

Modélisation et simulation numérique de matériaux à changement de phase

Aina Rakotondrandisa

Directeur de thèse : Ionut Danaila

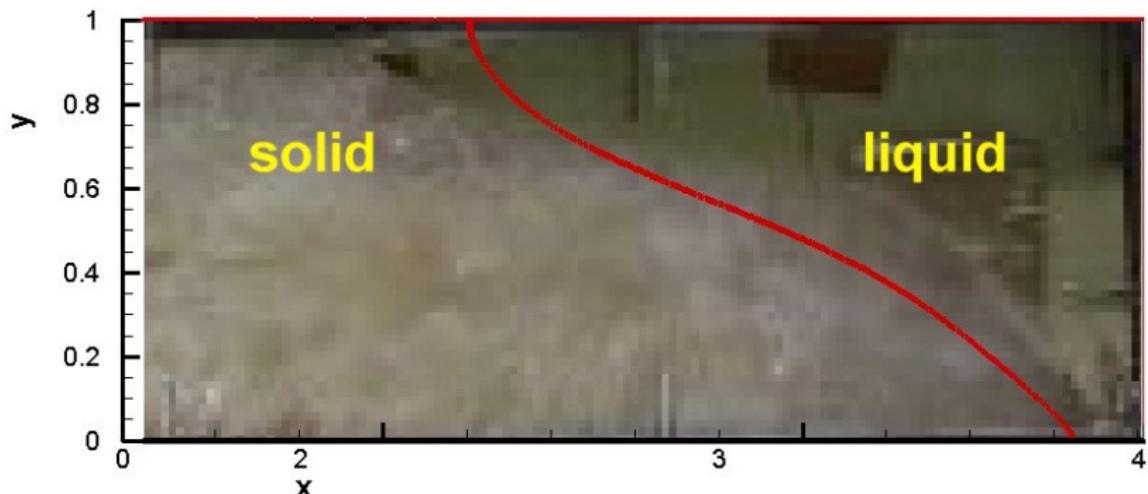
Laboratoire de Mathématiques Raphaël Salem
Université de Rouen Normandie

vendredi 27 septembre 2019



Problème physique et motivation

Matériaux à changement de phase (MCP)



Orange, Lannion, France.

Applications des matériaux à changement de phase

Domaines d'applications

- isolation thermique,
- stockage d'énergie,
- refroidissement passif,
- cryochirurgie.



X. Kong et. al, *Energy and Buildings* (2014).

Applications des matériaux à changement de phase

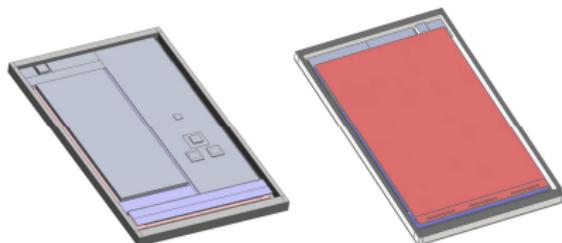
Domaines d'applications

- isolation thermique,
- stockage d'énergie,
- refroidissement passif,
- cryochirurgie.



X. Kong et. al, *Energy and Buildings* (2014).

Applications des matériaux à changement de phase



D. Groulx, TFESC (2015)

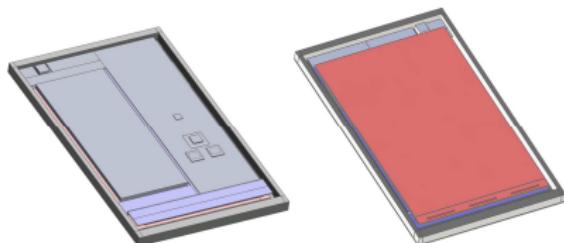
Domaines d'applications

- isolation thermique,
- stockage d'énergie,
- refroidissement passif,
- cryochirurgie.



X. Kong et. al, *Energy and Buildings* (2014).

Applications des matériaux à changement de phase



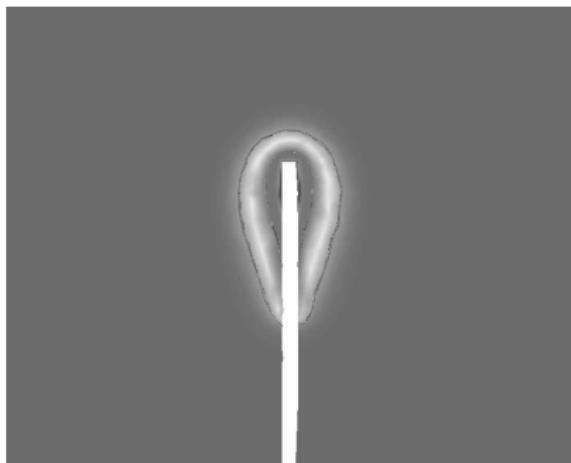
D. Groulx, TFESC (2015)

Domaines d'applications

- isolation thermique,
- stockage d'énergie,
- refroidissement passif,
- cryochirurgie.



X. Kong et. al, *Energy and Buildings* (2014).



A. Fortin et. al, CMBBE (2008)

Contexte de la thèse

[Danaila et. al, JCP
(2014)]

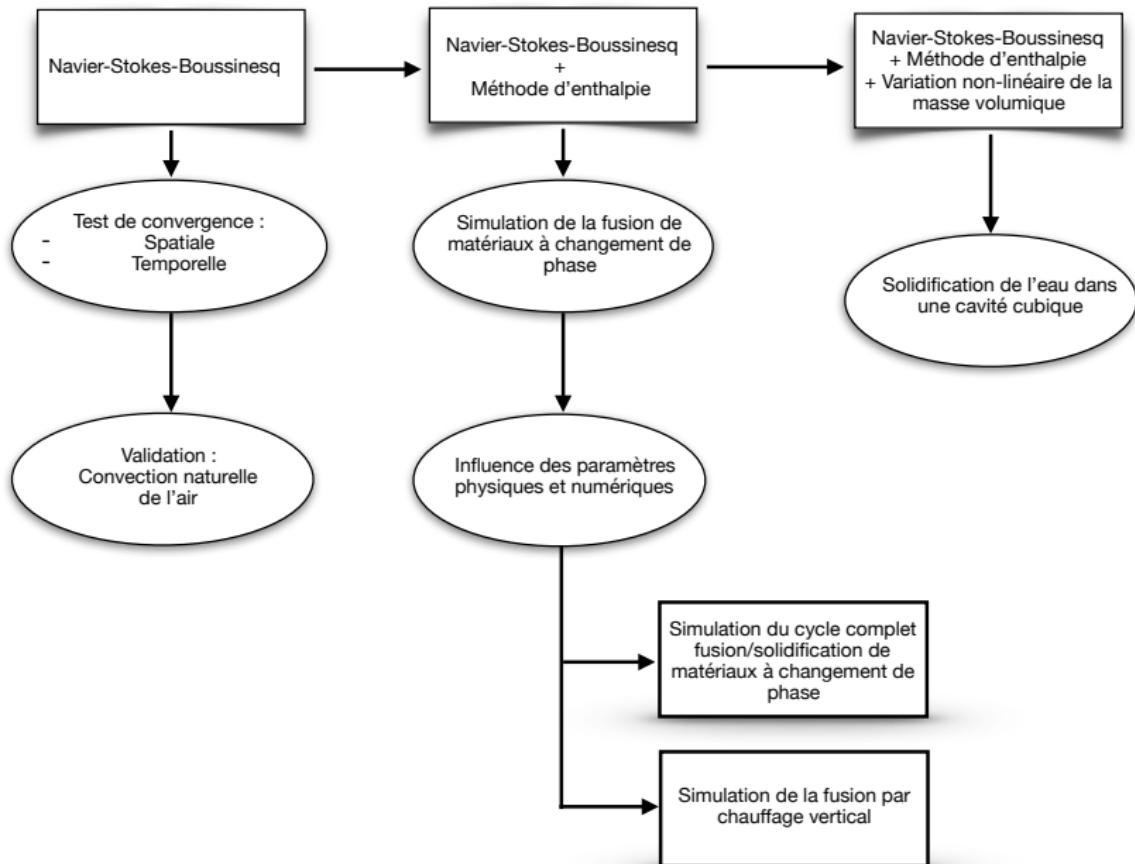
- Code éléments finis 2D avec adaptation de maillage.
- Schéma implicite d'ordre 1.
- Pénalisation par viscosité variable.

Apports pendant la thèse

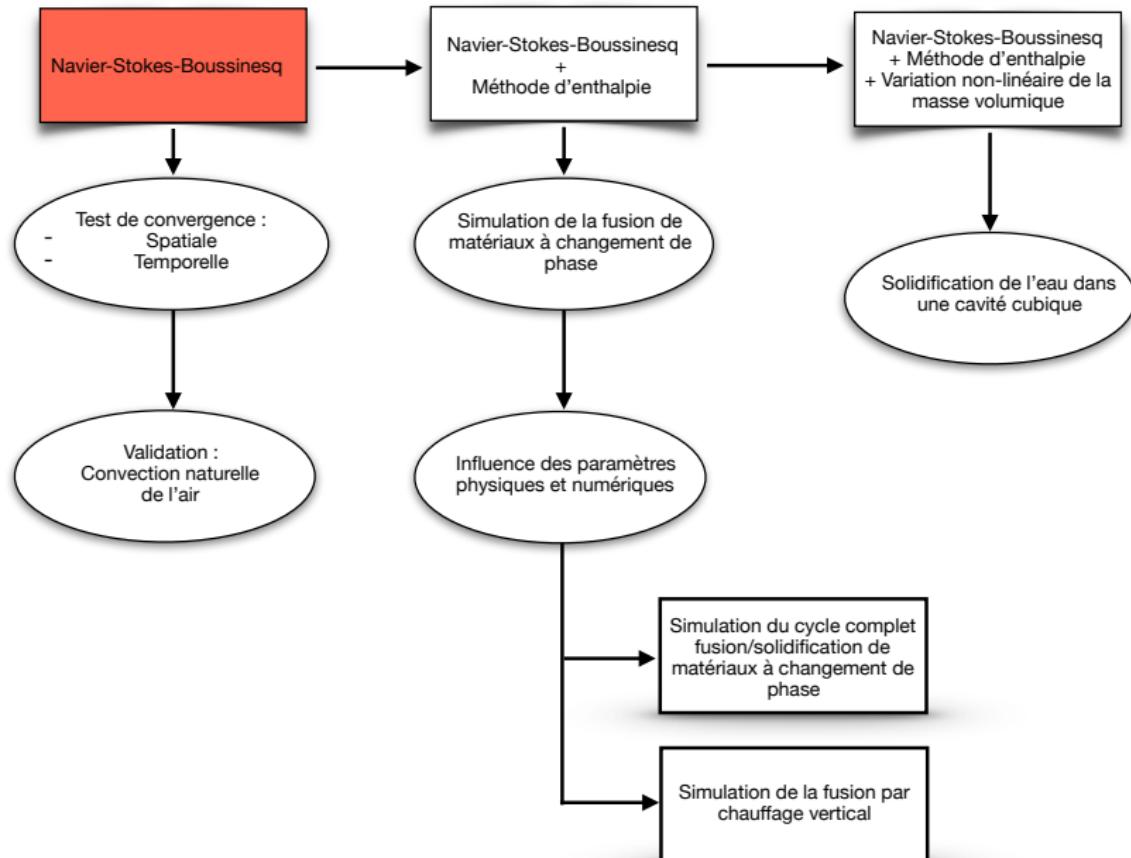
- Implémentation d'un schéma en temps d'ordre 2.
- Pénalisation basée sur le modèle de Carman-Kozeny.
- Continuation sur $\mathcal{R}a$ pour les cas stationnaires.
- Amélioration des conditions initiales.
- Simulation de configurations compliquées.
- Configuration 3D.
- Réalisation d'une toolbox.



