégrale couplée de Mennig et Özisik [17].



4.7 Expressions analytiques la constante de solidification

Nous résumons ci-dessous (TAB. 4.2) les différentes expressions analytiques approchées de la constante de solidification. Nous rapportons également la solution exacte de Stefan (Annexe B.1), la solution quasi-stationnaire (Annexe B.3) et l'expression obtenue à l'aide de la méthode des perturbations [18] (§1.6.2.c).

4.8 Intégrale de l'énergie par subdivision

Devant l'impossibilité d'obtenir une procédure systématique qui permet d'avoir le profil qui approche le mieux la distribution de température, Noble [61] propose d'adapter la méthode à un profil simple. Il applique la méthode par intervalle en subdivisant le domaine $[0, \Delta(\tau)]$ en couches d'égale épaisseur et considère un profil linéaire dans

TAB. 4.2 – Différentes expressions analytiques de la constante de solidification, λ , disponibles dans la littérature

Expression de λ^2	Observation
$\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{Ste}{\sqrt{\pi}}$	Solution exacte de Stefan
$\frac{Ste}{2}$	Quasi-stationnaire
$\frac{1}{2} \left(-(Ste + 6) + \sqrt{(Ste + 6)^2 + 12Ste} \right)$	Goodman (éq.4.4)
$2(-1 + \sqrt{1 + 2Ste})$	Goodman (éq.4.7)
$3 \frac{2Ste + 1 - \sqrt{1 + 2Ste}}{2Ste + 5 + \sqrt{1 + 2Ste}}$	Goodman (éq.4.8)
$\frac{Ste}{2} \zeta$ où $\zeta \in [0, 1]$ est racine de : $Ste\zeta^2 + (2Ste + 6)\zeta + \sqrt{\frac{72}{Ste}(1 - \zeta)} - 12 = 0$	Wood (option 3)
$6 \frac{Ste + 1 - \sqrt{1 + 2Ste}}{2Ste - 1 + \sqrt{1 + 2Ste}}$	Wood (Options 5 et 6)
$\frac{Ste}{2} \frac{\zeta e^\zeta}{e^\zeta - 1}$ où ζ est racine de : $[(1 + Ste)\zeta - Ste]e^{2\zeta} - (2\zeta - Ste)e^\zeta + \zeta = 0$	Mosally (éq.4.15)
$\frac{Ste}{2}(1 + 2\zeta)$ où ζ est racine de : $(1 + 2\zeta) \left[2\zeta e^\zeta (1 + Ste) + (1 - e^\zeta)Ste \right] - 2\zeta = 0$	Mosally (éq.4.18)
$\frac{2Ste}{2 + Ste}$	Mennig et Özişik
$\frac{Ste}{2} \left[1 - \frac{Ste}{3} + \frac{7Ste^2}{45} \right]$	Cadwell et Kwan

chaque couche. L'application de la méthode de l'intégrale de l'énergie fournit, pour la couche limitée par les surfaces η_i et η_{i+1} , l'équation suivante

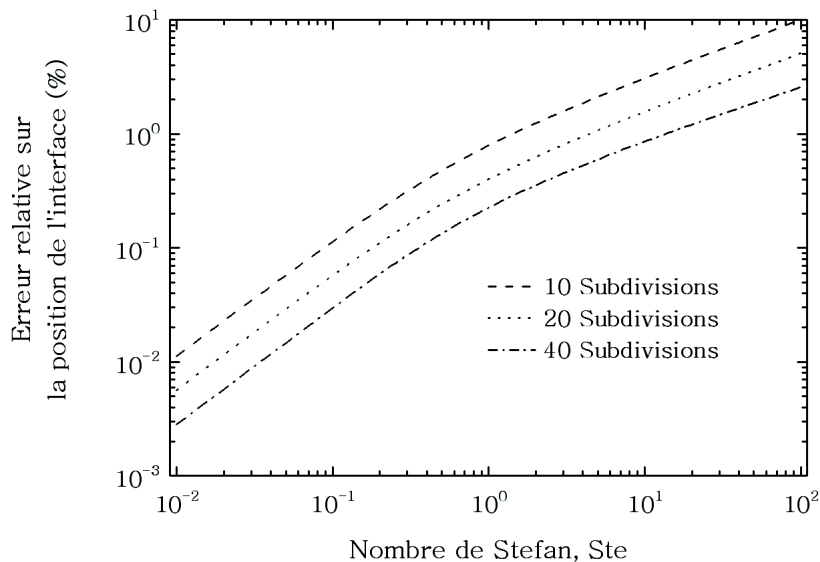
$$\frac{d}{d\tau} \int_{\eta_i}^{\eta_{i+1}} \theta d\eta = \theta_{i+1} \frac{d\eta_{i+1}}{d\tau} - \theta_i \frac{d\eta_i}{d\tau} + \left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\eta_{i+1}} - \left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\eta_i} \quad (4.23)$$

où on substitue à la température un profil approché par la forme linéaire. Soit

$$\theta = \theta_i + (\theta_{i+1} - \theta_i) \frac{\eta - \eta_i}{\eta_{i+1} - \eta_i} \quad (4.24)$$

En procédant de la même façon pour toutes les couches ($i = 1, 2, \dots, N$), nous produisons un système de N équations pour les N inconnues θ_i . Bell [62] propose de subdiviser l'écart de température $[\theta(0, \tau), \theta(\Delta, \tau)]$ en N intervalles égaux et de chercher à suivre le trace des ces isothermes. Les inconnues sont dans ce cas les positions η_i . La considération d'un profil quadratique nécessite l'utilisation de la condition de continuité du flux de chaleur aux interfaces des sous-domaines. Mosally et col. [54] considèrent la méthode en utilisant un profil exponentiel. Les mêmes auteurs ont considéré la convergence de la méthode [55].

FIG. 4.5 – Erreur relative sur la position de l'interface fournie par la méthode intégrale de l'énergie appliquée par subdivision du domaine.



La procédure aboutit à un système de N équations différentielles ordinaires qui fait que la méthode, même si elle gagne en précision, perd la qualité principale qu'est sa simplicité. La figure (4.5) montre que la procédure d'amélioration de la précision nécessite beaucoup de subdivisions.

4.9 Conclusion

Le présent chapitre met en évidence la simplicité qu'offre la méthode de l'intégrale de l'énergie de Goodman dans le traitement de l'équation de diffusion dans un domaine déformable. Il montre également l'intérêt qu'elle continue de susciter et la multitude de procédures mises en œuvre pour améliorer sa précision.

La source d'erreur de la méthode vient principalement du terme de flux à la surface fixe, $\eta = 0$, qui dérive un profil arbitraire, pour lequel il n'existe aucune procédure systématique permettant le choix de celui qui interpole mieux la distribution exacte de température. L'efficacité de la méthode dans le cas de faibles valeurs du nombre de Stefan en est une conséquence. D'un autre côté, la comparaison des différentes procédures de mise en œuvre, a montré que l'utilisation de l'équation de Stefan modifiée réduit considérablement la précision de la méthode.

Chapitre 5

Méthode de la Double Intégrale

5.1 Introduction

La simplicité et l'efficacité de la méthode de l'intégrale d'énergie à fournir à moindre frais des solutions tout à fait acceptables pour des problèmes de diffusion non-linéaire, ont motivé un grand nombre de contributions en vue de l'amélioration de sa précision et de l'extension de son domaine d'application.

La source principale de l'erreur de la méthode de l'intégrale réside dans la présence d'un terme qui fait appel à la dérivée d'une distribution arbitraire dans l'équation intégrale de l'énergie. C'est le terme de flux à la surface d'échange, $\eta = 0$, pour lequel, plusieurs procédures sont mises en œuvre pour améliorer la précision de son évaluation (voir chapitre précédent). Toutefois, le degré de précision demeure jusqu'à présent limité. A ce titre, il serait judicieux de trouver une procédure qui élimine ce terme de l'analyse. Celle-ci, qui fait l'objet de ce chapitre, est la méthode de la double intégrale développée par Volkov [80] qui associe remarquablement la précision à la simplicité.

5.2 Revue bibliographique

L'étude bibliographique, menée sur la méthode de la double intégrale, révèle qu'il y a seulement neuf études, postérieures à l'étude pionnière de Volkov [80], qui ont fait appel à cette procédure. Dans toutes ces études, cette dernière a permis effectivement à la solution de la méthode de l'intégrale, de gagner en précision tout en préservant sa simplicité.

5.2.1 Sans changement de phase

La méthode a été donc introduite par Volkov pour améliorer la méthode de l'intégrale de quantité de mouvement en théorie de couche limite hydrodynamique. Il a ensuite, avec Li-Orlov [2], étendu son application à l'amélioration de la méthode de l'intégrale de l'énergie dans le cas de la diffusion thermique dans une plaque dont la température de la surface d'échange est fixée. Le même problème a été considéré par Chung et Yeh [3] mais en considérant la surface d'échange soumise à un flux radiatif ou convectif d'une part et des propriétés thermophysiques variables d'autre part. Zien fait appel à la procédure pour évaluer le coefficient de frottement pariétal en couche limite hydrodynamique se développant sur une surface poreuse [4, 5]. Ce dernier l'applique par la suite pour étudier le transfert thermique pariétal dans les couches limites avec transpiration pour de faibles nombres de Prandtl [6]. Le chauffage aérodynamique par convection forcée [7] et la localisation du point de séparation en couche limite laminaire [8] ont été les problèmes auxquels Sucec [7, 8] a appliqué la procédure de la double intégrale.

5.2.2 Avec changement de phase

D'après la littérature, il y a uniquement deux études qui ont sollicité la procédure de la double intégrale dans le cas de transfert thermique avec changement de phase. Il s'agit dans les deux cas de solidification d'un liquide en équilibre thermique où les transferts sont contrôlés par la diffusion instationnaire. Elmas [9], par la suite El-Genk et Cronenberg [16] reprennent le modèle mathématique de Volkov et Li-Orlov [2] développé dans le cas la diffusion thermique et introduisent le phénomène de solidification. Les auteurs considèrent le même modèle physique (FIGS. 5.1, 5.2) où il s'agit de suivre le mouvement du front de solidification dans un liquide semi-infini et en équilibre thermique. L'équation transport est donnée par la relation (2.29) et les conditions aux limites par les équations (2.30,31) sur la frontière mobile et

$$\theta(\xi = 0, \tau) = F(\tau) \quad (5.1)$$

sur la surface d'échange $\xi = 0$. Le premier modèle considère une température de surface d'échange imposée, $F = 1$, alors que dans le second, celle-ci est dépendante du temps, $F(\tau)$.

L'application de la procédure de la double intégrale a permis d'aboutir à l'équation intégrale suivante

$$\Delta^2 = \frac{2Ste}{1 + 2Ste \int_0^1 \xi \theta d\xi} \int_0^\tau (F - \Delta) d\tau \quad (5.2)$$

FIG. 5.1 – Modèle physique de problème de Stefan à une phase considéré par Elmas [9].

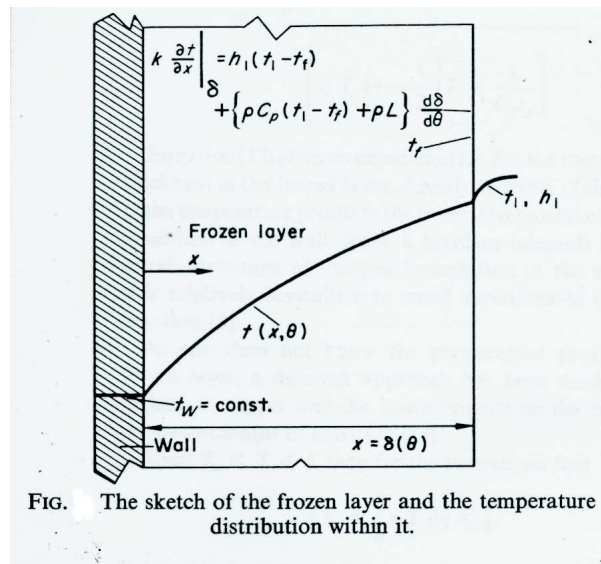
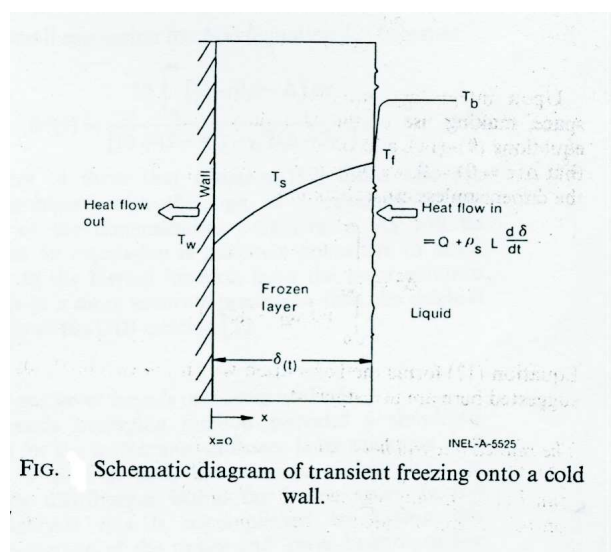


FIG. 5.2 – Modèle physique de problème de Stefan à une phase considéré par El-Genk et Cronenberg [16].



où

$$\Delta = \frac{Q_h}{k(T_m - T_r)} \delta(t), \quad \tau = \frac{Q_h^2}{k^2(T_m - T_r)^2} \alpha t \quad (5.3)$$

Q_h désigne le flux transmis par convection par le liquide au niveau de l'interface. A partir de cette expression, les auteurs considèrent le cas d'un liquide à son point de fusion et annulent le terme Q_h . Une expression pour la position de l'interface est déduite de l'équation (5.2), en annulant le terme Δ du membre de droite, et à partir de laquelle trois solutions analytiques sont développées, une par Elmas et deux par El-Genk et Cronenberg.

a. Modèle d'Elmas

Elmas [9] considère le cas d'une température imposée à la paroi, $F = 1$, mais la procédure développée peut être étendue directement à F dépendant du temps. A lieu de substituer un profil donné à la distribution de température pour évaluer l'intégrale, il détermine les valeurs limites de la position de l'interface obtenues en posant $\theta = F$ ou $\theta = 0$ dans l'équation (5.2)

$$\frac{2Ste}{1 + 2Ste \int_0^1 \xi F d\xi} \int_0^\tau F d\tau \leq \Delta^2 \leq \frac{2Ste}{1} \int_0^\tau F d\tau \quad (5.4)$$

A partir de cette expression, l'auteur développe une solution analytique pour le suivi du front mobile en considérant un dénominateur moyen, obtenu en moyennant les deux dénominateurs des expressions limites de la position de l'interface (éq.5.4), pour obtenir

$$\Delta^2(\tau) = \frac{4Ste}{SteF + 2} \int_0^\tau F d\tau \quad (5.5)$$

b. Modèles d'El-Genk et Cronenberg

El-Genk et Cronenberg [16] développent deux modèles analytiques pour la localisation de l'interface.