Plan de la thèse



Plan de la thèse



Équations de Navier-Stokes-Boussinesq

Conservation de la masse / conservation de la quantité de mouvement / conservation de l'énergie.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{\mathcal{R}e} \nabla^2 \mathbf{u} - \textcolor{red}{f}_B(\theta) \mathbf{e}_y = 0,$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta \mathbf{u}) - \frac{K}{Pr \mathcal{R}e} \nabla^2 \theta = 0.$$

Équations de Navier-Stokes-Boussinesq

Conservation de la masse / conservation de la quantité de mouvement / conservation de l'énergie.

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{\mathcal{R}e} \nabla^2 \mathbf{u} - \textcolor{red}{f_B(\theta)} \mathbf{e}_y &= 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta \mathbf{u}) - \frac{K}{Pr \mathcal{R}e} \nabla^2 \theta &= 0.\end{aligned}$$

$$\mathbf{x} \rightarrow \frac{\tilde{\mathbf{x}}}{h}, \mathbf{u} \rightarrow \frac{\tilde{\mathbf{u}}}{V_{ref}}, \theta = \frac{T - T_c}{\delta T}, t \rightarrow \frac{V_{ref}}{h} t_\varphi, \delta T = T_h - T_c,$$

$$\mathcal{R}e = \frac{V_{ref} h}{\nu_{liq}}, \quad \mathcal{P}r = \frac{\nu_l}{\alpha_l}, \quad \mathcal{G}r = \frac{g \beta h^3 \delta T}{\nu_l^2}, \quad \mathcal{R}a = \mathcal{G}r \times \mathcal{P}r.$$

$\mathcal{R}e$: nombre de Reynolds, $\mathcal{P}r$: nombre de Prandtl, $\mathcal{G}r$: nombre de Grashof, $\mathcal{R}a$: nombre de Rayleigh



Modèle de Boussinesq

Linéarisation de la force de flottabilité autour d'une masse volumique de référence.

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - \textcolor{red}{f_B(\theta)} \mathbf{e}_y &= 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta \mathbf{u}) - \frac{K}{Pr Re} \nabla^2 \theta &= 0.\end{aligned}$$

Convection naturelle de l'air :

$$f_B(\theta) = \frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{R}e^2 \mathcal{P}r} \theta$$



Méthode numérique

- **Discrétisation temporelle** : schéma implicite d'ordre deux BDF2 (GEAR).
- **Discrétisation spatiale** : éléments finis de Taylor Hood. \mathbb{P}_2 pour la vitesse et \mathbb{P}_1 pour la pression. \mathbb{P}_2 pour la température.

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{3\Phi^{n+1} - 4\Phi^n + \Phi^{n-1}}{2\delta t}$$

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - f_B(\theta) \mathbf{e}_y &= 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta \mathbf{u}) - \frac{K}{Pr Re} \nabla^2 \theta &= 0.\end{aligned}$$

Méthode numérique

- **Discrétisation temporelle** : schéma implicite d'ordre deux BDF2 (GEAR).
- **Discrétisation spatiale** : éléments finis de Taylor Hood. \mathbb{P}_2 pour la vitesse et \mathbb{P}_1 pour la pression. \mathbb{P}_2 pour la température.

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{3\Phi^{n+1} - 4\Phi^n + \Phi^{n-1}}{2\delta t}$$

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - f_B(\theta) \mathbf{e}_y &= 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta \mathbf{u}) - \frac{K}{Pr Re} \nabla^2 \theta &= 0.\end{aligned}$$

Formulation variationnelle

$$\begin{aligned}
 b(\mathbf{u}^{n+1}, q) - \gamma(p^{n+1}, q) &= 0, \\
 \frac{3}{2\delta t} (\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}) + c(\mathbf{u}^{n+1}; \mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}) + a(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}) \\
 &\quad + b(\mathbf{v}, p^{n+1}) - (f_B(\theta^{n+1}) \mathbf{e}_y, \mathbf{v}) = \\
 &\quad \frac{2}{\delta t} (\mathbf{u}^n, \mathbf{v}) - \frac{1}{2\delta t} (\mathbf{u}^{n-1}, \mathbf{v}), \\
 \frac{3}{2\delta t} (\theta^{n+1}, \phi) - (\mathbf{u}^{n+1} \cdot \nabla \phi, \theta^{n+1}) + \left(\frac{K}{RePr} \nabla \theta^{n+1}, \nabla \phi \right) &= \\
 &\quad \frac{2}{\delta t} (\theta^n, \phi) - \frac{1}{2\delta t} (\theta^{n-1}, \phi).
 \end{aligned}$$

$$a : \mathbf{V} \times \mathbf{V} \rightarrow \mathbb{R}, \mathbf{V} = H_0^1(\Omega), a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \mathbf{D}(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^2 D_{ij}(\mathbf{u}) D_{ij}(\mathbf{v}),$$

$$b : \mathbf{V} \times Q \rightarrow \mathbb{R}, Q = \left\{ q \in L^2(\Omega) \mid \int_{\Omega} q = 0 \right\}, b(\mathbf{u}, q) = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} q = - \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} \partial_i u_i \cdot q$$

$$c : \mathbf{V} \times \mathbf{V} \times \mathbf{V} \rightarrow \mathbb{R}, c(\mathbf{w}; \mathbf{z}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} [(\mathbf{w} \cdot \nabla) \mathbf{z}] \cdot \mathbf{v} = \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega} w_j (\partial_j z_i) v_i.$$



Formulation variationnelle

$$\begin{aligned} b(\mathbf{u}^{n+1}, q) - \gamma(p^{n+1}, q) &= 0, \\ \frac{3}{2\delta t} (\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}) + c(\mathbf{u}^{n+1}; \mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}) + a(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}) \\ + b(\mathbf{v}, p^{n+1}) - (f_B(\theta^{n+1}) \mathbf{e}_y, \mathbf{v}) &= \\ \frac{2}{\delta t} (\mathbf{u}^n, \mathbf{v}) - \frac{1}{2\delta t} (\mathbf{u}^{n-1}, \mathbf{v}), \\ \frac{3}{2\delta t} (\theta^{n+1}, \phi) - (\mathbf{u}^{n+1} \cdot \nabla \phi, \theta^{n+1}) + \left(\frac{K}{RePr} \nabla \theta^{n+1}, \nabla \phi \right) &= \\ \frac{2}{\delta t} (\theta^n, \phi) - \frac{1}{2\delta t} (\theta^{n-1}, \phi). \end{aligned}$$

γ : paramètre de pénalisation. Renforcer la diagonale de la matrice de pression.

γ	0.5	0.1	
$\int \nabla \cdot \mathbf{u}$	$3.59634 \cdot 10^{-17}$	$1.27988 \cdot 10^{-17}$	
10^{-3}	10^{-7}	10^{-10}	10^{-20}
$6.70786 \cdot 10^{-18}$	$5.61209 \cdot 10^{-18}$	$3.54995 \cdot 10^{-18}$	div



Méthode numérique

- Discrétisation temporelle : schéma implicite d'ordre deux BDF2 (GEAR).
- Discrétisation spatiale : éléments finis de Taylor Hood. \mathbb{P}_2 pour la vitesse et \mathbb{P}_1 pour la pression. \mathbb{P}_2 pour la température.
- Algorithme de Newton.
- Résolution par une méthode directe à chaque itération de Newton jusqu'à convergence.

Résoudre $\mathcal{F}(w) = 0$ avec $w = (u, p, \theta)$.

$$D_w \mathcal{F}(w_k) w_{k+1} = D_w \mathcal{F}(w_k) w_k - \mathcal{F}(w_k).$$

+ CL : Dirichlet homogènes pour la vitesse.



Implémentation

- Implémentation avec le logiciel éléments finis FreeFem++.
- Adaptation de maillage à chaque pas de temps.
- 3D : librairie FFDDM. Décomposition de domaine.
- Adaptation de maillage 3D : MMG3D et MSHMET.



www.freefem.org



Implémentation

- Implémentation avec le logiciel éléments finis FreeFem++.
- Adaptation de maillage à chaque pas de temps.
- 3D : librairie FFDDM. Décomposition de domaine.
- Adaptation de maillage 3D : MMG3D et MSHMET.



www.freefem.org



Implémentation

- Implémentation avec le logiciel éléments finis FreeFem++.
- Adaptation de maillage à chaque pas de temps.
- 3D : librairie FFDDM. Décomposition de domaine.
- Adaptation de maillage 3D : MMG3D et MSHMET.



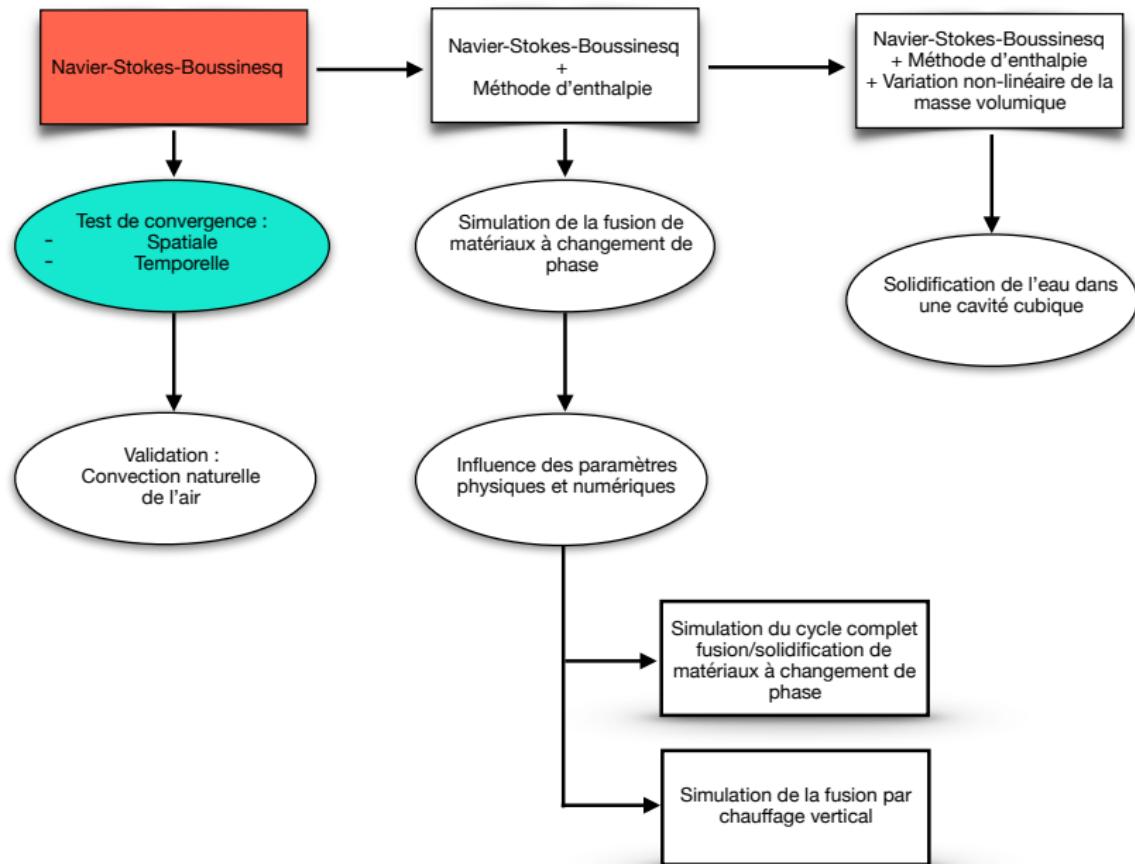
www.freefem.org



www.mmgtools.org



Plan de la thèse

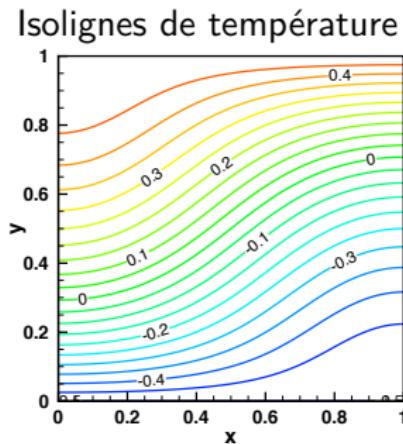
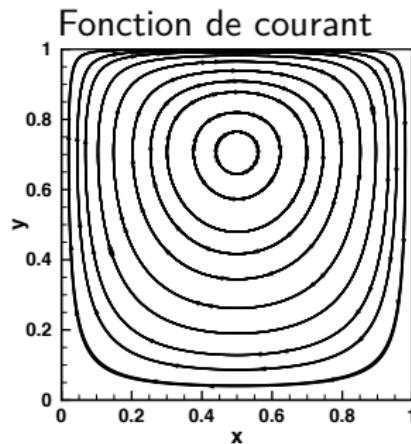


Test de convergence

- Convergence en espace : écoulement de Burggraf.
- Convergence en temps : solution manufacturée.

Écoulement de Burggraf

Cavité entraînée régularisée



$$u_1(x, y) = \sigma g'(x) h'(y),$$

$$u_2(x, y) = -\sigma g''(x) h(y),$$

$$p(x, y) = \frac{\sigma}{\mathcal{R}e} \left(h^{(3)}(y)g(x) + g''(x)h'(y) \right)$$

$$+ \frac{\sigma^2}{2} g'(x)^2 \left(h(y)h''(y) - h'(y)^2 \right),$$

$$T(x, y) = T_c + (T_h - T_c)y + a(x)b(y).$$

$$g(x) = \frac{x^5}{5} - \frac{x^4}{2} + \frac{x^3}{3},$$

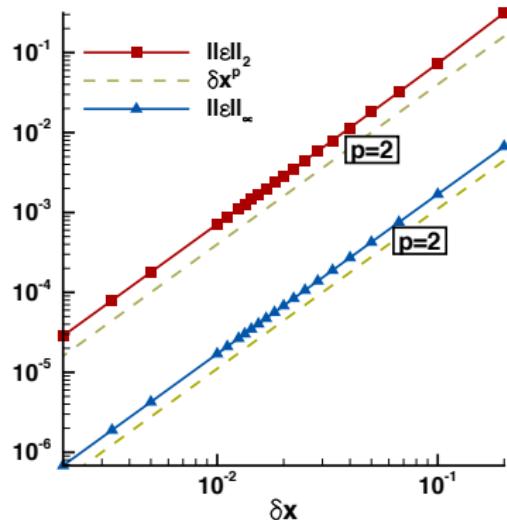
$$h(y) = y^4 - y^2,$$

$$a(x) = \cos(\pi x),$$

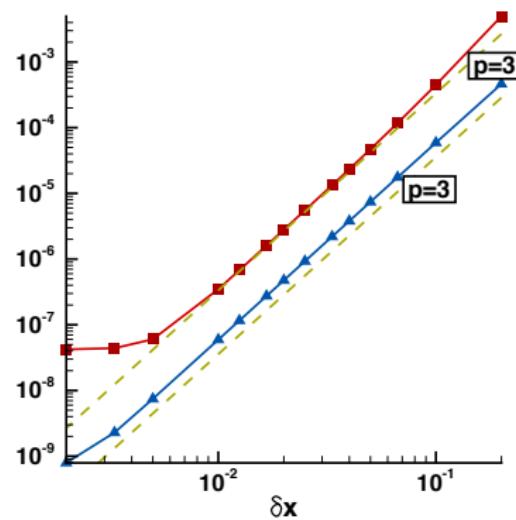
$$b(y) = y(1-y).$$

Écoulement de Burggraf : convergence en espace

- \mathbb{P}_1 pour la température



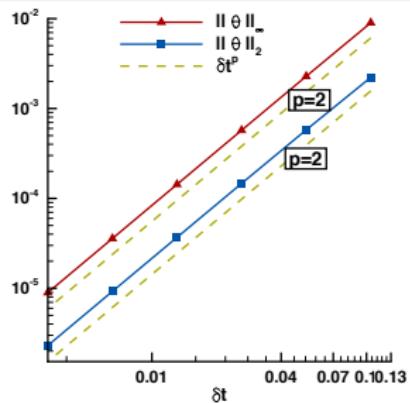
- \mathbb{P}_2 pour la température



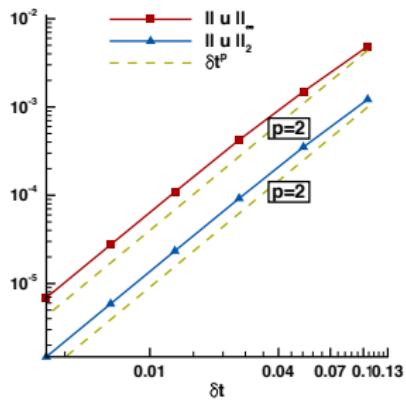
$$\begin{aligned}\|\varepsilon\|_\infty &= \|u_{man} - u\|_\infty \\ \|\varepsilon\|_2 &= \|u_{man} - u\|_2\end{aligned}$$

Solution manufacturée [Nourgaliev et. al (2016)]

- Erreur sur la température



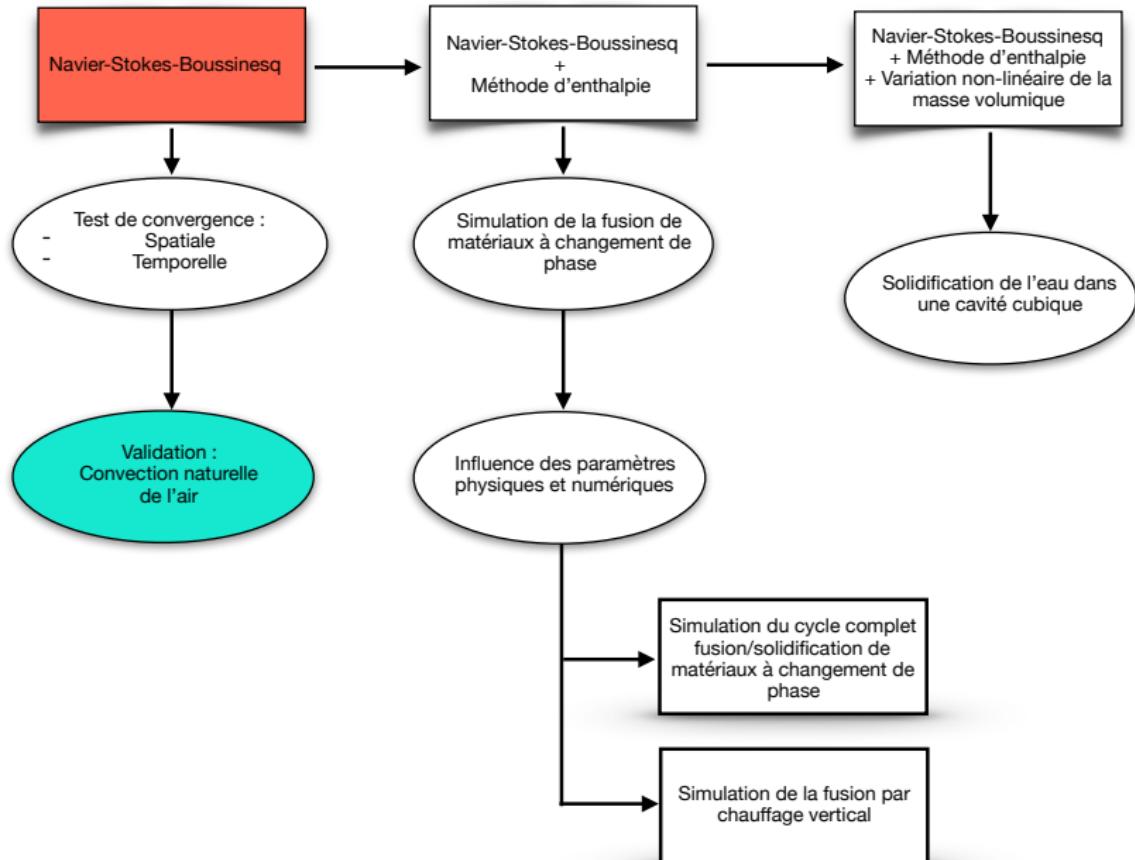
- Erreur sur la vitesse



$$\begin{aligned}
 u_1(x, y, t) &= (\delta U_0 + \alpha_u \sin(t)) \cos(x + \gamma_1 t) \sin(y + \gamma_2 t), \\
 u_2(x, y, t) &= -(\delta U_0 + \alpha_u \sin(t)) \sin(x + \gamma_1 t) \cos(y + \gamma_2 t), \\
 T(x, y, t) &= \bar{T} + (\delta T_0 + \alpha_t \sin(t)) \cos(x + \gamma_1 t) \sin(y + \gamma_2 t), \\
 p(x, y, t) &= \bar{P} + (\delta P_0 + \alpha_p \sin(t)) \sin(x + \gamma_1 t) \cos(y + \gamma_2 t),
 \end{aligned}$$

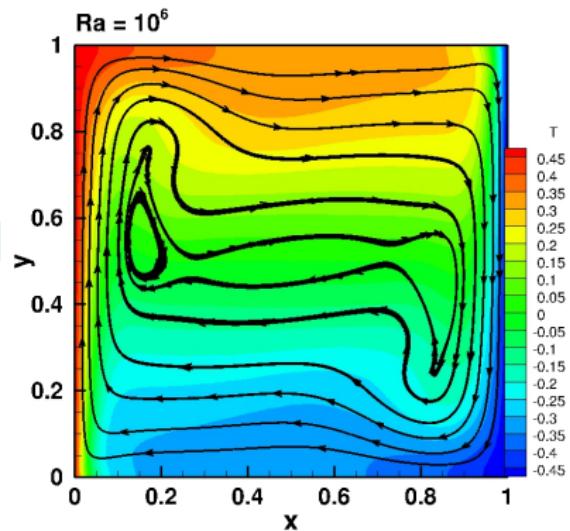
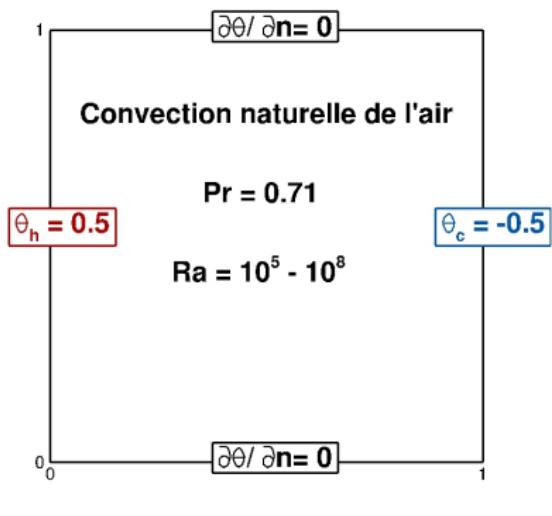
γ_1	γ_2	\bar{P}	\bar{T}	δP_0	δT_0	δU_0	α_p	α_u	α_t
0.1	0.1	0	1.0	0.1	1.0	1.0	0.05	0.4	0.1