- *Modele de la moyenne des valeurs limites (MVL)*

Dans le premier modèle, ils reprennent la procédure d'Elmas et proposent de déterminer la valeur moyenne de la constante de solidification au lieu de celle du dénominateur. Ils posent $\Delta = 2\lambda_{moy}\sqrt{\tau}$ avec $2\lambda_{moy} = [\lambda_{min} + \lambda_{max}]$ et où λ_{min} et λ_{max} sont

déterminées à partir des valeurs limites de la position de l'interface considérées par Elmas (éq.5.4). La procédure aboutit à l'expression suivante

$$\Delta^2 = \frac{Ste(SteF + 2 + 2\sqrt{SteF + 1})}{2(SteF + 1)} \int_0^\tau F d\tau \quad (5.6)$$

- *Modele de l'integrale double avec profil quadratique (DIPQ)*

L'étude considère, pour le second modèle, un profil de température à trois paramètres qui, compte tenu des valeurs des température aux frontières de la couche solide, prend la forme suivante

$$\theta(\xi, \tau) = \zeta(1 - \xi) + (F - \zeta)(1 - \xi)^2 \quad (5.7)$$

où ζ est une fonction de forme analogue à celle utilisée au chapitre précédent (éq.4.1). La condition originale de Stefan permet d'exprimer ζ en fonction de la vitesse de l'interface (éq.4.3) et la condition alternative de Stefan permet de substituer à cette vitesse une expression en fonction de F et de Δ évitant ainsi la nonlinéarité de la solution.

L'expression suivante est obtenue pour la position de l'interface

$$\Delta^2 = \frac{12Ste}{5 + Ste + \sqrt{1 + 2SteF}} \int_0^\tau (F) d\tau \quad (5.8)$$

c. Remarques

Les échelles de temps et de longueur introduites par les auteurs (éqs.5.3) sont définies à l'aide du flux de chaleur, Q_h , échangé par convection entre le liquide et l'interface. Pour appliquer les modèles mathématiques obtenus au problème classique de Stefan, l'analyse annule Q_h réduisant l'espace à un point et figeant le temps rendant ces échelles inadéquates pour l'étude de ce type de problème. En outre, les auteurs n'ont pas examiné, dans leurs papiers, les performances des solutions obtenues dans le cas où $Q_h \neq 0$.

5.3 Intégrale double dans un domaine mobile

Nous reprenons, dans ce qui suit, la procédure de la double intégrale. Son application est développée sur la base du modèle mathématique fourni par la formulation dans un domaine variable au lieu du domaine fixe considéré par Elmas ou El-Genk

et Cronenberg. De plus, nous utiliserons les quatres conditions aux limites pour développer trois solutions de différents ordres pour suivre le mouvement de l'interface. La condition alternative de Stefan (éq. 2.27) a pour effet de réduire la précision de la méthode comme nous l'avons montré au chapitre précédent. Pour améliorer l'efficacité de la méthode, cette dernière est utilisée dans la présente étude pour augmenter le degré du profil de température choisi, et non pas pour la substituer à l'équation originale de Stefan ou forcer un profil donné à la vérifier, telle qu'elle est considérée dans l'étude d'El-Genk et Cronenberg.

5.3.1 Equation intégrale

Le problème considéré est décrit par le modèle mathématique développé au §2.4.2.a. à l'aide de la formulation dans un domaine variable. Les équations (2.21-2.25) sont associées à l'équation alternative de Stefan (éq.2.27) et la condition à la frontière $\eta = 0$ (éq.5.1).

En effectuant une double intégration par rapport à l'espace de l'équation de la chaleur (2.21), il vient

$$\int_0^\Delta \left[\int_0^\eta \frac{\partial \theta}{\partial \tau} d\eta' \right] d\eta = \theta(\Delta, \tau) - \theta(0, \tau) - \Delta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_0 \quad (5.9)$$

D'un autre côté, l'équation intégrale de l'énergie de Goodman (4.2), multipliée par l'épaisseur de la couche solidifiée Δ et tenant compte de la condition originelle de Stefan (2.23), fournit

$$\left[\eta \int_0^\eta \frac{\partial \theta}{\partial \tau} d\eta' \right]_0^\Delta = -\frac{1}{2Ste} \frac{d\Delta^2}{d\tau} - \Delta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_0 \quad (5.10)$$

La combinaison de ces deux dernières équations permet d'éliminer le terme de dérivée de la distribution de température, évaluée à la paroi $\eta = 0$. Ainsi, on obtient

$$\frac{d}{d\tau} \int_0^\Delta \eta \theta d\eta = F(\tau) - \frac{1}{2Ste} \frac{d\Delta^2}{d\tau} \quad (5.11)$$

En intégrant par rapport à la variable τ , une équation intégrale est obtenue pour l'évolution de l'épaisseur de la couche solidifiée.

$$\frac{\Delta^2}{2Ste} + \int_0^\Delta \eta \theta d\eta = \int_0^\tau F d\tau \quad (5.12)$$

L'équation intégrale précédente présente l'avantage de ne faire intervenir la distribution inconnue de température que sous le signe intégrale. Elle est identique à celle déjà obtenue par Elmas et El-Genk. En outre, pour tenir compte de la conclusion du chapitre précédent, l'équation de l'intégrale de l'énergie vérifie l'équation originale de Stefan. La solution devrait être, par conséquent, moins sensible au profil arbitraire substitué.

5.3.2 Profil de température

Quatre conditions aux limites peuvent être mises à contribution pour développer un profil qui remplacerait la distribution de température dans l'équation intégrale précédente (éq.5.8). Il s'agit des valeurs de la température aux frontières $\eta = 0$ et $\eta = \Delta$ de la couche solide d'une part et des deux conditions de Stefan, originelle (éq.2.23) et alternative (éq.2.27) d'autre part. Ces conditions peuvent permettre de développer un profil de degré 3 à quatre paramètres qui devrait interpoler mieux la distribution exacte de température.

En éliminant un paramètre à l'aide de la condition que doit vérifier la température à la frontière mobile, $\theta(\Delta, \tau) = 0$, on obtient le profil suivant

$$\theta(\eta, \tau) = \sum_{i=1}^3 \zeta_i \left(1 - \frac{\eta}{\Delta}\right)^i \quad (5.13)$$

où ζ_i ($i = 1, 2, 3$) sont des fonctions de forme dépendant du temps. La seconde condition sur la température à la paroi d'échange, $\theta(0, \tau) = F(\tau)$, permet d'écrire

$$\zeta_3 = F - \zeta_1 - \zeta_2 \quad (5.14)$$

où ζ_1 et ζ_2 peuvent être déduits des deux conditions de Stefan. La substitution du profil précédent (éq.5.9) dans les équations originelle (éq.2.23) et alternative (éq.2.27) aboutit respectivement aux expressions suivantes

$$\zeta_1 = \frac{1}{2Ste} \frac{d\sigma}{d\tau} \quad (5.15)$$

$$\zeta_2 = \frac{1}{8Ste} \left(\frac{d\sigma}{d\tau}\right)^2 \quad (5.16)$$

où $\sigma = \Delta^2$.

5.3.3 Position de l'interface

La position de l'interface est obtenue en substituant le profil de température ainsi obtenu dans l'équation intégrale

$$\sigma = \frac{60Ste}{30 + Ste(3F + 7\zeta_1 + 2\zeta_2)} \int_0^\tau F d\tau \quad (5.17)$$

Trois solutions sont présentées dans ce qui suit. Elles sont obtenues en substituant à la distribution de température soit un profil linéaire ou quadratique ou bien un polynôme de degré 3.

a. Profil linéaire

Pour de faibles nombres de Stefan, Ste , ou bien lorsque la couche solidifiée est de faible épaisseur, la chaleur cumulée dans celle-ci est faible devant la chaleur qui la traverse. L'analyse peut, dans ce cas, considérer une forme linéaire pour approcher la distribution de température.

Le profil ne fait intervenir que ζ_1 qui, compte tenu des conditions aux frontières sur la température, se confond avec la température de paroi $F(\tau)$. En éliminant les deux autres fonctions de forme et en substituant F à ζ_1 dans l'équation (5.14), on obtient une expression analytique pour la position de l'interface. Soit

$$\sigma = \frac{6Ste}{3 + SteF} \int_0^\tau F d\tau \quad (5.18)$$

De par sa forme analytique, le résultat est fort intéressant. La solution ainsi obtenue permet de suivre le mouvement du front de solidification sans aucun effort numérique.

b. Profil quadratique

Dans ce cas $\zeta_3 = 0$ dans l'équation (5.14). Le profil parabolique nécessite alors une autre équation pour expliciter les deux fonctions de forme, ζ_1 et ζ_2 . Compte tenu de l'étude de Wood [53], suggérant de forcer le profil à vérifier la condition de Stefan pour une mise en œuvre efficace de la méthode intégrale de l'énergie, l'équation intégrale (5.12) est utilisée. L'équation différentielle ordinaire non linéaire suivante est ainsi obtenue

$$\frac{d\sigma}{d\tau} = \frac{24Ste}{\sigma} \int_0^\tau F d\tau - 2(6 + SteF) \quad (5.19)$$

La solution obtenue nécessite une procédure d'intégration numérique qui, de surcroît, nécessite une solution de démarrage. La condition initiale (éq.2.25) constitue une singularité pour l'équation différentielle précédente ($\sigma(0) = 0$).

c. Profil de degré 3

Le profil de degré 3 met à contribution toutes les conditions aux limites associées à l'équation de la chaleur. Compte tenu des équations (5.11-13), l'équation (5.14) d'évolution de la position de l'interface prend la forme d'une équation algébrique de second degré par rapport à $\frac{d\sigma}{d\tau}$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\tau}\right)^2 + 14\frac{d\sigma}{d\tau} + f(\sigma, \tau) = 0 \quad (5.20)$$

dont la solution positive est également une équation différentielle ordinaire non-linéaire

$$\frac{d\sigma}{d\tau} = 7 \left[\sqrt{1 - \frac{f(\sigma, \tau)}{49}} - 1 \right] \quad (5.21)$$

et où la fonction f s'exprime en fonction de τ et du σ suivant la relation

$$f(\sigma, \tau) = 12(10 + SteF) - \frac{240Ste}{\sigma} \int_0^\tau F d\tau \quad (5.22)$$

Comme dans le cas précédent, la solution requière une procédure d'intégration numérique et une solution de démarrage.

5.3.4 Conclusion

La méthode de la double intégrale a été développée en considérant le modèle mathématique formulé dans un domaine variable. Le problème, décrit par une équation aux dérivées partielles soumise à une condition nonlinéaire à l'interface, est transformée en une équation intégrale dont la résolution est relativement plus simple à envisager. En outre, le résultat a été obtenu sans qu'aucune hypothèse simplificatrice n'ait été émise, faisant de l'équation obtenue la solution exacte du problème posé. Cependant, des hypothèses simplificatrices ont été nécessaires pour développer trois solutions approchées à partir des profils de température supposés de forme simple.

Avec les moyens informatiques actuels et surtout les logiciels, tel que MATLAB, ou les routines de calcul, telles que celles de la librairie IMSL, la solution, des équations différentielles ordinaires de premier ordre obtenues, ne nécessite aucun effort numérique ni de connaissances approfondies en programmation. Ceci montre que la simplicité est l'un des avantages de la méthode de l'intégrale.

5.4 Résultats et Discussion

Avant d'appliquer les modèles développés ci-dessus dans le cas d'une température de paroi variable, nous les considérons dans le cas où la température est imposée dont la solution exacte existe (Annexe A1). La confrontation des solutions approchées obtenues dans le cadre de cette étude, avec cette dernière permettra de rendre compte de leurs degrés de précision.

Les modèles sont ensuite considérés dans le cas deux types de variations pour la température de paroi $F(\tau)$, linéaire et périodique. Les solutions sont également comparées à celles développées par les autres auteurs.

5.4.1 Méthode d'intégration numérique

Les équations différentielles ordinaires (5.19) et (5.21) sont intégrées en considérant la méthode de Runge-Kutta-Cash-Karp, désignée par *méthode RKCK*, décrite en annexe C. La solution (5.18) est utilisée pour produire les solutions de démarrage nécessaires aux intégrations numériques de ces équations.

5.4.2 Température de paroi imposée, $F = 1$

Le problème correspond au modèle classique de Stefan dont la solution exacte est établie (Annexe A1). Compte tenu de l'évolution exacte de l'interface qui est proportionnelle à la racine carrée du temps, on peut simplifier d'avantage les modèles obtenus précédemment en posant $F = 1$ et $\sigma = 4\lambda^2\tau$. La solution dans ce cas consiste à déterminer la constante de solidification λ .

Dans le cas profil linéaire, l'expression de λ^2 est déduite directement à partir de l'équation (5.18). Le modèle obtenu à l'aide du profil quadratique (éq.5.19) aboutit à une équation algébrique de second de degré, par rapport à λ^2 , dont il faut considérer la racine positive. Enfin, le dernier modèle correspondant au profil de degré 3 fournit une équation algébrique de degré 3 (éq.5.20) dont la solution positive correspond à la valeur de λ^2 .

Trois nouvelles expressions, dont deux sont purement analytiques, sont ainsi obtenues et tabulées ci-dessus (TAB. 5.1) avec celles dues à El-Genk et Cronenberg d'une part et à Elmas d'autre part.

La figure (FIG. 5.3) présente les variations de l'erreur relative commise, dans la localisation de l'interface, par les solutions présentes et les solutions obtenues par la méthode de l'intégrale de l'énergie, l'approche de l'équation de l'intégrale couplée et les autres procédures de mise en œuvre de la méthode de la double intégrale. On peut

TAB. 5.1 – Expressions analytiques de la constante de solidification obtenues à partir de la méthode de la double intégrale

Expression de λ^2	Observation
$\frac{Ste}{2 + Ste}$	Elmas
$\frac{Ste (2 + Ste + 2\sqrt{1 + Ste})}{8(1 + Ste)}$	El-Genk et Cronenberg (ULBA)
$\frac{3Ste}{5 + Ste + \sqrt{1 + 2Ste}}$	El-Genk et Cronenberg (RHBI)
$\frac{3Ste}{6 + 2Ste}$	Profil linéaire
$\frac{\sqrt{(6 + Ste)^2 + 24Ste} - (6 + Ste)}{4}$	Profil quadratique
$4\lambda^6 + 14\lambda^4 + 3(10 + Ste)\lambda^2 - 15Ste = 0$	Profil de degré 3

noter que les deux solutions obtenues avec les profils quadratique et de degré 3 prédisent mieux la position de l'interface que les autres solutions. La comparaison de la solution d'El-Genk et Cronenberg (DIPQ), obtenue avec la même méthode et en utilisant le même profil que notre solution due à un profil quadratique, montre que l'utilisation de la condition alternative de Stefan a pour effet de diminuer la précision de la méthode. Ce qui est prévisible compte tenu des conclusions du chapitre précédent. Pour de faibles valeurs du nombre de Stefan ($Ste < 1$), la précision de cette solution est du même ordre que celle que obtenue en utilisant le profil linéaire.