Plan de la thèse



Convection naturelle de l'air en 2D

- Cavité carrée differentiellement chauffée

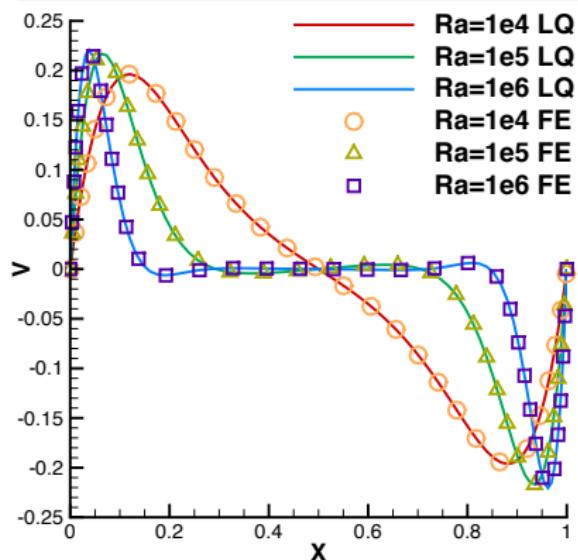


Validation du solveur de Navier-Stokes-Boussinesq

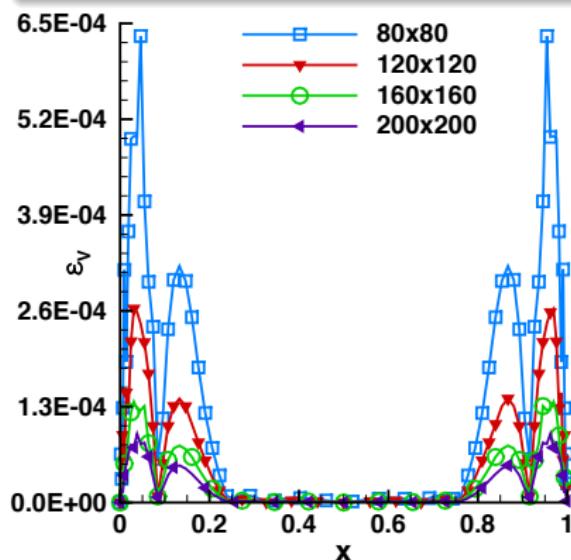
Comparaison avec un code spectral [Le Quéré, CF (1990)].

u_{max} : valeur maximale de la vitesse sur la ligne $y = 0.5$.

Profil de la vitesse sur $y = 0.5$



Erreurs : $\varepsilon_v = \|V_{LQ} - V(x, 0)\|_2$



Validation du solveur de Navier-Stokes-Boussinesq

Comparaison avec un code spectral **[Le Quéré, CF (1990)]**.

u_{max} : valeur maximale de la vitesse sur la ligne $y = 0.5$.

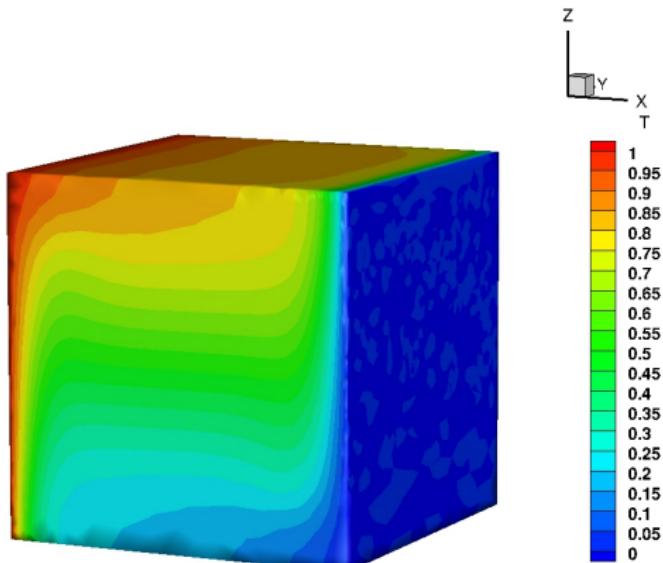
	u_{max}	(err %)	x_{max}		$\mathcal{N}u$	
$\mathcal{R}a = 10^6$	6.48369	(0.038)	0.850394	(0.046)	17.5344	(0.009)
[Le Quéré]	6.48344		0.850000		17.5360	
$\mathcal{R}a = 10^7$	4.69349	(0.10)	0.88189	(0.32)	39.3455	(0.12)
[Le Quéré]	4.69862		0.879		39.3947	
$\mathcal{R}a = 10^8$	3.20182	(0.52)	0.929134	(0.12)	87.3469	(0.127)
[Le Quéré]	3.21875		0.928		87.2355	

$$\mathcal{N}u = - \int_0^1 \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{x=0} dy$$



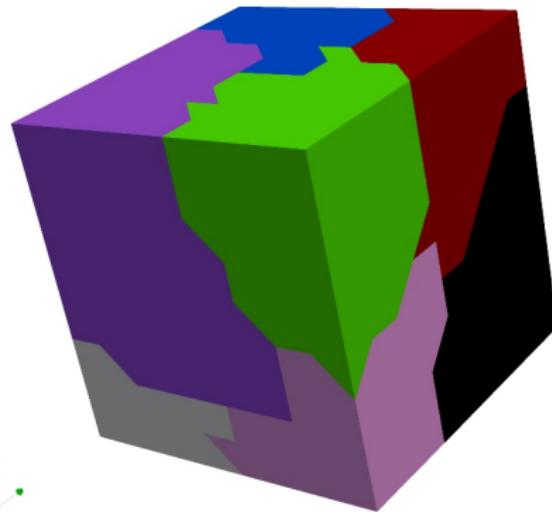
Convection naturelle en 3D

- Convection naturelle de l'air dans une cavité cubique $[0, 1]^3$.
- Problème de mémoire pour les méthodes directes.



Convection naturelle en 3D

- Convection naturelle de l'air dans une cavité cubique $[0, 1]^3$.
- Problème de mémoire pour les méthodes directes.
- Méthode de décomposition de domaine : FFDDM.
- Solveur itératif GMRES.



Décomposition en 8 domaines avec METIS

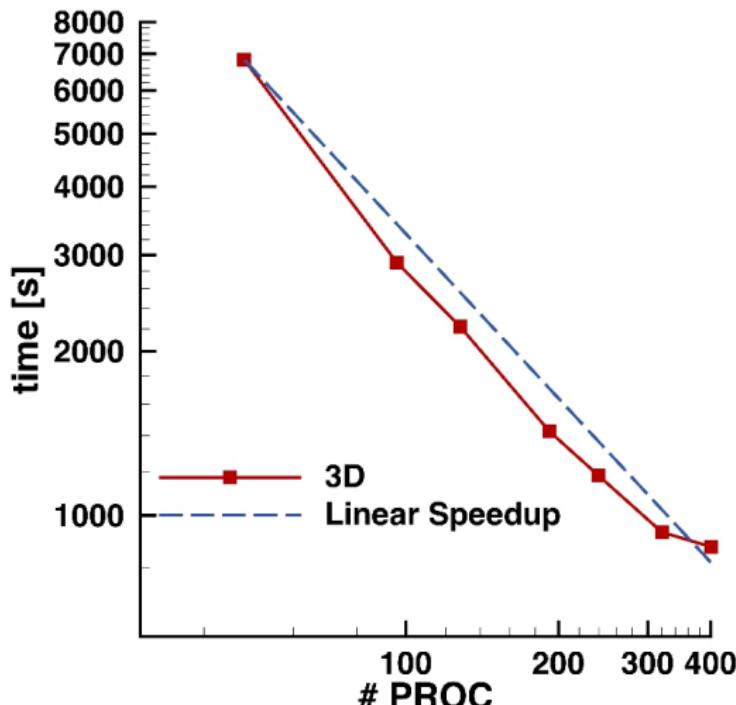
Comparaison des codes séquentiel et parallèle

Comparaison des champs de vitesse et de température dans le plan $y = 0.5$.

$\mathcal{R}a$	<i>nb proc</i>	$\ u\ _2$	$\ T\ _2$
10^6	28	$6.61804 \cdot 10^{-6}$	$3.46504 \cdot 10^{-6}$
	42	$5.93966 \cdot 10^{-6}$	$3.98082 \cdot 10^{-6}$
	56	$7.05144 \cdot 10^{-6}$	$5.0044 \cdot 10^{-6}$
	70	$6.02152 \cdot 10^{-6}$	$4.50094 \cdot 10^{-6}$

Test de scalabilité forte

- Taille du problème fixe pour différents nombres de sous-domaines.
- 7.2 millions d'inconnues.

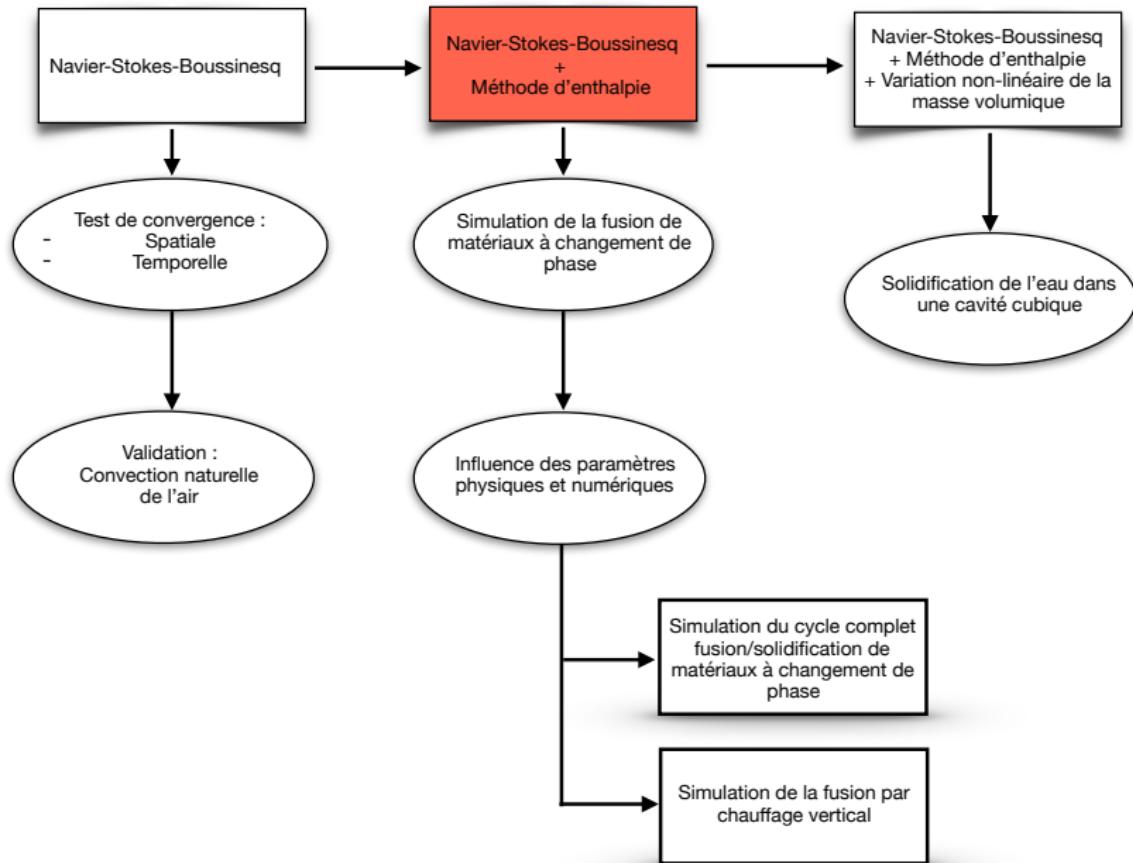


Validation du code 3D

Comparaison de u_{max} et w_{max} dans le plan $y = 0.5$, avec
[Wakashima (2004)] (DF) et [Moglan (2013)] (DF).

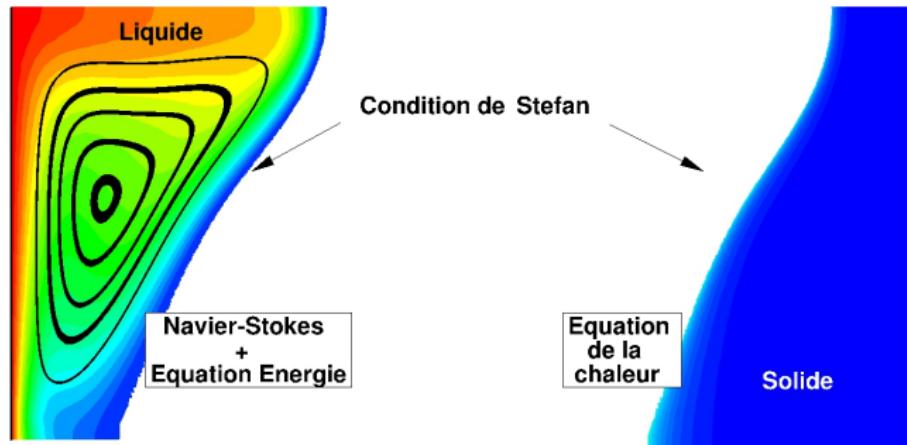
	$u_{max} (z_{max})$	$w_{max} (x_{max})$	(err %)
$\mathcal{R}a = 10^4$	0.198094 (0.8267)	0.220973 (0.11811)	0.28
[Wakashima]	0.198400 (0.8250)	0.221600 (0.11770)	
[Moglan]	0.185900 (0.8230)	0.223400 (0.11720)	
$\mathcal{R}a = 10^5$	0.140367 (0.8503)	0.245454 (0.0629)	0.20
[Wakashima]	0.141600 (0.8500)	0.246400 (0.0677)	
[Moglan]	0.146100 (0.8540)	0.245900 (0.0703)	
$\mathcal{R}a = 10^6$	0.080924 (0.8582)	0.257719 (0.03937)	0.22
[Wakashima]	0.081110 (0.8603)	0.258300 (0.03230)	
[Moglan]	0.083000 (0.8550)	0.255300 (0.03905)	

Plan de la thèse



Méthodes de résolutions des problèmes de changement de phase

Méthode de suivi d'interface.

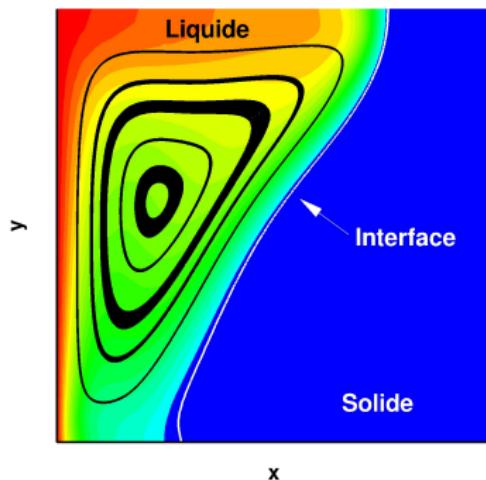


Condition de Stefan :

$$U_i = \frac{Ste}{Pr} (\nabla \theta_s - \nabla \theta_l) \cdot \mathbf{n}$$

Méthodes de résolutions des problèmes de changement de phase

Méthode mono-domaine : Résolution des mêmes systèmes d'équations dans tout le domaine.



Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie

Approche mono-domaine :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - f_B(\theta) \mathbf{e}_y &= A(\theta) \mathbf{u}, \\ \frac{\partial (C\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (C\theta \mathbf{u}) - \frac{K}{Pr Re} \nabla^2 \theta + \frac{\partial (CS)}{\partial t} &= 0.\end{aligned}$$

- + terme source S dans l'équation d'énergie.
- + terme de pénalisation A dans l'équation de quantité de mouvement.
- Interface solide-liquide = isoligne de température $\theta = 0$.

Méthode d'enthalpie

Equation d'énergie écrite pour l'enthalpie totale.

(*) $H = c(s + T)$: chaleur latente + chaleur sensible.

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - f_B(\theta) \mathbf{e}_y &= A(\theta) \mathbf{u}, \\ \frac{\partial (C\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (C\theta \mathbf{u}) - \frac{K}{Pr Re} \nabla^2 \theta + \frac{\partial (CS)}{\partial t} &= 0.\end{aligned}$$

$$S(\theta) = \frac{1}{Ste} - \frac{2}{Ste} \left\{ 1 + \tanh \left(-\frac{\theta}{R_s} \right) \right\}.$$

(*) [Voller, IJHMT (1987)]

Modèle de Carman-Kozeny

La vitesse doit être ramenée à zéro dans le solide.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - f_B(\theta) \mathbf{e}_y = A(\theta) \mathbf{u}$$

Modèle de Carman-Kozeny

La vitesse doit être ramenée à zéro dans le solide.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - f_B(\theta) \mathbf{e}_y = A(\theta) \mathbf{u}$$

$$A(\theta) = -C_{CK} \frac{(1 - L_f(\theta))^2}{L_f(\theta)^3 + b},$$

$$L_f(\theta) = 1 + \frac{1}{2} \left\{ 1 + \tanh \left(\frac{\theta_f - \theta}{R_f} \right) \right\},$$

C_{CK} : constante de Carman-Kozeny,

L_f : fraction liquide.

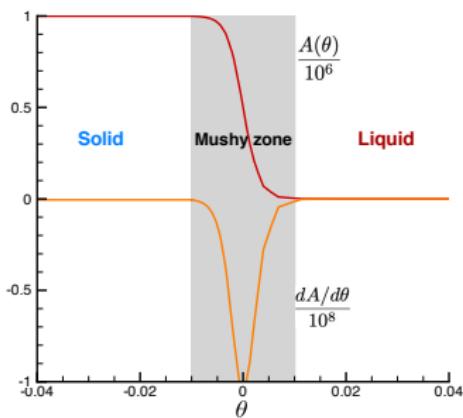
$$b = 10^{-7}$$



Modèle de Carman-Kozeny

La vitesse doit être ramenée à zéro dans le solide.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - f_B(\theta) \mathbf{e}_y = A(\theta) \mathbf{u}$$

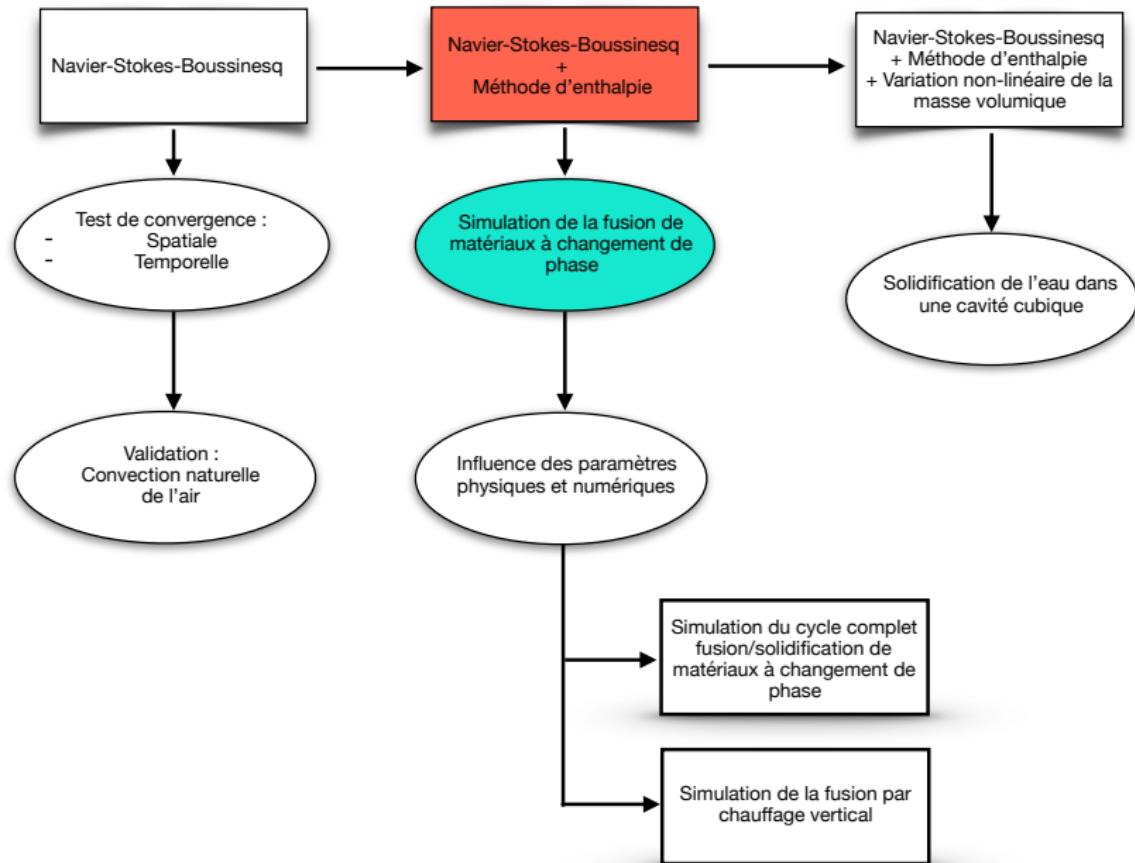


$$A(\theta) = -C_{CK} \frac{(1 - L_f(\theta))^2}{L_f(\theta)^3 + b},$$
$$L_f(\theta) = 1 + \frac{1}{2} \left\{ 1 + \tanh \left(\frac{\theta_f - \theta}{R_f} \right) \right\},$$

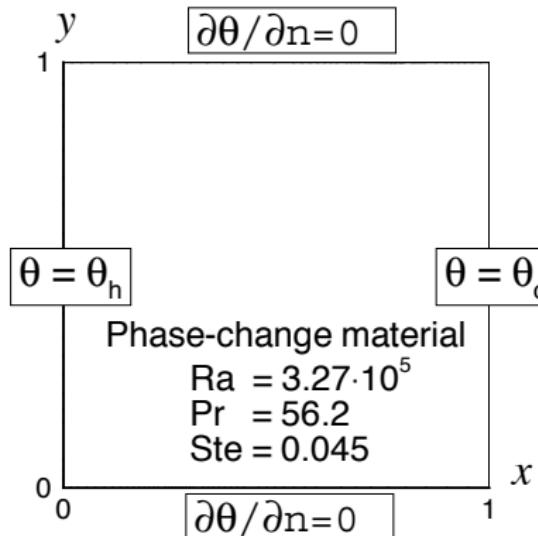
C_{CK} : constante de Carman-Kozeny,
 L_f : fraction liquide.
 $b = 10^{-7}$

Adaptation de maillage : maillage fin le long de l'interface.