Le tableau (TAB.5.2) rapporte des valeurs numériques de la constante de solidification obtenues à partir des solutions (éqs. 5.18,19 et 5.22) obtenues dans cette étude et de celles de Goodman, d'El-Genk et Cronenberg, ainsi que la solution exacte de Stefan. Les chiffres rendent compte de l'efficacité de la méthode de la double intégrale pour des nombres de Stefan inférieurs à 0.001 pour lesquels la méthode approche la solution exacte à plus de 8 chiffres après la virgule et quelle que soit la procédure de sa mise en œuvre.

Le tableau (TAB.5.3) présente également quelques résultats numériques concernant

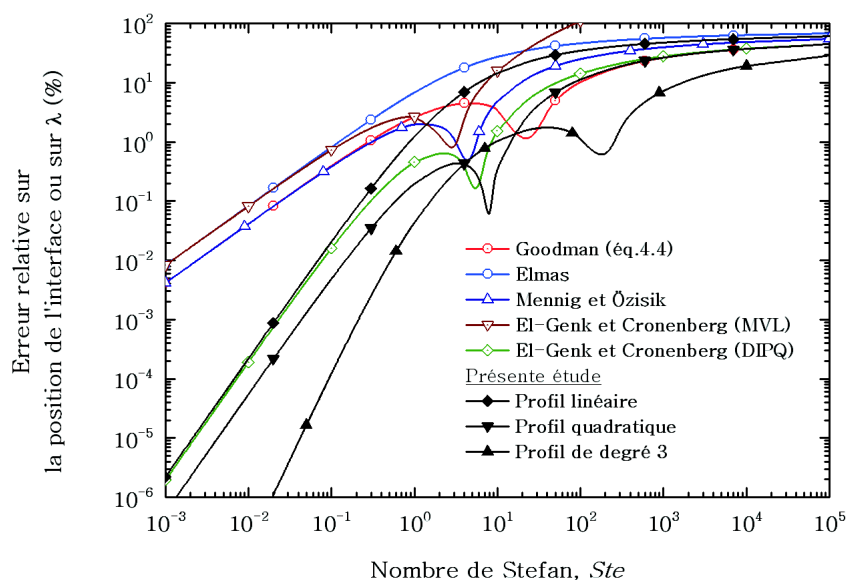
TAB. 5.2 – Résultats numériques comparatifs des valeurs fournies par les méthodes de l'intégrale de Goodman et de l'intégrale double pour la constante de solidification λ , pour différentes valeurs du nombre de Stefan, Ste

Ste	Goodman [11]	El-Genk et Cronenberg DIPQ[16]	Présente étude			Solution exacte [13]
			Linéaire	Quadratique	Degré 3	
10^{-3}	0.02235789	0.02235695	0.02235695	0.02235695	0.02235695	0.02235695
10^{-2}	0.07062253	0.07059341	0.07059312	0.07059332	0.07059328	0.07059328
10^{-1}	0.22088478	0.22005152	0.21997067	0.22002704	0.22001654	0.22001627
1	0.63649418	0.62289275	0.61237244	0.62128974	0.62033479	0.62006263
10^{+1}	1.30205980	1.23772944	1.07417231	1.25210397	1.27006425	1.25697212
10^{+2}	1.66084540	1.58658589	1.20677698	1.64113411	1.87175775	1.85094621
10^{+3}	1.72433160	1.69052383	1.22291188	1.72181128	2.17026515	2.34206793

TAB. 5.3 – Résultats numériques comparatifs des valeurs fournies, pour différentes valeurs du nombre de Stefan, Ste , par la méthode de l'intégrale de Goodman appliquée par subdivision du domaine [55] et par la présente solution pour la constante de solidification λ .

Ste	Exacte	Intégrale de l'énergie avec subdivision du domaine [55]			Présente solution avec différents profils		
		$N = 10$	$N = 20$	$N = 40$	Linéaire	Quadratique	Exponentiel
10^{-3}	0,022357	0,022357	0,022357	0,022357	0,022357	0,022357	0,022357
10^{-2}	0,070593	0,070585	0,070589	0,070591	0,070593	0,070593	0,070593
10^{-1}	0,220016	0,219756	0,219884	0,219950	0,210027	0,219950	0,210028
1	0,620063	0,613937	0,616960	0,618502	0,612372	0,621290	0,621843
10^{+2}	1,850946	1,665452	1,756491	1,803263	1,206777	1,641134	2,094461

FIG. 5.3 – Evolution de l'erreur relative fournie par les méthodes développées sur la base de l'intégrale de l'énergie de Goodman, sur la position de l'interface (ou la constante de solidification, λ), en fonction du nombre de Stefan, Ste .



la valeur de la constante de solidification pour cinq valeurs du nombre de Stefan. À côté des valeurs fournies par la solution analytique exacte de Stefan, le tableau rapporte également les solutions approchées par la méthode intégrale de l'énergie, appliquée par subdivisions, d'une part et par l'approche développée dans cette étude d'autre part. Trois différentes solutions sont considérées pour chacune des méthodes approchées. Elles correspondent à trois subdivisions ($N = 10, 20$ et 40) pour la première et trois différents profils (linéaire, quadratique et exponentiel [81]) pour la seconde. Nous pouvons noter que la présente approche, développée sur la base des profils de températures de formes linéaire, quadratique et polynomiale de degré 3, fournit des résultats numériques de même ordre de précision que ceux obtenus par la méthode de l'intégrale de l'énergie appliquée respectivement par intervalles et utilisant 10, 20 et 40 subdivisions.

Cette étude montre que la méthode de l'intégrale double constitue la meilleure procédure d'amélioration de la méthode de l'intégrale de l'énergie. De plus, la procédure de mise en œuvre efficace de celle-ci est celle développée dans ce travail. Elle montre également que pour des valeurs du nombre de Stefan inférieures à l'unité, la solution analytique obtenue avec un profil linéaire est suffisante pour pouvoir suivre le mouvement du front de solidification. C'est un résultat très important de point de

vue pratique car les matériaux fusibles les plus usuels présentent des valeurs faibles du nombre de Stefan. Il est également important sur le plan fondamental où la solution peut constituer un bon outil pour fournir des solutions de démarrage avec une bonne précision même dans le cas des nombres de Stefan importants. Car au début du processus, le profil de température est généralement linéaire à cause de la finesse de la couche formée.

5.4.3 Température de paroi variable, $F(\tau)$

La variation dans le temps de la température appliquée à la surface d'échange affecte le taux de solidification du liquide. La solution exacte qui pourrait nous informer sur l'importance de cette influence n'est toujours pas disponible dans la littérature. Afin de valider les modèles développés dans ce cas, la solution fournie par la méthode numérique à pas d'espace variable, développée au chapitre trois (§ 3.4), est considérée comme solution de référence. Pour une meilleure précision, cette dernière est mise en œuvre avec un pas d'intégration très petit, soit $\bar{\tau} = 10^{-7}$.

Deux types de variation pour la température appliquée à la frontière $\eta = 0$ sont considérées, une linéaire et une autre périodique. Mais, nous commençons par la refroidir brusquement pour avoir une vitesse de solidification initiale infinie et pouvoir ainsi tester la solution dans des cas défavorables.

a. Variation linéaire : $F(\tau) = 1 - 0.2\tau$

En premier lieu, il est considéré le cas où la surface d'échange $\eta = 0$ est refroidie instantanément et se réchauffe par la suite suivant une loi linéaire par rapport au temps. Les calculs sont arrêtés dès que la surface revient à sa température initiale. Soit $F(\tau) = 1 - 0.2\tau$ la température appliquée.

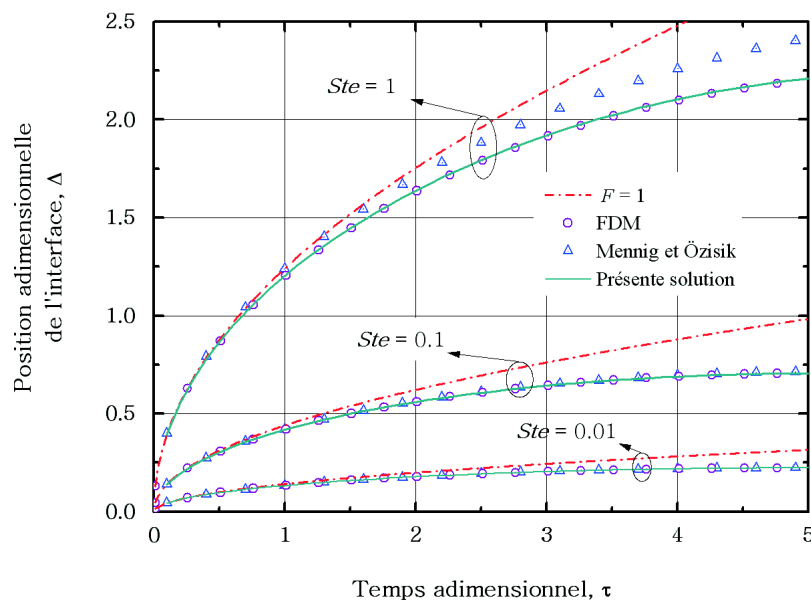
Les solutions sont considérées dans le cas de trois valeurs du nombre de Stefan, Ste , soient 0.2, 1 et 5. Les résultats numériques, rapportés par TAB.5.4, montrent que les solutions dues aux profils quadratique et de degré 3 concordent avec les solutions numériques pour les trois valeurs du nombre de Stefan. C'est le cas également pour la solution obtenue avec un profil linéaire pour $Ste = 0.2$ et $Ste = 1$ mais à un degré moindre pour $Ste = 5$. Cependant, même dans ce dernier cas, la solution ne s'écarte que légèrement des autres solutions.

La figure (5.4) montre l'évolution du front de solidification en fonction de temps pour trois valeurs du nombre de Stefan, 0.001, 0.1 et 1. Les courbes tracées concernent les solutions obtenues par la méthode numérique, l'approche de l'équation de l'intégrale couplée de Mennig et Özışik et la présente solution considérant un profil quadratique.

TAB. 5.4 – Résultats numériques concernant la localisation de l'interface par les solutions développées dans la présente étude et la solution numérique aux différences finies développée dans cette étude (§3.4), pour trois valeurs du nombre de Stefan Ste et dans le cas d'une température de paroi donnée par : $F(\tau) = 1 - 0.2\tau$

Ste	Temps, τ	Présentes solutions			Méthode numérique à pas d'espace variable
		Linéaire	Quadratique	Degré 3	
0.2	$0.6239 \cdot 10^{-2}$	0.048356	0.048402	0.048394	0.048752
	$0.2618 \cdot 10^{-1}$	0.098970	0.099062	0.099046	0.099069
	0.1068	0.199186	0.199365	0.199332	0.199379
	0.2441	0.299293	0.299540	0.299490	0.299563
	0.4425	0.399346	0.399637	0.399568	0.399669
	0.7094	0.499364	0.499665	0.499577	0.499710
	1.0570	0.599353	0.599620	0.599512	0.599681
	1.5080	0.699606	0.699786	0.699655	0.699868
	2.1030	0.799729	0.799756	0.799601	0.799885
2.9510	0.899965	0.899759	0.899576	0.899928	
1.0	$0.6206 \cdot 10^{-2}$	0.096468	0.097869	0.097718	0.097699
	$0.2561 \cdot 10^{-1}$	0.195872	0.198694	0.198385	0.198351
	$0.5816 \cdot 10^{-1}$	0.294933	0.299124	0.298653	0.298604
	0.1040	0.393935	0.399423	0.398782	0.398720
	0.1634	0.493032	0.499724	0.498902	0.498831
	0.2367	0.592282	0.600057	0.599042	0.598965
	0.3242	0.691583	0.700296	0.699072	0.698993
	0.4265	0.791082	0.800559	0.799107	0.799033
	0.5443	0.890847	0.900887	0.899185	0.899122
0.6783	0.990824	1.001191	0.999214	0.999171	
5.0	$0.1964 \cdot 10^{-2}$	0.085822	0.094193	0.093721	0.093769
	$0.8496 \cdot 10^{-2}$	0.178513	0.196039	0.196402	0.194779
	$0.1949 \cdot 10^{-1}$	0.270413	0.296892	0.297433	0.294905
	$0.3495 \cdot 10^{-1}$	0.362184	0.397515	0.398204	0.394789
	$0.5490 \cdot 10^{-1}$	0.454048	0.498123	0.498926	0.494626
	$0.7935 \cdot 10^{-1}$	0.546039	0.598722	0.599599	0.594415
	0.1083	0.638153	0.699278	0.700177	0.694108
	0.1418	0.730527	0.799904	0.800770	0.793810
	0.1799	0.823243	0.900659	0.901424	0.893569
0.2226	0.916258	1.001459	1.002047	0.993292	

FIG. 5.4 – Evolution de la position adimensionnelle de l'interface Δ en fonction du temps adimensionnel τ pour trois valeurs du nombre de Stefan, Ste , dans le cas où $F(\tau) = 1 - 0.2\tau$. (Solution exacte pour $F = 1$ en pointillés).



Les évolutions de l'interface dans le cas où la température est imposée sont représentées, également pour les trois valeurs de Ste , sur la figure. Elles sont données en traits discontinus.

La figure appelle deux remarques prévisibles : D'une part, elle montre que l'augmentation de la température de la surface d'échange a pour effet de ralentir le mouvement du front de solidification et que, d'autre part, plus le nombre Stefan est important plus la solidification est rapide. En d'autres termes, la capacité calorifique augmente le taux de changement de phase alors que la chaleur latente a pour effet de le ralentir.

Enfin, concernant la comparaison des résultats numériques, une parfaite concordance des résultats fournis par des trois méthodes est constatée pour des nombres de Stefan petits. Pour $Ste = 1$, cette concordance demeure parfaite uniquement entre la présente approche et la méthode numérique. Par contre, la méthode de l'intégrale de l'énergie de Mennig et Özisik s'écarte de celles-ci en surestimant la vitesse de solidification.

b. Variation périodique : $F(\tau) = 1 - \epsilon \sin(\omega\tau)$

La méthode de l'intégrale double développée dans cette étude est appliquée à un problème de Stefan avec température de paroi oscillant périodiquement dans le temps. La température varie selon la loi $F(\tau) = 1 - \epsilon \sin(\omega\tau)$, où ϵ et ω sont respectivement, l'amplitude et la fréquence des oscillations.

Les figures ci-dessous (FIGS. 5.5, 5.6 et 5.7), montrent l'évolution de l'interface solide-liquide telle qu'elle est donnée par la présente méthode avec un profil parabolique et la méthode numérique aux différences finies. L'évolution exacte du front de solidification, dans le cas où la température de paroi est imposée $F = 1$, est également représentée en traits discontinus. Deux valeurs pour le nombre de Stefan, Ste , sont considérées dans le cas où l'amplitude ϵ et la fréquence des oscillations ω sont fixées à 0.5 et $\frac{\pi}{2}$ respectivement.