Plan de la thèse



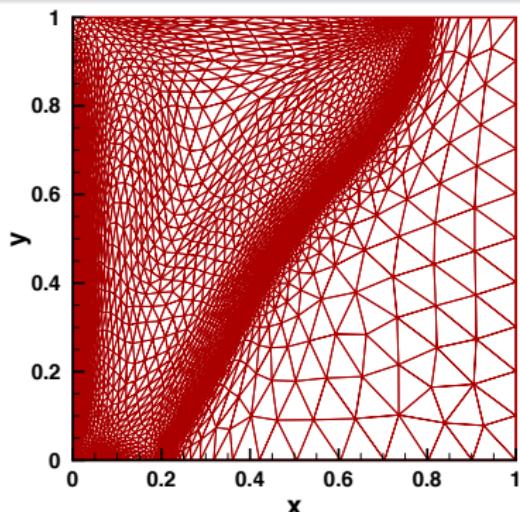
Fusion d'un matériau à changement de phase



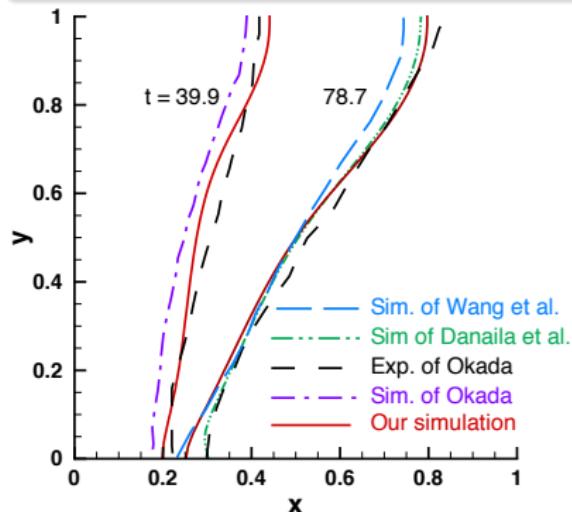
*Étude expérimentale de
[Okada, IJHMT (1984)].
avec $\theta_h = 1$ et $\theta_c = -0.01$.*

Position de l'interface solide-liquide

Maillage adapté à $t = 78.7$

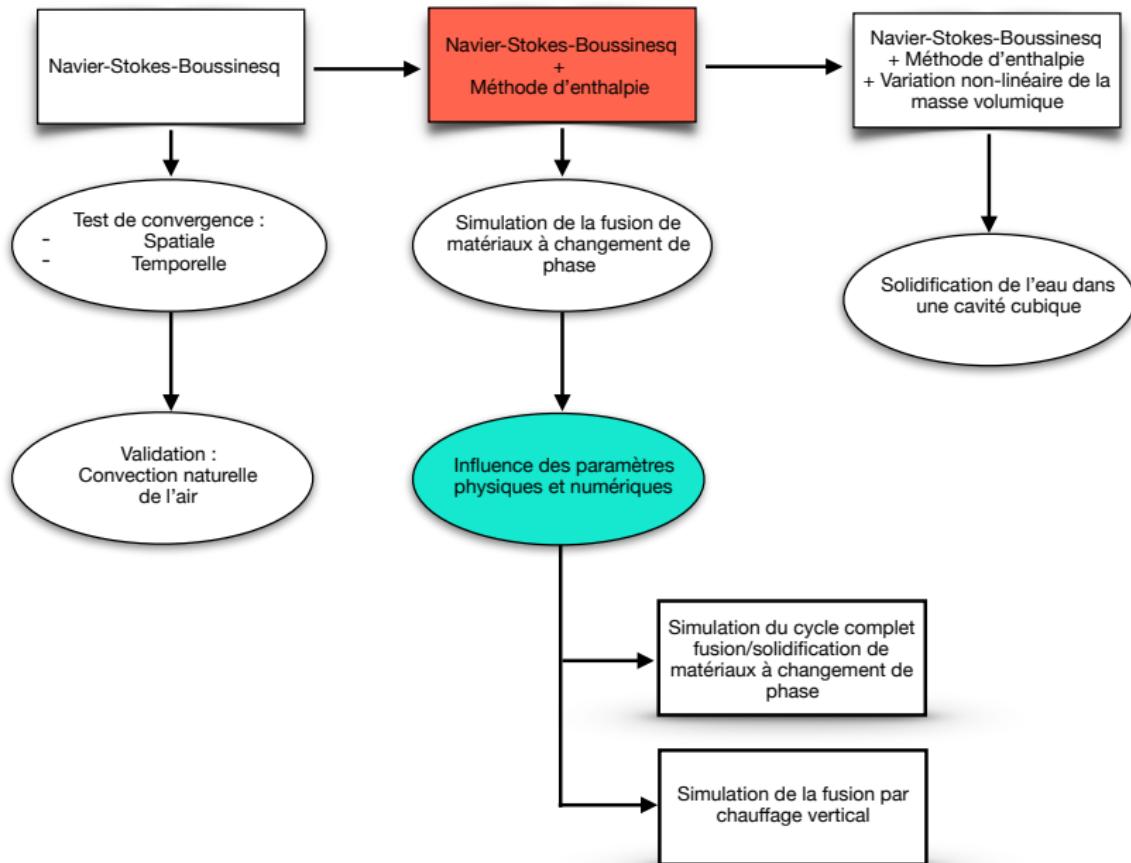


Isoline de température $\theta = 0$



- Maillage : $h_{min} = 10^{-3}$, $h_{max} = 10^{-1}$.
- $C_{CK} = 10^6$.
- Comparaison avec les résultats expérimentaux de **[Okada, IJHFF (1984)]**

Plan de la thèse



Influence du modèle de Carman-Kozeny

- Dans la zone de régularisation :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = A\mathbf{u}.$$

- Solution :

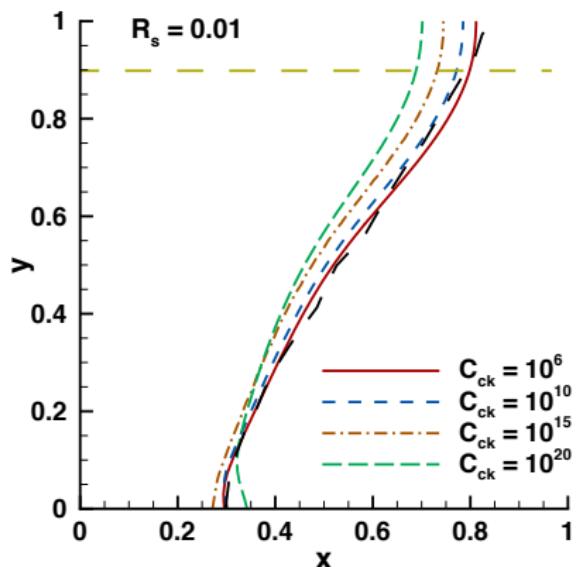
$$\mathbf{u} = u_0 \times \exp(At).$$

avec $A(\theta) = -C_{CK} \frac{(1-L_f(\theta))^2}{L_f(\theta)^3+b} < 0$.

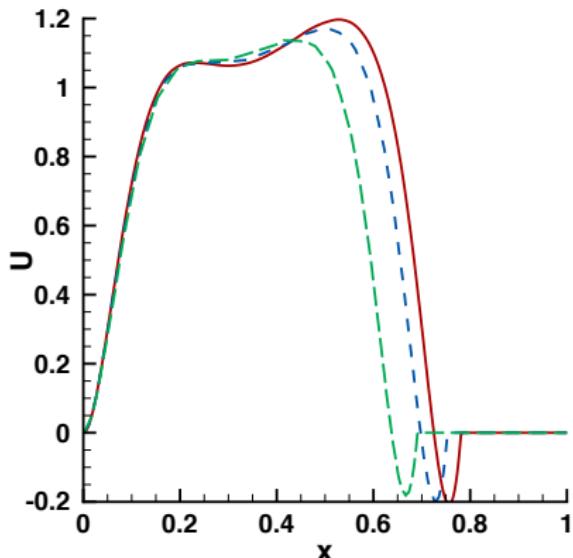
C_{CK}	A_{max}	u_{solide}	v_{solide}
10^6	$1.62935 \cdot 10^{11}$	$-9.8058 \cdot 10^{-14}$	$-3.20216 \cdot 10^{-10}$
10^{10}	$1.62937 \cdot 10^{15}$	$1.09832 \cdot 10^{-17}$	$-3.23176 \cdot 10^{-14}$
10^{20}	$1.62935 \cdot 10^{25}$	$2.7011 \cdot 10^{-26}$	$-3.18493 \cdot 10^{-24}$

Influence de la constante de Carman-Kozeny

- Position de l'interface



- Variation de U sur $y = 0.9$



Influence du maillage adapté

$$h_{min} = 10^{-3}$$
$$h_{max} = 10^{-1}$$

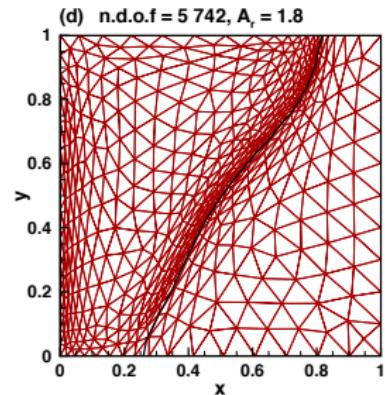
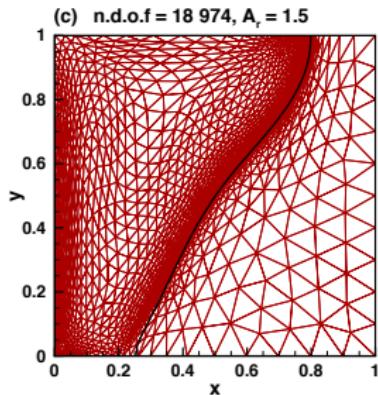
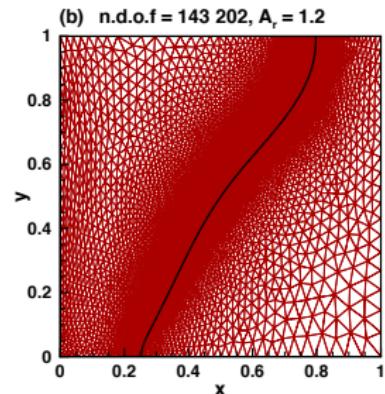
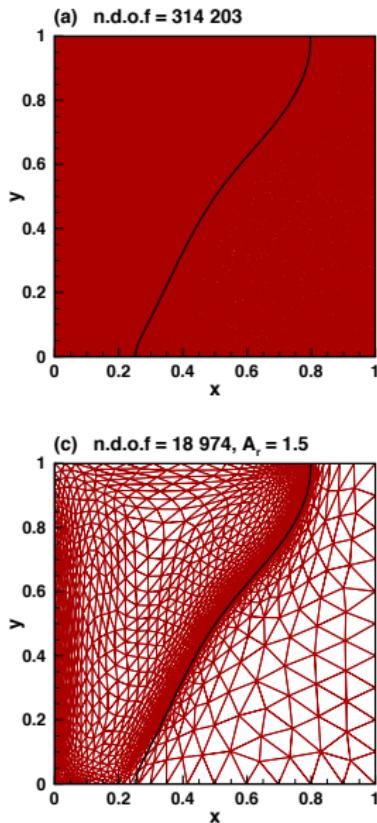
$$A_r = 1.2$$

$$A_r = 1.5$$

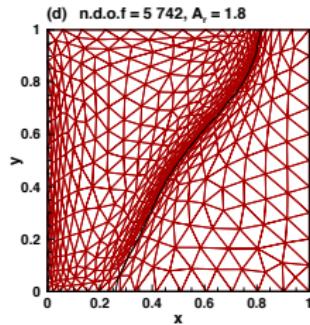
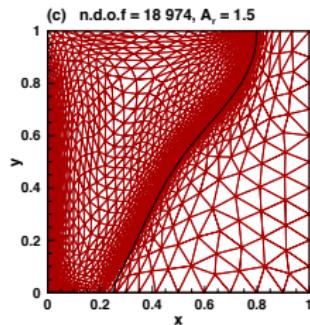
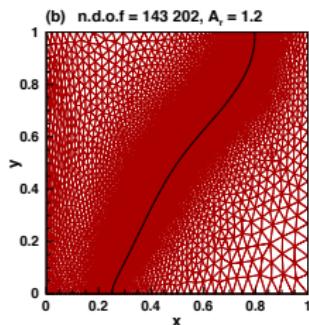
$$A_r = 1.8$$

Métriques

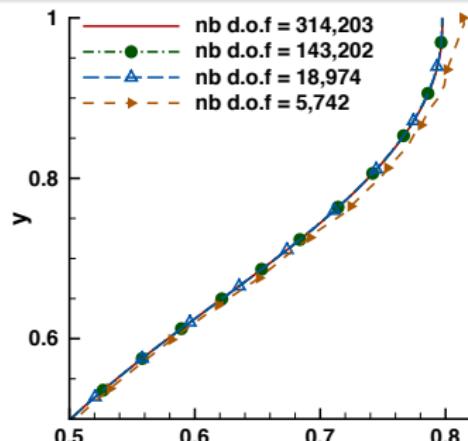
Calculées par rapport à u , θ , $S(\theta)$.



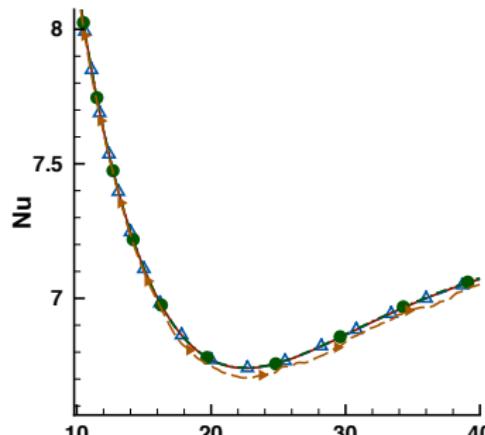
Influence du maillage adapté



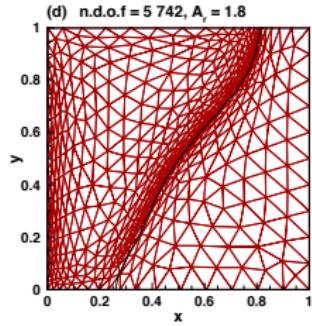
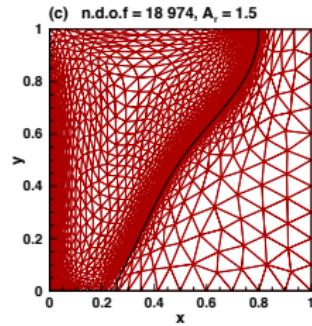
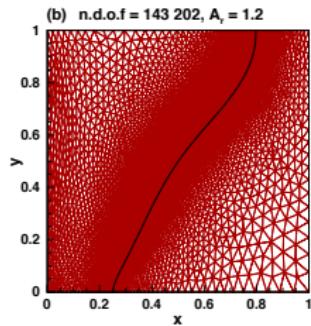
Position de l'interface



Evolution du nombre de Nusselt



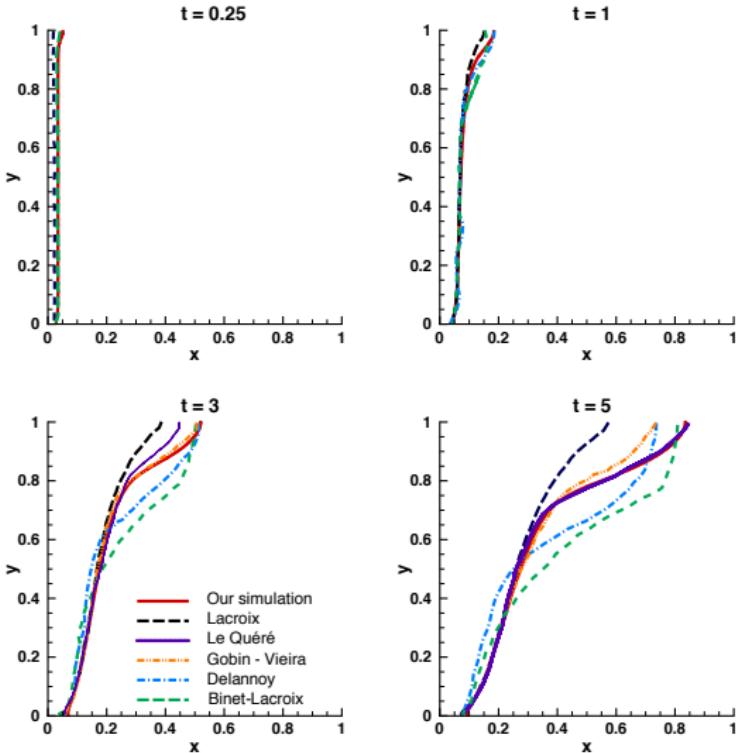
Influence du maillage adapté



h_{min}	h_{max}	A_r	ε_h	n.d.o.f
10^{-3}	10^{-1}	1.5	10^{-2}	18974

Fusion d'un MCP : $\mathcal{R}a = 10^8$

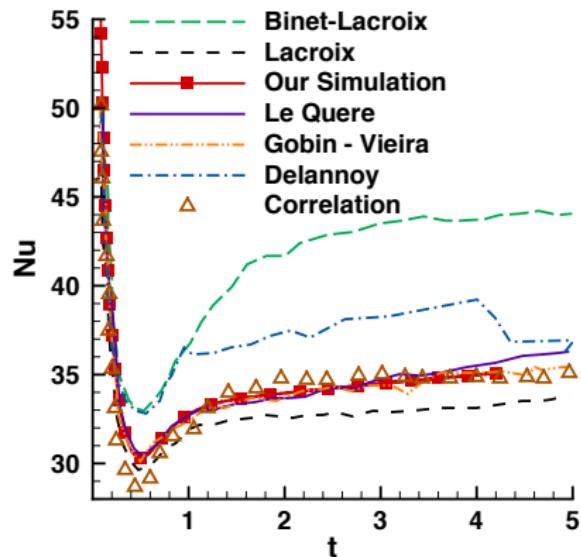
C_{CK}	10^6
h_{min}	10^{-3}
h_{max}	10^{-1}
A_r	1.5
ε_h	10^{-2}
n.d.o.f	31065



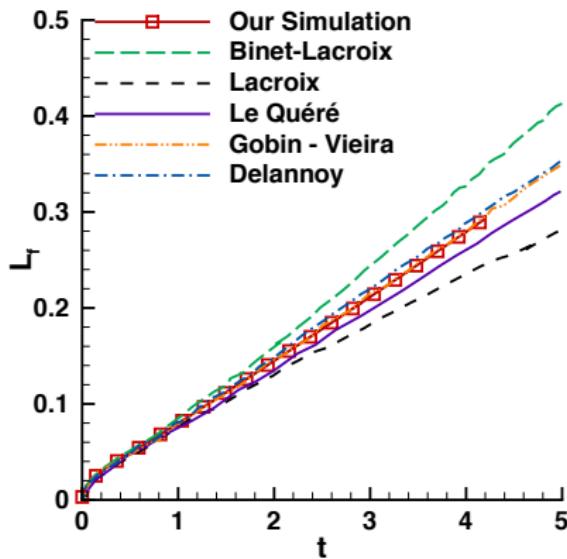
Comparaison avec [Bertrand, IJTS (1999)].

Fusion d'un MCP : $\mathcal{R}a = 10^8$

Nusselt à la paroi chaude



Évolution de la fraction liquide

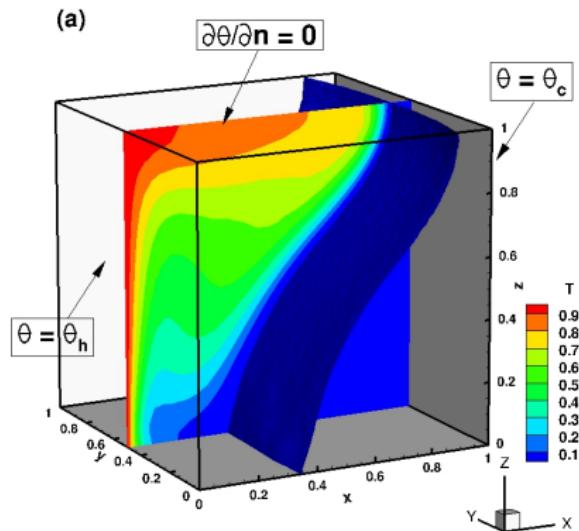


$$(*) \mathcal{N}u(\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\tau}} + \left[0.33\mathcal{R}a^{1/4} - \frac{1}{\sqrt{2\tau}} \right] \left[1 + \left(0.0175\mathcal{R}a^{3/4}\tau^{3/2} \right)^{-2} \right]^2.$$

(*) [P. Jany and A. Bejan, IJHMT (1988)].