Les figures appellent plusieurs remarques :

Elles montrent, de la même façon que la figure précédente (FIG.5.4), que l'épaisseur de la couche solidifiée dépend fortement de la valeur du nombre de Stefan. La chaleur latente de changement de phase a pour effet de ralentir la solidification. Elle doit être extraite, avec la chaleur spécifique, par l'intermédiaire de la couche solidifiée augmentant de ce fait le temps d'évacuation.

La nature oscillatoire de la température de paroi, influence largement la nature du mouvement du front de solidification particulièrement au début du processus. Cette influence, diminue au cours du temps. Le mouvement du front est ralenti quand la température diminue et accéléré quand celle-ci se trouve dans la phase ascendante. Après une période complète l'épaisseur de la couche solide formée est exactement la même que celle qui se serait formée si la température de paroi était imposée à la température moyenne $F = 1$.

Enfin, la superposition des résultats de la méthode numérique et de la présente approche montre que les solutions sont confondues pour les nombres de Stefan petits (FIGS. 5.5 et 5.6). Dans le cas du nombre de Stefan plus important, FIG.5.7 montre une bonne concordance entre les deux solutions au début du processus mais par la suite la solution développée dans cette étude oscille de part et d'autre de la solution numérique. Cet écart est du certainement à la nature quadratique du profil de température choisi alors que la distribution exacte dans la couche solidifiée devient oscillatoire après un certain temps qui dépend de la fréquence de la température de paroi. Néanmoins, même avec ce profil, la méthode prédit la position de l'interface de façon satisfaisante montrant qu'elle est moins sensible au profil de température substitué.

FIG. 5.5 – Evolution de la position adimensionnelle de l'interface Δ en fonction du temps adimensionnel τ pour $Ste = 0.01$ dans le cas où $F(\tau) = 1 - 0.5 \sin(\frac{\pi}{2}\tau)$. (Solution exacte pour $F = 1$ en pointillés).

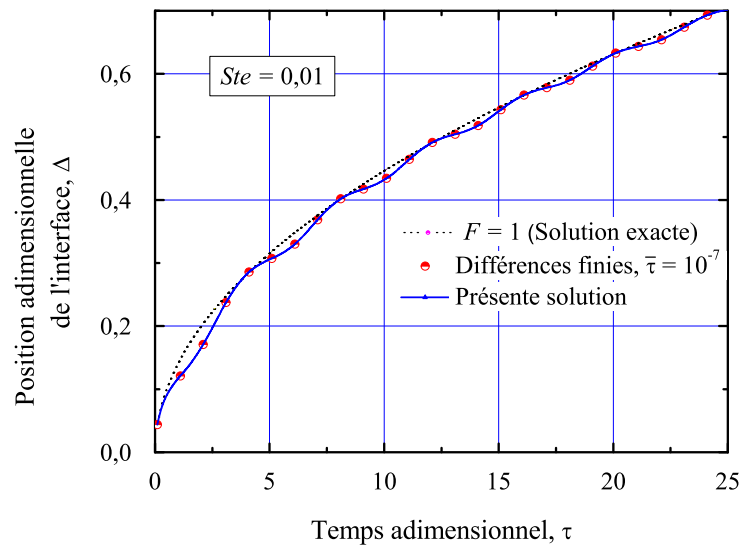


FIG. 5.6 – Evolution de la position adimensionnelle de l'interface Δ en fonction du temps adimensionnel τ pour $Ste = 0.1$ dans le cas où $F(\tau) = 1 - 0.5 \sin(\frac{\pi}{2}\tau)$. (Solution exacte pour $F = 1$ en pointillés).

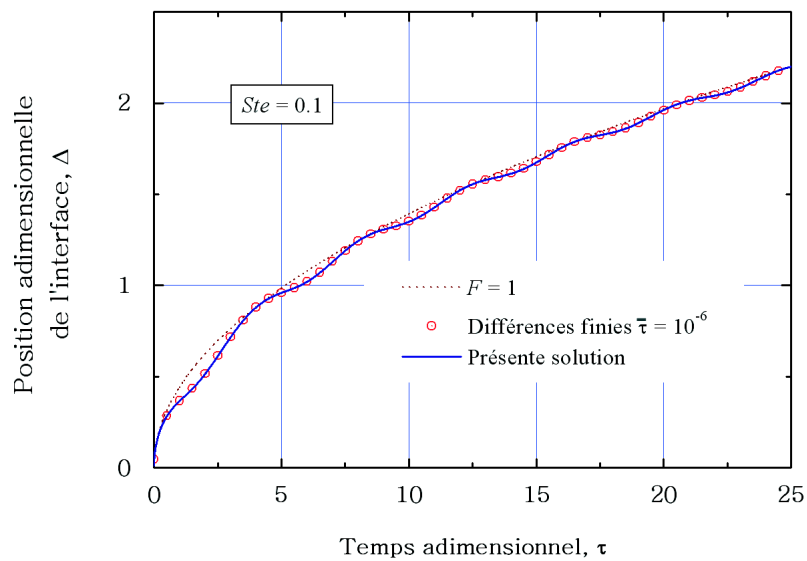
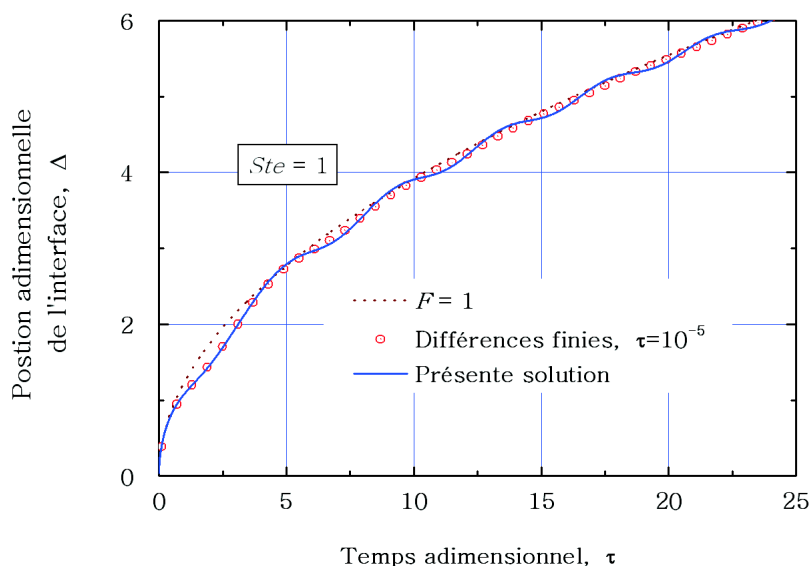


FIG. 5.7 – Evolution de la position adimensionnelle de l'interface Δ en fonction du temps adimensionnel τ pour $Ste = 1$ dans le cas où $F(\tau) = 1 - 0.5 \sin(\frac{\pi}{2}\tau)$. (Solution exacte pour $F = 1$ en pointillés).



5.5 Conclusion

Une approche semi-analytique est développée dans cette étude, son application au problème classique de Stefan a permis d'obtenir de nouvelles expressions analytiques pour la constante de solidification. Ces dernières, comparées à la solution exacte de Stefan, donnent des résultats très précis sans effort numérique. Elles peuvent constituer un outil pour fournir des solutions de démarrage pour les codes numériques. La méthode est appliquée par la suite au problème de Stefan avec température de paroi variable. En plus des solutions fournies sous forme d'équations différentielles ordinaires, elle a permis également une expression analytique pour suivre le mouvement de l'interface. La comparaison des résultats numériques obtenus avec ceux donnés par une méthode numérique d'immobilisation d'interface, montre que les solutions concordent parfaitement, aussi bien pour une variation linéaire que sinusoidale de la température appliquée à la surface d'échange.

Enfin, l'étude montre clairement que la technique de la double intégration améliore effectivement et de façon notable la solution de la méthode de l'intégrale de l'énergie de Goodman. Son développement à partir d'un modèle formulé selon un domaine variable permet son extension [82] aux problèmes de Stefan à deux phases qui tiennent compte de la surchauffe de la phase subissant le changement de phase.

Conclusion Générale et Perspectives

L'objectif principal, fixé dans cette étude, a été la mise en œuvre d'une approche analytique précise, qui permet de développer des solutions explicites, pour le suivi du mouvement du front de changement de phase, dans un problème de Stefan à une phase avec température de paroi variable.

Le choix de la méthode de l'intégrale double, qui associe remarquablement la précision à la simplicité, a permis de fournir trois solutions. Les différentes validations effectuées ont toutes montré un bon comportement de l'approche proposée malgré l'utilisation de profils de température de forme simple. De surcroît, l'application de cette technique au problème classique de Stefan a permis d'obtenir de nouvelles expressions de la constante de solidification purement analytiques. Leur précision, comparative-ment à la solution exacte, permet d'éviter ainsi la procédure numérique requise par cette dernière.

L'approche a permis également de fournir une solution purement analytique pour le mouvement du front mobile dans le cas du problème avec température de paroi variable. En absence de solutions exactes, permettant de valider la présente approche, un schéma numérique précis a été développé à partir de la méthode à pas d'espace variable. La confrontation des résultats a montré l'efficacité de l'approche.

Ces premiers résultats encourageants, nous permettent à présent d'envisager un certain nombre de perspectives parmi lesquelles nous citons

- L'extension de l'approche aux problèmes de Stefan à deux phases. Les transferts de chaleur dans la phase subissant la transformation d'état seront pris en compte.
- L'utilisation de l'équation intégrale obtenue (5.12), à la place de l'équation (3.9) (§3.3.1.a), comme outil de prédiction du pas de temps afin d'améliorer la vitesse de convergence de la méthode numérique à pas de temps variable.

- L'application de la méthode au problème d'évaporation d'un mélange liquide-gaz¹. En effet, dans bien des cas, le problème est modélisé par l'équation de diffusion de la matière de même type que celle considérée dans cette étude.

$$\frac{\partial N}{\partial \tau} = Le \frac{\partial^2 N}{\partial \eta^2}; \quad 0 \leq \eta \leq \Delta(\tau)$$

N est la concentration et Le est le nombre de Lewis. La solution servira d'outil pour fournir de solution de démarrage et surtout d'assise pour l'étude des instabilités.

¹Ce travail est déjà entamé avec Dr. P. Colinet du Centre de Recherche en Microgravity (MRC, ULB, Belgique)

Bibliographie

- [1] **H. Schlichting.** *Boundary layer theory.* Mc Graw Hill, New York, 6th edition, 1968.
- [2] **V. N. Volkov and V. K. Li-Orlov.** A refinement of the integral method in solving the heat conduction equation. *Heat Transfer. -Soviet Res.*, **2** :41–47, 1970.
- [3] **B. T. F. Chung and L. T. Yeh.** Analysis of heat transfer in slabs with variable properties subjected to radiation and convection. *ASME*, 1975. Paper n° **75-WA/HT-67**.
- [4] **T. F. Zien.** A new integral calculation of skin friction on a porous plate. *AAIA J.*, **9** :1423–1425, 1971.
- [5] **T. F. Zien.** Skin friction on porous surfaces calculated by a simple integral method. *AAIA J.*, **10** :1267–1268, 1972.
- [6] **T. F. Zien.** Approximate analysis of heat transfer in transpired boundary layers with effects of Prandtl number. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **19** :513–521, 1976.
- [7] **J. Sucec.** Extension of modified integral method to boundary conditions of prescribed surface heat flux. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **22** :771–774, 1979.
- [8] **J. Sucec.** The double integral method applied to separation calculation. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **38** :2771–2777, 1995.
- [9] **M. Elmas.** On the solidification of a warm liquid flowing over a cold wall. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **13** :1060–1062, 1970.
- [10] **T. R. Goodman.** Application of integral methods to transient nonlinear heat transfer. *Adv. in Heat Transfer*, **1** :51–122, 1964.
- [11] **T. R. Goodman.** The heat balance integral and its application to problems involving a change of phase. *Trans. ASME J. of Heat Transfer*, **80** :335–343, 1958.
- [12] **B. Sarler.** Stefan’s work on solid-liquid phase changes. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, **16** :83–92, 1995.
- [13] **H.S. Carslaw and J.C. Jaeger.** *Conduction of heat in solids.* Oxford University Press, New York, 1967.
- [14] **H.G. Landau.** Heat conduction in a melting solid. *Quart. J. Mech. Appl. Math.*, **8** :81–94, 1950.
- [15] **J. Crank.** *Free and moving boundary problems.* Clarendon Press, Oxford, 1984.
- [16] **M.S. El-Genk and A.W. Cronenberg.** Some improvements to the solution of Stefan-like problems. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **22** :167–170, 1979.
- [17] **M. Mennig and M.N. Özişik.** Coupled integral equation approach for solving melting or solidification. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **28** :1481–1485, 1985.
- [18] **J. Caldwell and Y.Y. Kwan.** On the perturbation method for the Stefan problem with time-dependent boundary conditions. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **46** :1497–1501, 2003.

- [19] **R. S. Gupta** and **D. Kumar**. Variable time-step methods for one-dimensional Stefan problem with mixed boundary condition. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **24** :251–259, 1981.
- [20] **R. S. Gupta** and **D. Kumar**. A modified variable time-step method for the one-dimensional Stefan problem. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, **23** :101–108, 1980.
- [21] **S. Savović** and **J. Caldwell**. Finite difference solution of one-dimensional Stefan problem with periodic boundary conditions. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **46** :2911–2916, 2003.
- [22] **J. B. J. Fourier**. Extrait d'un mémoire sur le refroidissement du globe terrestre. *Bull. Sci. par la société Philomatique de Paris*, 1820.
- [23] **G. Lamé** et **E. Clapeyron**. Mémoire sur la solidification par refroidissement d'un globe liquide. *Ann.. Chem. Phys.*, **47** :250–256, 1831.
- [24] **V. J. Lunardini**. Permafrost formation time. CRREL Report **85-8**, US Army Corps of Engineers, April 1995.
- [25] **Ch. Zhao** and al. An equivalent algorithm for simulating thermal effects of magma intrusion problems in porous rocks. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **192** :3397–3408, 2003.
- [26] **C. K. Folland** and al.. Observed climate variations and change. In *Climate Change, The IPCC Scientific Assesment*. Combridge University Press, 1990.
- [27] **ACIA**. Impacts of warming arctic : Arctic climate impact assesment. Technical report, Cambridge University Press, 2004. (www.acia.uaf.edu).
- [28] **M. Akyurt** and al.. Freezing phenomena in ice-water systems. *Energy Conversion and Management*, **43** :1773–1789, 2002.
- [29] **H. Zhongjie** and al. Numerical simulation and analysis for quick-frozen food processing. *J. of Food Engrg.*, **60** :267–273, 2003.
- [30] **A. I. Fedorchenko** and **A. A. Chernov**. Simulation of the microstructure of a thin metal layer quenched from a liquid state. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **46** :921–929, 2003.
- [31] **B. Zalba** and al. Review on thermal energy storage with phase-change : meterials, heat transfer analysis and applications (Review). *Appl. Thermal Engrg.*, **23** :251–283, 2003.
- [32] **A. Saito**. Recent advances in research on cold thermal energy storage (Review). *Int. J. of Refrigeration*, **25** :177–189, 2002.
- [33] **M. Storti**. Numerical modeling of ablation phenomena as two-phase Stefan problem. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **38** :2843–2854, 1995.
- [34] **M. S. El-Genk** and **A. W. Cronenberg**. An assessment of fuel freezing and drainage phenomena in a reactor shield plug following a core disruptive accident. *Nuclear Engineering and Design*, **47** :195–225, 1978.
- [35] **M. S. El-Genk**. Molten fuel radial motion and cladding melting during a PCM event in LWRs. *Nuclear Engineering and Design*, **54** :349–377, 1979.
- [36] **R. Ghafouri-Azar** and al. Interactions between molten metal droplets impinging on a solid surface. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **46** :1395–1407, 2003.
- [37] **S. Haferl** and **D. Poulikakos**. Experimental investigation of the transient impact fluid dynamics and solidification of a molten microdroplet pile-up. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **46** :535–550, 2003.
- [38] **A. S. Wood** and **S. Kutluay**. Numerical modeling of ablation phenomena as two-phase Stefan problem. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **38** :1831–1840, 1995.

- [39] **D. Willis** and **X. Xu**. Heat transfer and phase change during picosecond laser ablation of nickel. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **45** :3911–3918, 2002.
- [40] **R. Brockmann** and al. Calculation of laser-induced temperature field on moving thin metal foils in consideration of stefan problem. *Optics and Laser Technology*, **35** :115–122, 2003.
- [41] **R. V. Devireddy** and al. Measurement and numerical analysis of freezing in solutions enclosed in a small container. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **45** :1915–1931, 2002.
- [42] **C. D. Ho** and **C. K. Wang**. Producing chilled air in cool thermal discharge systemes with air flowing over an ice surface by complete removal of melt. *Renewable Energy*, **27** :223–236, 2002.
- [43] **H. Weber**. *Die partiellen differential-gleichungen der mathematischen physik, Zweites buch : warmeleitung*, chapter 49. Vordringen des Frostes, Vieweg und Sohn, Braunschweig, 2nd edition, 1901.
- [44] **J. Stefan**. Über die theorie der eisbildung, insbesondere uber die eisbildung in polar-meere. *Ann.. Phy. Chem.*, **42** :226–286, 1891.
- [45] **H. Sandner**. Josef Stefan, 1835-1893. *Int. Comm. in Heat and Mass Tansfer*, **16** :1–14, 1984.
- [46] **D. Delaunay**. *Etude du couplage convection naturelle-conduction avec changement de phase : Application au stockage périodique de l'énergie*. Thèse de Doctorat Es Sciences, U.F.R des Sciences de l'Université de Nantes, France, 1985.
- [47] **D. Gobin**. Rôle de la convection thermique dans les processus de fusion-solidification. modélisation numérique et thermique. In *Ateliers de l'Ecole d'été GUT-CET*, France, 19 Juin-4 Juillet 1985. Institut d'Etudes Scientifiques de Cargèse.
- [48] **O. Bertrand** and al. Melting driven by natural convection. -A comparaison exercices : first results-. *Int. J. Therma. Sci.*, **38** :5–26, 1999.
- [49] **R. Ramachandran**, **J.P. Gupta**, and **Y. Jaluria**. Two dimensional solidification with natural convection in the melt and convectif and radiatif boundary conditions. *Num. Heat Transfer*, **4** :469–484, 1981.
- [50] **M. Okada**. Analysis of heat transfer during melting from a vertical wall. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **27** :2057–2066, 1984.
- [51] **N.W. Hale** and **R. Viskanta**. Photographic observation of the liquid/solid interface motion during melting of a solid heated from an isothermal wall. *Letters in Heat Mass Transfer*, **5** :329–337, 1978.
- [52] **P.D. Van Buren** and **R. Viskanta**. Interforemetric measurement of heat transfer during melting from a vertical surface. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **23** :568–571, 1980.
- [53] **A. S. Wood**. A new look at the heat balance integral method. *Appl. Math. Modelling*, **25** :815–824, 2001.
- [54] **F. Mosally**, **A. S. Wood**, and **A. Al-Fhaid**. A exponential heat balance integral method. *Appl. Math. Comput.*, **130** :87–100, 2002.
- [55] **F. Mosally**, **A. S. Wood**, and **A. Al-Fhaid**. On the convergence of the heat balance integral method. *Appl. Math. Modelling*, **29** :903–912, 2005.
- [56] **S. Kutluay**, **A.R. Bahadir**, and **A. Özdeş**. The numerical solution of one-phase Stefan problem. *J. Comput. Appl. Math.*, **81** :135–144, 1997.
- [57] **S. Kutluay** and **A. Esen**. An isothermal migration formulation for one-phase Stefan problem with a time-dependent Neumann condition. *Appl. Math. Comput.*, **150** :59–67, 2004.

- [58] **A. Esen** and **S. Kutluay**. A numerical solution of the stefan problem with a Neumann-type boundary condition by enthalpy method. *Appl. Math. Comput.*, **148** :321–329, 2004.
- [59] **S. Kutluay**. Numerical schemes for one-dimensional Stefan-like problems with a forcing term. *J. Comput. Appl. Math.*, **168** :1159–1168, 2005.
- [60] **A.K. Verma**, **S. Chandra**, and **B.K. Dhindaw**. An alternative fixed grid method for solution of the classical one-phase Stefan problem. *App. Math. and Comput.*, **158** :573–584, 2004.
- [61] **B. Noble**. Heat balance methods in melting problems. In W.R. Hodgkins J.K. Ockendon, editor, *Moving Boundary Problems in Heat Flow and Diffusion*, Oxford, 1974. Clarendon Press.
- [62] **G. E. Bell**. A refinement of the heat balance integral applied to a melting problem. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **21** :1357–1362, 1978.
- [63] **V. R. Voller** and **M. Cross**. Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **24** :545–556, 1981.
- [64] **V.R. Voller** and **C.R. Swaminathan**. General source-based method for solidification phase change. *J. Numer. Heat Mass Transfer*, **19** :175–189, 1991.
- [65] **K. Morgan**, **R. W. Lewis**, and **O. C. Zienkiewicz**. An improved algorithm for heat conduction problems with phase change. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, **12** :1191–1195, 1978.
- [66] **V.R. Voller**, **C.R. Swaminathan**, and **B.G. Thomas**. Fixed grid techniques for phase change problems : A review. *Int. J. Numer. Meth. in Engng.*, **30** :875–898, 1990.
- [67] **L. Clavier**. *Résolution numérique du problème de Stefan sur un maillage fixe - Définition d'une méthode aux volumes de contrôle utilisant un suivi de front*. Thèse de Doctorat, Université de Bordeaux I, France, 1993.
- [68] **S. Couturier**. *Contribution à l'étude des transferts conjugués en présence de changement de phase par une méthode de collocation utilisant l'approximation diffuse*. Thèse de Doctorat, Université de Poitiers, France, 1999.
- [69] **A.A. Samaraski**, **P.N. Vabishchevich**, **O.P. Iliev**, and **A.G. Churbano**. Numerical simulation of convection/diffusion phase change problems : A review. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **36** :4095–4106, 1993.
- [70] **J. Crank**. Two methods for the numerical solution of moving boundary problems in diffusion and heat flow. *Quart. J. Mech. Appl. Math.*, **10** :220–231, 1957.
- [71] **W.D. Murray** and **F. Landis**. Numerical and machine solutions of the transient heat conduction problems involving melting or freezing. *J. Heat Transfer (C)*, **81** :106–112, 1959.
- [72] **S.V. Patankar**. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere, Washington DC, New York, 2nd edition, 1980.
- [73] **J. Douglas** and **T. M. Callie**. On the numerical integration of a parabolic differential equation subject to a moving boundary condition. *AFS Cast Metals Res.*, **10** :26–29, 1974.
- [74] **J. S. Goodling** and **M. S. Khader**. Inward solidification with a convective boundary condition. *ASME J. Heat Transfer*, **96** :114–115, 1974.
- [75] **R.C. Dix** and **J. Cizek**. The isotherm migration method for transient heat conduction analysis. In 4th *Int. Heat Transfer Conf.*, Paris, 1970. Heat Transfer, volume **1**, Elsevier, Amsterdam.

- [76] **F. L. Chernousko.** Solution of non-linear heat conduction problems in media with phase changes. *Int. J. Chem. Engng.*, **10** :42–48, 1970.
- [77] **J. Crank** and **T. Özis.** Numerical solution of free boundary problem by interchanging dependent and independent variables. *J. Inst. Math. Appl.*, **26** :77–85, 1970.
- [78] **A. S. Wood.** A note on the use of the isotherm migration method. *J. Comput. Appl. Math.*, **36** :133–147, 1991.
- [79] **T. R. Goodman.** The heat balance integral-further considerations and refinements. *Trans. ASME J. of Heat Transfer*, **83** :83–88, 1961.
- [80] **V. N. Volkov.** A refinement of the Karman-Pohlhausen integral method in boundary layer theory. *J. Engng. Phys.*, **9** :371–374, 1965.
- [81] **N. Sadoun, E. K. Si-Ahmed,** and **J. Legrand.** A refined exponential heat balance integral method for one-phase stefan problem. In *The Second International Conference on Thermal Engineering : Theory and Applications (ICTEA06)*, Al-Ain (UAE), 03-06 January 2006.
- [82] **N. Sadoun, E. K. Si-Ahmed,** and **P. Colinet.** On the refined integral method for the one-phase stefan problem with time-dependent boundary conditions. *Appl. Math. Model.*, **30** (6) :531–544, 2006.
- [83] **B. Démidovitch** and **I. Marron.** *Eléments de Cacul Numérique.* MIR Editions, Moscou, 1973.
- [84] **W. Kutta.** Beitrag zur naherungsweisen integration totaler differentialgleichunge. *Zeit. Math. Physik*, **46** :435–453, 1901.
- [85] **S. Gill.** A process for the step-by-step integration of differential equations in an automatic digital computing machine. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, **47** :96–108, 1951.
- [86] **E. Fehlberg.** Classical fifth-, sixth-, seventh- and eighth-order runge-kutta formulas with step size control. *Computing*, **4** :93–106, 1969.
- [87] **C. W. Gear.** *Numerical initial value problems in ordinary differential equations.* NJ : Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, 1971.
- [88] **J.R. Cash** and **A. H. Karp.** A variable order Runge-Kutta method for initial value problems with rapidly varying right-hand sides. *ACM Transactions on Mathematical Software, j- TOMS*, **16** :201–222, 1990.
- [89] **E. Fehlberg.** Low-order classical Runge-Kutta formulas with stepsize control and their application to some heat transfer problems. Technical report, 1969. NASA TR R-315.
- [90] **E. Fehlberg.** Some old and new Runge-Kutta formulas with stepsize control and their error coefficients. *Computing*, **34** :265–270, 1985.
- [91] **J. H. Mathews** and **K. K. Fink.** *Numerical methods using Matlab.* Prentice-Hall Inc., New Jersey, 4th edition, 1973.
- [92] **J. Stor** and **R. Burlirsch.** *Introduction to numerical analysis.* Springer-Verlag, New York, 1980.
- [93] **Ch. Tsitouras** and **S. N. Papakostas.** Cheap error estimation for Runge-Kutta methods. *SIAM J. Sci. Comput.*, **20** :2067–2088, 1999.
- [94] **W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vettering,** and **B. P. Flannery.** *Numerical recipes in FORTRAN, The art of scientific computing.* Cambridge University Press, New York, 2nd edition, 1992.

Table des figures

1.1	Evolution du front de solidification pour différentes positions verticales [46].	11
1.2	Résultats de simulation numérique [47] : Influence de la convection naturelle sur la fraction fondue F en fonction du temps t pour $Ste = 0.2$ dans le cas des problèmes à une phase (courbes continues) et à deux phases en (courbes discontinues)	12
1.3	Evolution du front de fusion pour différentes positions verticales [46].	13
2.1	Volume de contrôle Ω contenant l'interface solide/liquide de surface extérieure $\Sigma = \Sigma_l \cup \Sigma_s$	24
2.2	Elément de surface sur le front de changement de phase solide/liquide	31
2.3	Modèle physique de solidification plane avec température de paroi, $T_0(t)$, variable	32
3.1	Localisation de l'interface dans le domaine discrétisé selon le modèle de Crank	37
3.2	Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par la méthode numérique de Crank	39
3.3	Localisation de l'interface dans le domaine discrétisé selon le modèle de Murray et Landis	40
3.4	Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par la méthode numérique de Murray et Landis	41
3.5	Evolution de l'erreur relative et du paramètre de localisation de l'interface, p , dans deux mailles voisines selon la procédure de Murray et Landis pour $Ste = 1$ et $\bar{\tau} = 0,0015$	42
3.6	Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par la méthode numérique de Verma et col.[60]	43
3.7	Evolution de l'erreur relative et du paramètre de localisation de l'interface, p , dans deux mailles voisines selon la procédure de Verma et col. pour $Ste = 1$ et $\bar{\tau} = 0,0015$	44
3.8	Discrétisation du domaine η - τ avec un pas de temps dépendant de la position de l'interface	45
3.9	Discrétisation du domaine physique avec fixation de l'interface à un nœud du maillage dans un domaine variable	50
3.10	Discrétisation du domaine physique avec fixation de l'interface à un nœud du maillage dans un domaine fixe	51
3.11	Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par les deux méthodes numériques variant le pas d'espace pour différents nombres de Stefan	53
3.12	Maillage du domaine (θ, τ) à l'instant τ^j par la méthode de migration d'isotherme	54
3.13	Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par la méthode numérique de migration d'isothermes pour différentes valeurs du nombre de Stefan, Ste	55

3.14	Evolution de l'erreur relative sur la position de l'interface donnée par les méthodes numériques variant le pas d'espace et la méthode modifiée pour différents valeur du nombre de Stefan, Ste	59
4.1	Erreur relative sur la position de l'interface fournie par les solutions analytiques de Goodman	64
4.2	Erreur relative sur la position de l'interface fournie par les solutions analytiques de Wood	67
4.3	Erreur relative sur la position de l'interface en fonction du nombre de Stefan telle que fournie par les solutions de Mosally et col.	68
4.4	Erreur relative sur la position de l'interface en fonction du nombre de Stefan telle que fournie par la méthode de l'intégrale de l'énergie et l'approche de l'équation intégrale couplée de Mennig et Özişik [17]	70
4.5	Erreur relative sur la position de l'interface fournie par la méthode intégrale de l'énergie appliquée par subdivision du domaine	72
5.1	Modèle physique de problème de Stefan à une phase considéré par Elmas [9] .	76
5.2	Modèle physique de problème de Stefan à une phase considéré par El-Genk et Cronenberg [16]	76
5.3	Evolution de l'erreur relative fournie par les méthodes développées sur la base de l'intégrale de l'énergie de Goodmann, sur la position de l'interface (ou la constante de solidification, λ), en fonction du nombre de Stefan, Ste	86
5.4	Evolution de la position adimensionnelle de l'interface Δ en fonction du temps adimensionnel τ pour trois valeurs du nombre de Stefan, Ste , dans le cas où $F(\tau) = 1 - 0.2\tau$. (Solution exacte pour $F = 1$ en pointillés)	89
5.5	Evolution de la position adimensionnelle de l'interface Δ en fonction du temps adimensionnel τ pour $Ste = 0.01$ dans le cas où $F(\tau) = 1 - 0.5 \sin(\frac{\pi}{2}\tau)$. (Solution exacte pour $F = 1$ en pointillés)	91
5.6	Evolution de la position adimensionnelle de l'interface Δ en fonction du temps adimensionnel τ pour $Ste = 0.1$ dans le cas où $F(\tau) = 1 - 0.5 \sin(\frac{\pi}{2}\tau)$. (Solution exacte pour $F = 1$ en pointillés)	91
5.7	Evolution de la position adimensionnelle de l'interface Δ en fonction du temps adimensionnel τ pour $Ste = 1$ dans le cas où $F(\tau) = 1 - 0.5 \sin(\frac{\pi}{2}\tau)$. (Solution exacte pour $F = 1$ en pointillés)	92
A.1	Jošef Štefan, 1835-1893	i
B.1	Graphes de $f(\lambda) = \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) - \frac{Ste}{\sqrt{\pi}}$ montrant l'unicité de la solution pour différentes valeurs du nombre de Stefan, Ste	v
B.2	Evolution de la constante de solidification, λ , en fonction du nombre Stefan, Ste . (Solution exacte de Stefan en trait plein et quasi-stationnaire en trait discontinu)	v
B.3	Evolution du facteur de correction, χ , en fonction du nombre Stefan, Ste . . .	vi

Liste des tableaux

1.1	Résultats comparatifs des différentes méthodes sur la localisation de l'interface solide/liquide pour trois nombres de Stefan et dans le cas d'une température de paroi donnée par : $F(\tau) = 1 - 0.2\tau$	21
2.1	Définition des variables adimensionnelles	32
3.1	Résultats comparatifs de la vitesse de convergence des trois procédures de mise en oeuvre de la méthode à pas de temps variable. ($Ste = 1$ et $\bar{\eta} = 0.01$)	49
3.2	Ordres de grandeur de l'erreur relative sur la localisation de l'interface telle qu'elle est donnée par les différents modèles explicites pour différents nombres de Stefan, Ste	56
4.1	Différentes possibilités de mise en oeuvre de la méthode de l'intégrale d'énergie	66
4.2	Différentes expressions analytiques de la constante de solidification, λ , disponibles dans la littérature	71
5.1	Expressions analytiques de la constante de solidification obtenues à partir de la méthode de la double intégrale	84
5.2	Résultats numériques comparatifs des valeurs fournies par les méthodes de l'intégrale de Goodman et de l'intégrale double pour la constante de solidification λ , pour différentes valeurs du nombre de Stefan, Ste	85
5.3	Résultats numériques comparatifs des valeurs fournies, pour différentes valeurs du nombre de Stefan, Ste , par la méthode de l'intégrale de Goodman appliquée par subdivision du domaine [55] et par la présente solution pour la constante de solidification λ	85
5.4	Résultats numériques concernant la localisation de l'interface par les solutions développées dans la présente étude et la solution numérique aux différences finies développée dans cette étude (§3.4), pour trois valeurs du nombre de Stefan Ste et dans le cas d'une température de paroi donnée par : $F(\tau) = 1 - 0.2\tau$.	88
D.1	Les valeurs numériques des paramètres proposés par Fehlberg pour la méthode RKF45	xiii
D.2	Les valeurs numériques des paramètres proposés par Cash et Karp pour améliorer RKF45	xiv

Annexe A

Biographie de J. Stefan

Jožef Štefan ou Stephan (FIG.A.1) est né le 24 Mars 1835 de nationalité Slovène. Après ses études secondaires dans sa ville natale, Klagenfurt, il s'inscrit à l'université de Vienne (1885), en Autriche. L'atmosphère cosmopolite de la Vienne impériale favorisa chez le jeune Jožef la curiosité du vaste monde, curiosité qui l'amena à s'intéresser au début aux sciences humaines en étudiant le lyrique et la spécificité prosodique de la langue Slovène. Mais rapidement, il se découvrit une passion pour les mathématiques et les sciences physiques et fit preuve d'un insatiable appétit scientifique.

FIG. A.1 – Jožef Štefan, 1835-1893



Reçu Docteur après deux années d'étude seulement, Stefan¹ devint maître de conférences à 22 ans, fut nommé professeur de l'université de Vienne à 25 ans et directeur de l'institut de physique de la même université à 30 ans. Membre de l'académie des arts et sciences de Vienne, il s'occupa du secrétariat de la section mathématiques et sciences naturelles durant la décennie 1875-1884 et devint vice-président de l'académie à partir de 1885. Il occupa ce poste jusqu'à sa mort le 7 janvier 1893.

Stefan fut, de l'avis de tous ceux qui l'ont connu ou/et lu, un étudiant brillant, un excellent conférencier et l'un des chercheurs les plus doués en étant à la fois, un expérimentateur exceptionnel et un théoricien reconnu. Le scientifique multidisciplinaire, qu'il fut, s'intéressa

¹Dans ce document, nous utiliserons la transcription Stefan utilisée dans la littérature au lieu de Štefan

à la fois à l'acoustique, la thermodynamique, la mécanique du solide, l'optique, l'électricité et le magnétisme. L'originalité de certains de ses travaux fait qu'ils constituent depuis une base et une référence dans leurs domaines. C'est ainsi que le nom de Stefan est associé, avec celui de Ludwig Boltzmann, à la loi exprimant l'équivalence de la température avec l'énergie². On désigne aussi le paramètre de proportionnalité dans l'expression de cette loi par constante de radiation de Stefan-Boltzmann. Depuis la publication de son premier papier [44] concernant l'évolution de l'épaisseur de la glace polaire, son nom est également associé aux problèmes de transferts dans un domaine déformable. Enfin, le paramètre adimensionnel qui caractérise le phénomène de solidification et fusion est appelé *nombre de Stefan* et exprime le rapport entre la chaleur latente et la chaleur sensible du matériau fusible.

²flux d'énergie émis par un corps noir en fonction de la température : $\Phi = \sigma T^4$ où $\sigma = 5,670400.10^{-8} \text{ J.K}^{-4}.\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$

Annexe B

Solution Analytique Exacte de Stefan

Le problème classique de Stefan à une phase concerne la solidification ou la fusion d'un matériau fusible, occupant le demi-espace $x \geq 0$ et se trouvant initialement à son point de changement de phase, T_m . Le changement de phase est initié à partir de la surface d'échange, $x = 0$, en portant instantanément, et en maintenant, la température de celle-ci à une valeur $T_r < T_m$. En adoptant les variables réduites définies par TAB.2.1, l'équation de l'énergie et les conditions initiales et aux limites sont données par :

Equation de la chaleur, $0 < \eta < \Delta(\tau)$ et $\tau > 0$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} \quad (\text{B.1})$$

Conditions aux limites, $\tau > 0$

$$\theta(\eta, \tau) = 1; \quad \eta = 0 \quad (\text{B.2})$$

$$\theta(\eta, \tau) = 0; \quad \eta = \Delta(\tau) \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta} = -\frac{1}{Ste} \frac{d\Delta}{d\tau}; \quad \eta = \Delta(\tau) \quad (\text{B.4})$$

Conditions initiales, $\tau = 0$

$$\Delta(\tau) = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$\theta(\eta, \tau) = 0; \quad \eta \neq 0 \quad (\text{B.6})$$

B.1. Solution de Stefan

En introduisant la variable de similitude $\xi = \frac{\eta}{2\sqrt{\tau}}$, nous pouvons transformer l'équation de diffusion de sa forme aux dérivées partielles (éq. B.1) en une équation différentielle ordinaire de second ordre (éq.B.7) . Les équations (B.1-6) s'expriment avec la nouvelle variable par :

$$\frac{d^2 \theta}{d\xi^2} + 2\xi \frac{d\theta}{d\xi} = 0 \quad (\text{B.7})$$

$$\theta(\xi) = 1; \quad \xi = 0 \quad (\text{B.8})$$

$$\theta(\xi) = 0; \quad \xi = \frac{\Delta(\tau)}{2\sqrt{\tau}} \quad (\text{B.9})$$

Dont l'intégration après séparation de variables, donne :

$$\frac{d\theta}{d\xi} = C_1 e^{-\xi^2} \quad (\text{B.10})$$

C_1 est une constante d'intégration. Compte tenu des conditions aux limites (éqs. B.8,9) et de la définition de la fonction erreur¹, désignée par *erf* (Annexe C.4), une seconde intégration fournit l'expression de la distribution de température. Soit en terme de variables (η, τ) :

$$\theta(\eta, \tau) = 1 - \frac{\text{erf}\left(\frac{\eta}{2\lambda\sqrt{\tau}}\right)}{\text{erf}(\lambda)} \quad (\text{B.11})$$

La substitution de ce profil dans l'équation de Stefan (B.4) montre que le bilan thermique à l'interface n'est vérifié, indépendamment du temps, que si la position de celle-ci varie en racine carrée du temps. En posant $\Delta(\tau) = 2\lambda\sqrt{\tau}$ dans cette équation, elle se réduit à l'équation transcendante suivante pour le paramètre λ communément appelé *constante de solidification* :

$$\lambda e^{\lambda^2} \text{erf}(\lambda) = \frac{Ste}{\sqrt{\pi}} \quad (\text{B.12})$$

B.2. Solution quasi-stationnaire

Les matériaux fusibles les plus usuels sont caractérisés par une chaleur latente de changement de phase très importante comparée à la chaleur spécifique. Ceci permet de négliger la chaleur cumulée dans la couche formée par rapport à la quantité de chaleur qui la traverse par conduction. La solidification est contrôlée, dans ce cas, par la conduction stationnaire dont la solution compte tenu des conditions aux frontières est :

$$\theta(\eta, \tau) = 1 - \frac{\eta}{\Delta} \quad (\text{B.13})$$

La substitution de ce profil dans l'équation de Stefan (B.4) fournit une équation différentielle ordinaire dont la solution est $\Delta^2 = 2Ste\tau$. Le paramètre λ est dans ce cas :

$$\lambda = \sqrt{\frac{Ste}{2}} \quad (\text{B.14})$$

Nous avons représenté ci-dessous la variation de la constante de solidification en fonction de l'inverse de la chaleur latente réduite, *Ste* (FIG.B.2). Le graphe fournit aussi bien la constante de solidification donnée par le problème de solidification contrôlée par la conduction transitoire que par la conduction stationnaire. Elle montre que pour des nombres Stefan faibles $Ste \leq 0.2$ les deux solutions sont pratiquement superposées.

¹ $\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-x^2} dx$

FIG. B.1 – Graphes de $f(\lambda) = \lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) - \frac{Ste}{\sqrt{\pi}}$ montrant l'unicité de la solution pour différentes valeurs du nombre de Stefan, Ste .

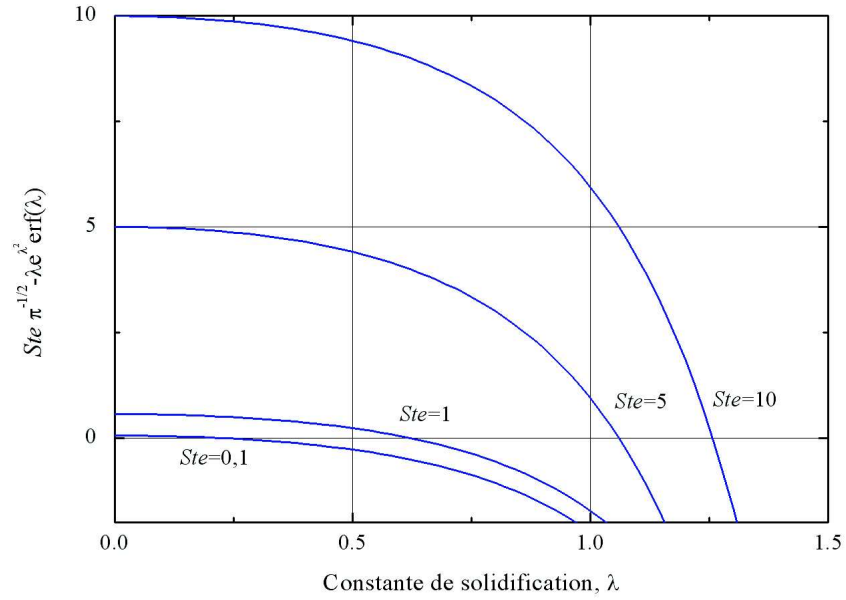
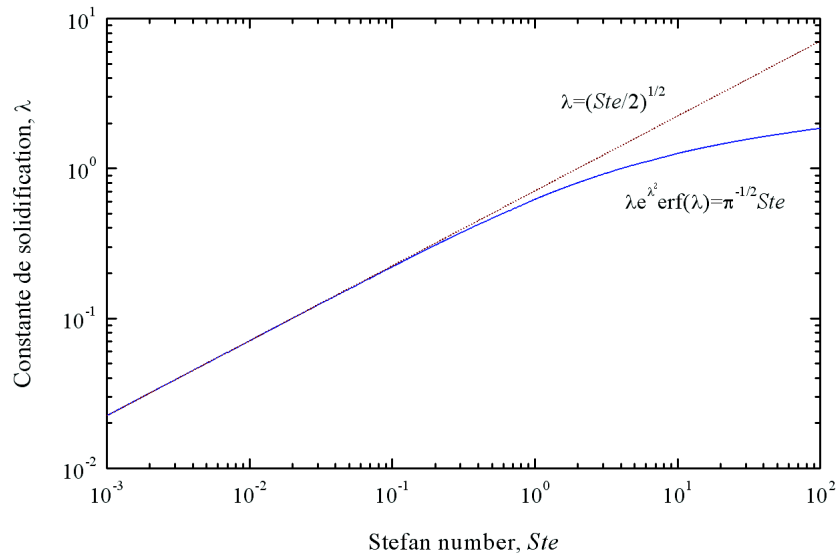


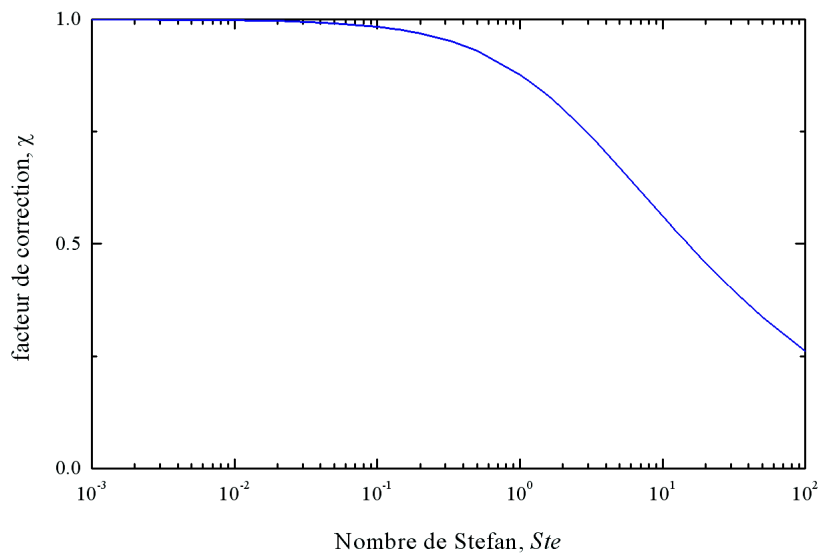
FIG. B.2 – Evolution de la constante de solidification, λ , en fonction du nombre Stefan, Ste . (Solution exacte de Stefan en trait plein et quasi-stationnaire en trait discontinu).



B.3. Facteur de correction

Afin d'avoir une idée sur les effets de la capacité calorifique sur le mouvement du front de solidification, nous introduisons dans l'analyse un facteur définissant le rapport des taux de solidification avec $(2\lambda\sqrt{\tau})$ ou sans $(\sqrt{2Ste}\sqrt{\tau})$ prise en compte de ces effets. On peut montrer que le facteur de correction, que nous désignons par χ , peut s'exprimer en fonction des constantes de solidification fournies par les équations (B.12) et (B.15). Soit

FIG. B.3 – Evolution du facteur de correction, χ , en fonction du nombre Stefan, Ste .



$$\chi = \lambda \sqrt{\frac{2}{Ste}} \quad (\text{B.15})$$

Le graphe donnant les variations du facteur de correction en fonction du nombre de Stefan (FIG.B.3) montre pour des valeurs inférieures à 0.01 de ce dernier, la position de l'interface peut être estimée analytiquement, avec une bonne précision, en considérant la valeur $\sqrt{\frac{Ste}{2}}\tau$. Le recours à une procédure numérique, nécessaire dans le cas de la solution de Stefan (éq.B.12), peut être évité.

Annexe C

Rappels Mathématiques

C.1 Développement en série de Taylor

Nous faisons souvent appel au développement d'une fonction f en série de Taylor. Il constitue un moyen très pratique pour approcher les solutions des équations mathématiques de la physique [83].

Le développement d'une fonction f , réelle ou complexe, indéfiniment dérivable en série de Taylor en un point x_0 ¹ est donné par la série entière suivante :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n \quad (\text{C.1})$$

dont la somme est égale à $f(x)$ et où $n!$ et $f^{(n)}$ désignent respectivement la factorielle de n et la dérivée *nième* de f .

De point de vue analyse numérique, cette représentation apporte des avantages considérables. En effet :

- i*) La fonction peut être approchée au voisinage d'un point $x = x_0 + h$ en considérant la somme partielle de la série (C.1).

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}h^n + R_n(h) \quad (\text{C.2})$$

où le reste $R_n(h)$ est donné par :

$$R_n(h) = \frac{f^{(n+1)}(x_0 + \theta h)}{(n+1)!}h^{n+1} \quad (0 < \theta < 1) \quad (\text{C.3})$$

- ii*) L'intégration et la différenciation de la fonction s'effectuent simplement en exécutant les opérations terme à terme et en considérant les sommes des termes obtenus.
- iii*) L'utilisation des outils de l'analyse complexe est rendue effective. En effet, les fonctions holomorphes constituent le pilier central de l'étude de l'analyse complexe et toute fonction analytique peut être prolongée de manière unique en une fonction holomorphe définie sur un disque ouvert dans le plan complexe.

¹si $x_0 = 0$ on parle de série Maclaurin

C.2 Formule d'interpolation de Lagrange

Soit $f_i = f(x_i)$ ($i = 0, 1, \dots, n$) les valeurs données de la fonction f pour les $n + 1$ valeurs de la variable indépendante $x \in [a, b]$. On se propose de trouver un polynôme $P_n(x)$ de degré inférieur ou égal à n qui interpole le fonction f aux points d'interpolation x_i du domaine $[a, b]$. Soit :

$$P_n(x_i) = f_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n) \quad (\text{C.4})$$

On trouve dans la littérature plusieurs formules permettant la détermination de l'expression de $P_n(x)$. Nous citons, entre autres, la première et la deuxième formule d'interpolation de Newton, celles de Gauss, de Stirling, de Bessel et enfin celle de Lagrange [83]. Contrairement aux autres, la formule d'interpolation de Lagrange peut être utilisée même quand les points d'interpolation ne sont pas équidistants. Elle s'exprime par :

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n f_i \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} \quad (\text{C.5})$$

$L_n(x) = P_n(x)$ désigne le polynôme d'interpolation de Lagrange.

L'erreur de la formule de Lagrange est donnée par :

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \Pi_{n+1}(x) \quad (\text{C.6})$$

où ξ dépend de x et appartient au domaine $[a, b]$ et

$$\Pi_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n) \quad (\text{C.7})$$

C.3 Formule de Leibniz de dérivation sous le signe d'intégration

La formule de Leibniz de dérivation d'intégrale, dont l'intégrande et les bornes dépendent d'un paramètre est très pratique. Elle est le résultat du théorème dont l'énoncé est :

Théorème :

Soient $f : \mathbf{R} \times \mathbf{T} \rightarrow \mathbf{R}$ et $g, h : \mathbf{T} \rightarrow \mathbf{R}$ des fonctions satisfaisant les hypothèses suivantes :

- 1 . f est continue sur $\mathbf{R} \times \mathbf{T}$.
- 2 . La dérivée partielle $(x, t) \mapsto \frac{\partial f}{\partial t}(x, t)$ existe, et est continue sur $\mathbf{R} \times \mathbf{T}$.
- 3 . g et h sont dérivables sur \mathbf{T} .

Alors la fonction $F : \mathbf{T} \rightarrow \mathbf{R}$, définie par $F(t) = \int_{g(t)}^{h(t)} f(x, t) dx$ existe, et est dérivable sur \mathbf{T} . De plus, sa dérivée est donnée par :

$$\frac{dF(t)}{dt} = \int_{g(t)}^{h(t)} \frac{\partial f}{\partial t}(x, t) dx + f(h(t), t) \frac{dh(t)}{dt} - f(g(t), t) \frac{dg(t)}{dt} \quad (\text{C.8})$$

On en déduit la formule de dérivation sous le signe d'intégration

$$\int_{g(t)}^{h(t)} \frac{\partial f}{\partial t}(x, t) dx = \frac{d}{dt} \int_{g(t)}^{h(t)} f(x, t) dx - f(h(t), t) \frac{dh(t)}{dt} + f(g(t), t) \frac{dg(t)}{dt} \quad (\text{C.9})$$

C.4 Fonction Erreur, erf

Dans un grand nombre de problèmes de la physique théorique, on est conduit à des équations différentielles admettant comme solutions particulières des fonctions spéciales souvent appelées *fonctions spéciales de la physique mathématique*. Leur évaluation nécessite des efforts numériques et des moyens informatiques. On les trouve souvent dans la littérature sous forme de tables et/ou graphes.

La fonction erreur, désignée par *erf*, fait partie de la classe de fonctions, étroitement liées aux polynômes orthogonaux classiques, dites *fonctions de deuxième espèce*. On la rencontre, par exemple, en résolvant l'équation de diffusion dans un milieu infini. Elle est définie par l'intégrale ou le développement suivant :

$$\begin{aligned} erf(x) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^{2k+1}}{(2k+1)k!} \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

et possède les propriétés suivantes :

$$erf(-x) = -erf(x) \quad (\text{C.11})$$

$$\frac{d}{dx} [erf(x)] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (\text{C.12})$$

Enfin, notons qu'une fonction d'erreur complémentaire, désignée par *erfc*, est définie par :

$$\begin{aligned} erfc(x) &= 1 - erf(x) \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Annexe D

Méthode d'Intégration Numérique

La modélisation mathématique des phénomènes physiques fournit des équations différentielles de plus en plus variées dont chaque type nécessite une résolution particulière. L'essor qu'ont connu les moyens informatiques, ces dernières années, ont permis le développement de nombreuses méthodes numériques souvent nécessaires, faute de l'existence de solutions analytiques.

Concernant les équations différentielles ordinaires, plusieurs schémas d'intégration numérique sont construits et disponibles dans la littérature. Nous citons, entre autres, les plus utilisés, à savoir : le schéma classique de Runge-Kutta d'ordre 4 (RK4) [84], Runge-Kutta-Gill (RKG) [85], Runge-Kutta-Fehlberg (RKF45) [86], prédicteur-correcteur (PECE) d'Adams [87], Runge-Kutta-Cash-Karp [88] et les schémas développés par Gear [87] pour les problèmes dits raides.

Les méthodes d'intégration à un pas de Runge-Kutta sont très sollicitées dans la pratique pour les avantages importants qu'elles présentent en calcul numérique. Aussi, elles sont incontournables pour produire, avec une bonne précision, des solutions de démarrage pour les méthodes d'intégration à pas multiple. Nous rappelons, dans ce qui suit, le principe de la méthode d'ordre 4 (RK4), qui est la plus utilisée, ainsi que la procédure proposée par Fehlberg [89, 90] pour l'optimisation du pas d'intégration et les corrections suggérées par Cash et Karp [88] pour rendre sa mise en œuvre plus efficace.

D.1 Méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, RK4

Soit à intégrer le système (D.1) de N équations de t^j à $t^{j+1} = t^j + h$

$$\begin{cases} \frac{dy_i}{dt} = f_i(t, y_1, y_2, \dots, y_N) \\ y_i^j = y_i(t = t^j); \quad \text{connus pour } i = 1, 2, \dots, N \end{cases} \quad (\text{D.1})$$

où f_i sont des fonctions explicitées en fonction de t et des fonctions $y_i(t)$, ($i = 1, 2, \dots, N$).

La méthode de Runge-Kutta propose des schémas d'intégration de différents ordres pour la solution du problème (D.1). Se basant sur les développements de Taylor (Annexe C1), la

méthode élimine les dérivées d'ordre supérieur en introduisant des valeurs intermédiaires des fonctions à intégrer. Entre autres méthodes proposées, la méthode RK4 qui se base sur un schéma d'ordre 4, explicite la solution sous la forme suivante :

$$y_i^{j+1} = y_i^j + \frac{1}{6} (k_1^i + 2k_2^i + 2k_3^i + k_4^i) \quad (\text{D.2})$$

dont l'erreur est d'ordre $O(h^5)$. Elle requière la détermination des valeurs de ces $4 \times N$ paramètres à chaque pas d'intégration :

$$\begin{aligned} k_1^i &= hf_i(t^j, y_1^j, y_2^j, \dots, y_N^j) \\ k_2^i &= hf_i(t^j + \frac{1}{2}h, y_1^j + \frac{1}{2}k_1^i, y_2^j + \frac{1}{2}k_1^i, \dots, y_N^j + \frac{1}{2}k_1^i) \\ k_3^i &= hf_i(t^j + \frac{1}{2}h, y_1^j + \frac{1}{2}k_2^i, y_2^j + \frac{1}{2}k_2^i, \dots, y_N^j + \frac{1}{2}k_2^i) \\ k_4^i &= hf_i(t^j + h, y_1^j + k_3^i, y_2^j + k_3^i, \dots, y_N^j + k_3^i) \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

La méthode présente des avantages importants :

- i*) La connaissance de la valeur en un point donné suffit pour amorcer l'intégration numérique ;
- ii*) Facilité de programmation ;
- iii*) Stabilité de la solution ;
- iv*) Modification simple du pas d'intégration.

Mais elle présente aussi deux inconvénients, qui peuvent constituer un handicap, dans le cas des certaines équations différentielles.

- i*) Important coût en temps de calcul.
- ii*) Difficulté d'estimation de l'erreur locale ;
- iii*) Unicité du pas d'intégration ;

Détermination du pas d'intégration

Le choix du pas d'intégration est déterminant pour la bonne mise œuvre de la méthode. L'important nombre d'évaluations de la fonction (éqs. D.3) que nécessite la méthode nous amène à éviter l'utilisation d'un pas trop petit. D'autant plus, à cause des erreurs d'arrondi, un pas réduit n'assure pas automatiquement une bonne précision. Il faut donc, trouver un pas optimum qui garantirait la précision d'une part et réduirait le coût en temps de calcul d'autre part.

La procédure, proposée pour optimiser ce pas, consiste à intégrer l'équation différentielle (D.1) de t^j à t^{j+1} en utilisant la méthode RK4 avec deux pas différents, h et $\frac{h}{2}$. On désigne par $y_i^{j+1(h)}$ et $y_i^{j+1(\frac{h}{2})}$ les solutions respectives et on effectue le test suivant :

$$\max_i \frac{|y_i^{j+1(h)} - y_i^{j+1(\frac{h}{2})}|}{|y_i^{j+1(h)}|} \leq \epsilon \quad (\text{D.4})$$

où ϵ est la tolérance relative définie au préalable. On réduit de moitié le pas d'intégration h si, au moins, deux solutions d'un $y_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, N$) sont trop éloignées l'une de l'autre (test

(D.4) non vérifié) et on continue l'intégration si, pour tous les $y_i(t)$, elles concordent (test (D.4) vérifié). La procédure est répétée jusqu'à optimiser le pas d'intégration pour utiliser la méthode et suivre ainsi l'évolution des fonctions $y_i(t)$.

D.2 Méthode de Runge-Kutta-Fehlberg, RKF45

Dans la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 (RK4) que nous venons de décrire au paragraphe précédent, le procédé d'optimisation du pas d'intégration augmente considérablement le coût en temps de calcul. Pour chaque test, nous devons effectuer en plus des $3 \times N$ intégrations (3 pour chaque fonction y_i), $11 \times N$ évaluations des fonctions f_i (éqs. D.2 et D.3). En outre, la procédure ne garantit pas le caractère optimum du pas obtenu pour la suite de l'intégration. C'est le cas, par exemple, quand cette dernière arrive dans un domaine où, au moins, une fonction présente une forte variation et pour laquelle le pas doit être réduit. Nous avons besoin donc, de contrôler le pas d'intégration à chaque étape afin de l'adapter aux variations des fonctions $y_i(t)$.

La procédure développée par Fehlberg [86], pour le contrôle et l'optimisation du pas d'intégration, réduit le nombre d'évaluations de fonctions de $5 \times N$ et de N le nombre d'intégrations. Pour estimer l'erreur commise à chaque itération, il propose d'intégrer le système d'équations (D.1) de t^j à t^{j+1} en utilisant le même pas d'intégration mais en faisant appel à deux méthodes de Runge-Kutta de différents ordres [89].

La première estimation de la solution est donnée par le schéma de Runge-Kutta d'ordre 4. Soit

$$\tilde{y}_i^{j+1} = y_i^j + \sum_{l=1}^5 \tilde{c}_l k_l^i + O(h^5) \quad (\text{D.5})$$

alors que la solution est déterminée à partir du schéma de Runge-Kutta d'ordre 5 dont l'expression est :

$$y_i^{j+1} = y_i^j + \sum_{l=1}^6 c_l k_l^i + O(h^6) \quad (\text{D.6})$$

où les $6 \times N$ paramètres suivants, valables pour les deux systèmes d'équation (D.5) et (D.6), sont évalués au préalable (les coefficients a_m , b_{ml} , c_m et \tilde{c}_m sont donnés ci-dessous, (TAB.D.1) :

$$\begin{aligned} k_1^i &= h f_i(t^j, y_1^j, y_2^j, \dots, y_N^j) \\ k_2^i &= h f_i(t^j + a_2 h, y_1^j + b_{21} k_1, y_2^j + b_{21} k_1, \dots, y_N^j + b_{21} k_1) \\ &\vdots \\ k_6^i &= h f_i(t^j + a_6 h, y_1^j + \sum_{l=1}^5 b_{6l} k_l, y_2^j + \sum_{l=1}^5 b_{6l} k_l, \dots, y_N^j + \sum_{l=1}^5 b_{6l} k_l) \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Ainsi, la méthode ne nécessite que $6 \times N$ évaluations de fonctions et $2 \times N$ intégrations.

La comparaison du résultat de ces deux intégrations (D.5) et (D.6) fournit une estimation de l'erreur de troncature locale commise sur chaque y_i^{j+1} . Soit :

$$\Delta_i = y_i^{j+1} - \tilde{y}_i^{j+1} = \sum_{l=1}^6 (c_l - \tilde{c}_l) k_l^i \quad (\text{D.8})$$

TAB. D.1 – Les valeurs numériques des paramètres proposés par Fehlberg pour la méthode RKF45.

i	a_i	b_{i1}	b_{i2}	b_{i3}	b_{i4}	b_{i5}	c_i	\tilde{c}_i
1							$\frac{16}{135}$	$\frac{25}{216}$
2	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$					0	0
3	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$				$\frac{6656}{12825}$	$\frac{1408}{2565}$
4	$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$			$\frac{28561}{56430}$	$\frac{2197}{4104}$
5	1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$		$-\frac{9}{50}$	$-\frac{1}{5}$
6	$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	$\frac{2}{55}$	

D.3 Méthode Runge-Kutta-Cash-Karp, RKCK

Dans le soucis de réduire encore plus le temps de calcul de la méthode, Cash et Karp [88] apportent une légère modification à la méthode de Runge-Kutta-Fehlberg (RKF45). Son idée consiste, comme dans le cas de RKF45, à faire une estimation de la solution avec un schéma d'ordre 4 mais avec autant de terme que pour le schéma d'ordre 5 utilisé pour la recherche de la solution. Le but est de réduire le nombre de test dans la procédure d'optimisation du pas d'intégration.

Au lieu de l'équation (B.5), Cash et Karp suggèrent d'utiliser la solution suivante :

$$\tilde{y}_i^{j+1} = y_i^j + \sum_{l=1}^6 \tilde{c}_l k_l^i + O(h^5) \quad (\text{D.9})$$

où les coefficients a_m , b_{ml} , c_m et \tilde{c}_m sont tabulés ci-dessous (TAB.D.2). On peut noter que les évaluations de fonctions sont considérées en des points intermédiaires (coefficients a_m) différents de ceux pris en compte par Fehlberg et que le coefficient \tilde{c}_6 est différent de zéro contrairement à la méthode précédente.

Comme dans le cas de la méthode RKF45, la solution y_i^{j+1} et l'erreur Δ_i sont calculées à partir des équations (D.5) et (D.6) respectivement, mais en utilisant les coefficients fournis par Fehlberg (TAB. D.2).

TAB. D.2 – Les valeurs numériques des paramètres proposés par Cash et Karp pour améliorer RKF45.

i	a_i	b_{i1}	b_{i2}	b_{i3}	b_{i4}	b_{i5}	c_i	\tilde{c}_i
1							$\frac{37}{378}$	$\frac{2825}{27648}$
2	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$					0	0
3	$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				$\frac{250}{621}$	$\frac{18575}{48384}$
4	$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{10}$	$-\frac{9}{10}$	$\frac{6}{5}$			$\frac{125}{594}$	$\frac{13525}{55296}$
5	1	$-\frac{11}{54}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{70}{27}$	$\frac{35}{27}$		0	$\frac{277}{14336}$
6	$\frac{7}{8}$	$\frac{1631}{55296}$	$\frac{175}{512}$	$\frac{775}{13824}$	$\frac{44275}{110592}$	$\frac{253}{4096}$	$\frac{512}{1771}$	$\frac{1}{4}$

Optimisation du pas d'intégration

Plusieurs algorithmes d'optimisation du pas d'intégration sont proposés dans la littérature [91, 85, 86, 89, 90, 92, 87, 93, 88] ; Ils se basent tous sur un même principe et ont pour objectifs, la réduction du temps de calcul d'une part et l'adaptation du pas aux variations de la solution d'autre part.

Pour déterminer la valeur du pas le plus adapté, ils considèrent de l'équation (D.8) qui explicite l'erreur de troncature locale qui est d'ordre h^5 . Si, pour une fonction y_i donnée, un pas h_1 fournit une solution dont l'erreur de troncature locale est Δ_i^1 , alors on peut supposer que l'erreur, correspondant à la même composante y_i , serait égale à Δ_i^0 (fixée à l'avance) si on utilisait le pas h_0 donné par :

$$h_0 = h_1 \left| \frac{\Delta_i^0}{\Delta_i^1} \right|^{\frac{1}{5}} \quad (\text{D.10})$$

Par conséquent, on peut diminuer h_0 pour que la méthode fournisse une erreur plus faible ou l'augmenter, de manière raisonnable, si $|\Delta_i^1|$ est inférieure à la valeur absolue de l'erreur tolérée, Δ_i^0 , pour la fonction y_i .

Cependant, il s'agit d'optimiser le pas pour l'intégration d'un système d'équations différentielles qui concerne N variables y_i pouvant avoir différents ordres de grandeurs. Il est donc

nécessaire d'avoir une idée sur ces grandeurs pour lesquelles Press et col. [94] proposent de les estimer suivant la relation :

$$y_i^{*j} = |y_i^j| + |h_1 f_i^j| \quad (\text{D.11})$$

afin de déterminer, par la suite, l'erreur relative maximale Δ_i^{rmax}

$$\Delta_i^{rmax} = \left| \frac{y_i^{j+1} - \tilde{y}_i^{j+1}}{y_i^{*j} + \epsilon^*} \right| \quad (\text{D.12})$$

où ϵ^* est un paramètre négligeable mais non nul (10^{-30}), introduit juste pour éviter la division par zéro lors des calculs. L'algorithme d'optimisation du pas d'intégration consiste à comparer cette erreur à une erreur relative tolérée ϵ , définie à l'avance, et à augmenter ou réduire le pas suivant la formule suivante où le facteur 0.9 est un paramètre de sécurité :

$$h_0 = \begin{cases} 0.9h_1 \left(\frac{\epsilon}{\Delta_i^{rmax}} \right)^{\frac{1}{4}} ; & \text{si } \Delta_i^{rmax} > \epsilon \\ 0.9h_1 \left(\frac{\epsilon}{\Delta_i^{rmax}} \right)^{\frac{1}{5}} ; & \text{si } \Delta_i^{rmax} \leq \epsilon \end{cases} \quad (\text{D.13})$$

Pour éviter de fortes augmentations ou réductions du pas, les auteurs introduisent les procédures de contrôle. Ainsi, pour ne pas diminuer plus de 10 fois le pas, ils posent

$$h_0 = \begin{cases} \max(|h_0|, 0.1|h_1|) ; & \text{si } h_1 \geq 0 \\ -\max(|h_0|, 0.1|h_1|) ; & \text{si } h_1 < 0 \end{cases} \quad (\text{D.14})$$

et pour ne pas l'augmenter plus de 5 fois, ils considèrent $h_0 = 5h_1$ si $\Delta_i^{rmax} \leq (0.18)^5 \epsilon$.

Annexe E

Communications et Publications

E.1 Communications Nationales

1. **N. Sadoun** et E.K. Si-Ahmed, "Application de l'approximation homographique à la définition de l'enthalpie pour l'étude de la solidification d'une plaque plane", *First National Congress on Physics and its Applications* (CNPA1), Sidi-Fredj (Algeria), June 13-15 1995
2. **N. Sadoun** et E.K. Si-Ahmed, "Approche semi-analytique du problème de Stefan : Cas d'une paroi à température variable", *8^{imes} Journées Scientifiques et Pédagogiques* (JSP8), Faculté de Physique (USTHB), Alger, 20-21 avril 2004
3. **N. Sadoun** et E.K. Si-Ahmed, "Perturbation solution for the Stefan problem with time-dependent temperature boundary conditions", *8^{imes} Journées Scientifiques et Pédagogiques* (JSP8), Faculté de Physique (USTHB), Alger, 20-21 avril 2004
4. T. Benhadad, **N. Sadoun** et E.K. Si-Ahmed, "Simulation numérique du destockage d'énergie : Approximation homographique de l'enthalpie", *8^{imes} Journées Scientifiques et Pédagogiques* (JSP8), Faculté de Physique (USTHB), Alger, 20-21 avril 2004
5. T. Benhadad, **N. Sadoun** et E.K. Si-Ahmed, "Modélisation du stockage en chaleur latente de changement de phase, dans une configuration annulaire", *9^{imes} Journées Scientifiques et Pédagogiques* (JSP9), Faculté de Physique (USTHB), Alger, 16-21 avril 2005
6. T. Benhadad, **N. Sadoun** et E.K. Si-Ahmed, "Influence du nombre de Biot sur le changement de phase isotherme dans le cas d'une géométrie cylindrique", *10^{imes} Journées Scientifiques et Pédagogiques* (JSP10), Faculté de Physique (USTHB), Alger, 08-09 Mai 2006
7. **N. Sadoun**, E.K. Si-Ahmed et P. Colinet, "Expressions analytiques de la vitesse de l'interface pour l'initialisation de la modélisation numérique de la solidification (fusion) sous FEMLAB ou FLUENT", *10^{imes} Journées Scientifiques et Pédagogiques* (JSP10), Faculté de Physique (USTHB), Alger, 08-09 Mai 2006

E.2 Communications Internationales

1. **N. Sadoun** and E.K. Si-Ahmed, "On the double integral method for solving Stefan-like problems", *First International Thermal Congress* (ITEC-93), Marrakesh (Marocco), June 6-10 1993

2. **N. Sadoun** et E.K. Si-Ahmed, "Application de la méthode de la double intégrale au problème de changement de phase avec surchauffe", *4^{ème} Colloque Maghrébin sur les Modèles Numériques de l'Ingénieur* (CMMNI4), Alger (Algérie), 22-24 Novembre 1993
3. **N. Sadoun** et E.K. Si-Ahmed, "Algorithme pour la détermination des distributions phasiques de température lors d'une solidification", *4^{ème} Colloque Maghrébin sur les Modèles Numériques de l'Ingénieur* (CMMNI4), Alger (Algérie), 22-24 Novembre 1993
4. **N. Sadoun** et E.K. Si-Ahmed, "Simulation numérique de la solidification d'une pièce cylindrique dans un moule", *First Maghrebian Congress on Mechanics* (CMM'96), Ghardaia (Algeria), March 23-26 1996
5. **N. Sadoun** and E.K. Si-Ahmed, "Analytical solution to a two-phase Stefan problem", *Second Maghrebian Conference on Process Engineering* (COMAGEP2), Gabes and Gerba (Tunisia), April 22-25 1996
6. **N. Sadoun** and E.K. Si-Ahmed, "Application of the homographic approximation in the enthalpy method for the problem of solidification in a cylindrical tube", *Second Maghrebian Conference on Process Engineering* (COMAGEP2), Gabes and Gerba (Tunisia), April 22-25 1996
7. **N. Sadoun**, E.K. Si-Ahmed and J. Legrand, "A refined exponential heat balance integral method for one-phase Stefan problem", *The Second International Conference on Thermal Engineering : Theory and Applications* (ICTEA06), Al-Ain (UAE), January 03-06 2006

E.3 Publications Internationales

1. **N. Sadoun** and E.K. Si-Ahmed, "A new analytical expression for the freezing constant in the Stefan problem with initial superheat", *Numerical Method in Thermal Problems*, **9**(2), 843-854, 1995
2. **N. Sadoun**, E.K. Si-Ahmed and P. Colinet, "On the refined integral method for the one-phase Stefan problem with time-dependent boundary conditions", *Applied Mathematical Modelling*, **30**(6), 531-544, 2006

E.4 Encadrement de Mémoire d'Ingénieurs

1. "Contribution à l'étude numérique de la solidification lors du moulage d'une pièce cylindrique creuse",
S. Saidi et R. Lakhmi
Institut de Génie Mécanique, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, 1995

CONTRIBUTION A L'ETUDE DU PROBLEME DE SOLIDIFICATION

Approche Semi-Analytique

Résumé

La complexité du problème de solidification, appelé communément *problème de Stefan*, réside dans la présence d'une interface mobile et source de dégagement de chaleur. La non-linéarité qui en résulte rend très délicate la mise en œuvre des méthodes analytiques et très coûteuse l'utilisation des techniques numériques. Le cas du problème de Stefan à une phase avec température de paroi variable suscite beaucoup d'intérêt. Jusqu'à présent, de nombreuses études lui sont consacrées afin d'obtenir une approche analytique ou numérique permettant un suivi explicite et permanent de l'interface solide/liquide.

La présente contribution, qui s'inscrit dans ce cadre, rend compte des travaux antérieurs et développe de nouveaux modèles simples et précis. L'étude :

- i*) fait une étude historique sur les études pionnières et expose leurs apports respectifs dans la solution du problème,
- ii*) présente les différentes formulations et modélisations considérées dans la littérature,
- iii*) effectue une étude des méthodes numériques de suivi de l'interface et de développe un schéma numérique plus précis en modifiant la méthode basée sur la variation du pas d'espace.
- iv*) fait une étude de la méthode de l'intégrale de l'énergie en considérant les différentes procédures de mise en œuvre, d'une part, et les techniques proposées pour l'amélioration de sa précision, d'autre part, et
- v*) développe une approche analytique, basée sur la méthode de l'intégrale de l'énergie modifiée à l'aide de la procédure de la double intégrale, qui a permis de fournir des solutions analytiques simples et précises.

Dans le cas du problème de Stefan avec température de paroi variable, l'approche a fourni des solutions analytiques dont les résultats sont en très bon accord avec ceux fournis par la méthode numérique développée dans ce travail. Cette dernière est considérée avec des pas d'intégration réduits pour une meilleure précision. En outre, l'application de ces solutions au *problème de Stefan classique* a permis de développer des expressions analytiques simples et précises pour la constante de solidification permettant, ainsi, d'éviter la procédure numérique requise par la solution exacte.

Mots Clés

Problème de Stefan, Problème à Frontière Mobile, Solidification, Fusion, Formulation Explicite, Formulation Implicite, Méthodes Numériques Explicites, Méthodes Analytiques, Intégrale de l'Énergie, Double Intégrale, Constante de solidification