Fusion d'un MCP en 3D

Fusion d'un octadecane dans une cavité cubique différentiellement chauffée



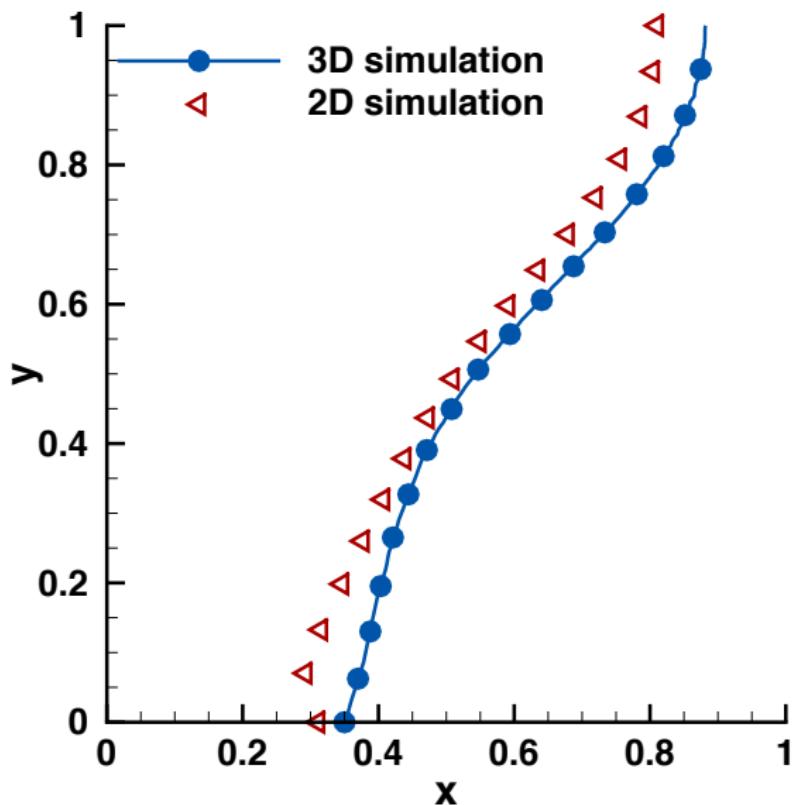
$$\mathcal{R}a = 3.27 \times 10^5$$

$$\mathcal{P}r = 56.2$$

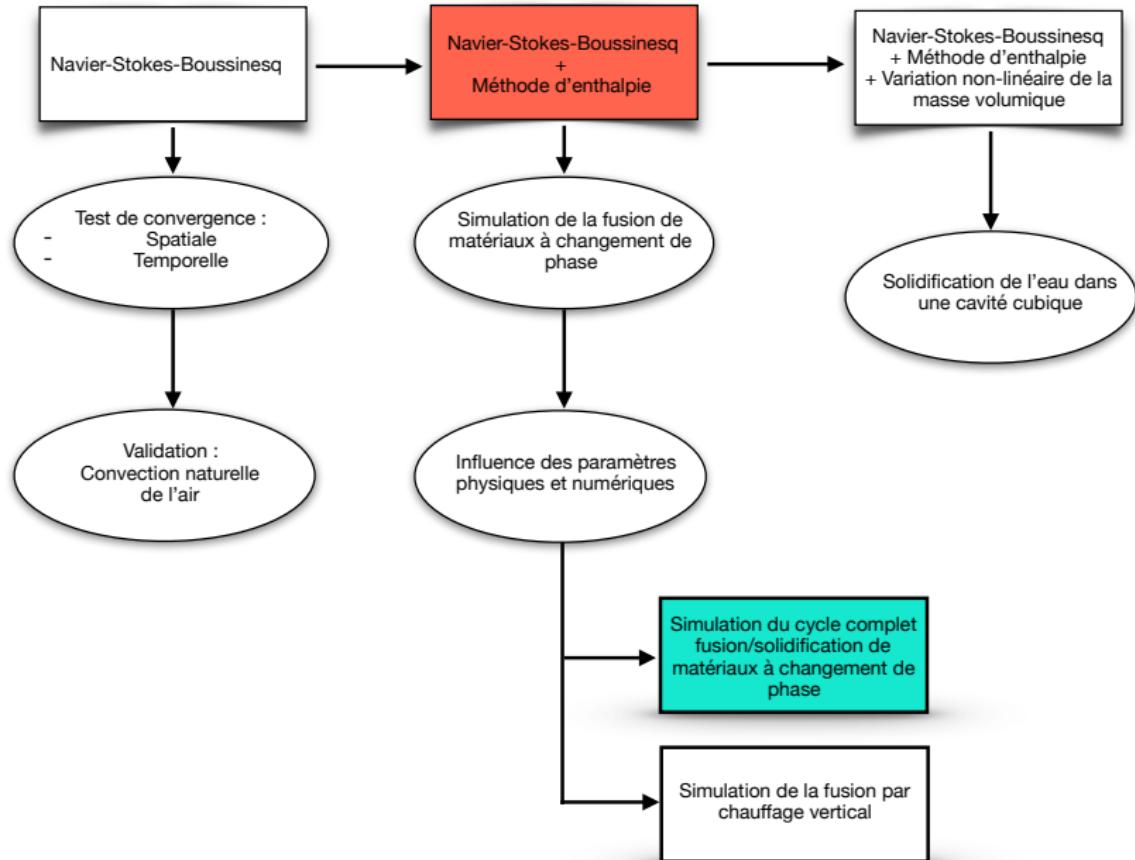
$$Ste = 0.045$$

Comparaison des résultats 2D et 3D

Comparaison de la position de l'interface à $t = 78.7$

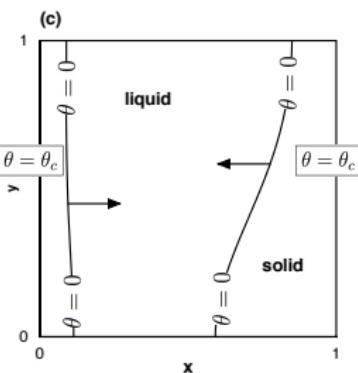
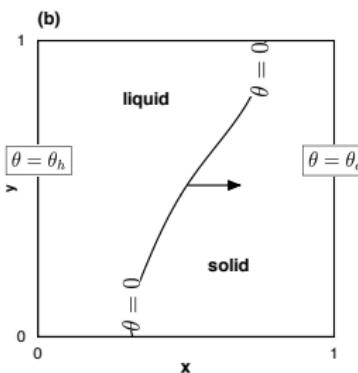
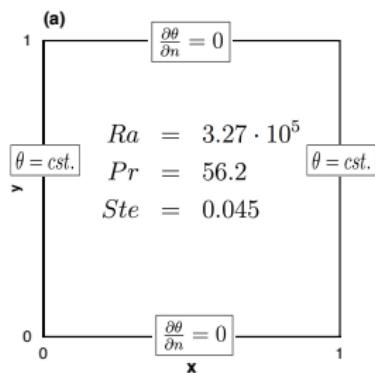


Plan de la thèse



Cycle complet fusion/solidification

Fusion d'un MCP suivie d'une re-solidification après une fusion partielle ou totale



Solidification après fusion partielle

Fusion

- $\delta T = T_h - T_f$
- $V_{ref} = \nu/H$

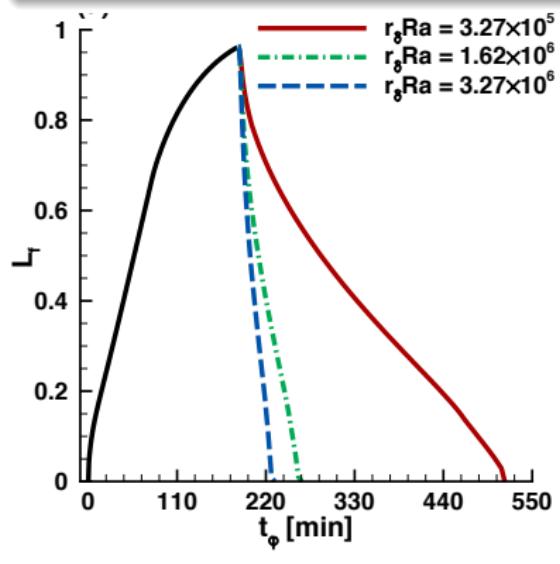
Solidification

- $\delta T = T_f - T_c$
- $V_{ref} = \alpha/H$
- $r_\delta = (T_f - T_c)/(T_h - T_f)$
- $\mathcal{R}a_{co} = r_\delta \times \mathcal{R}a$

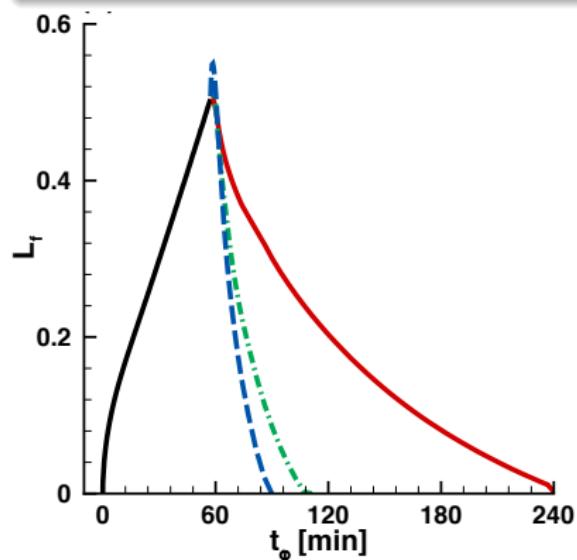


Evolution temporelle de la fraction liquide

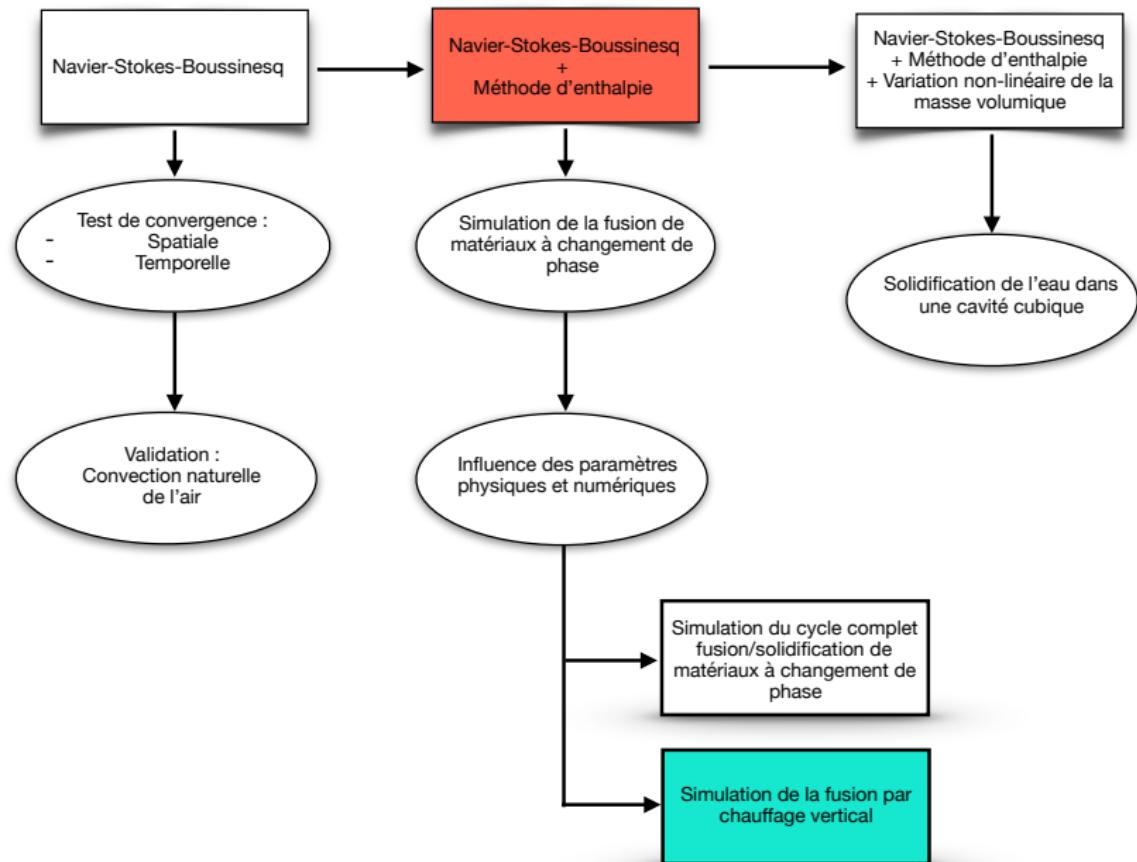
Fusion totale



Fusion partielle

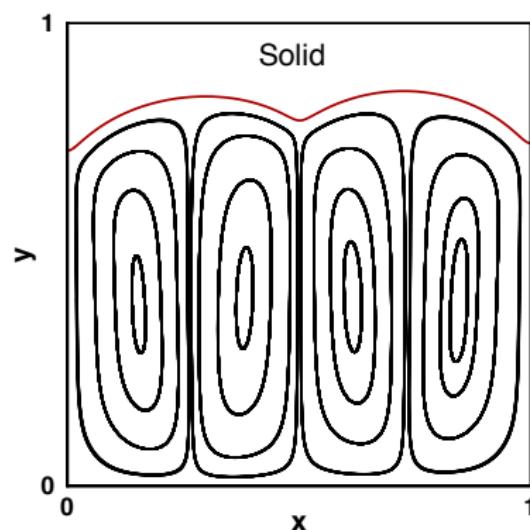
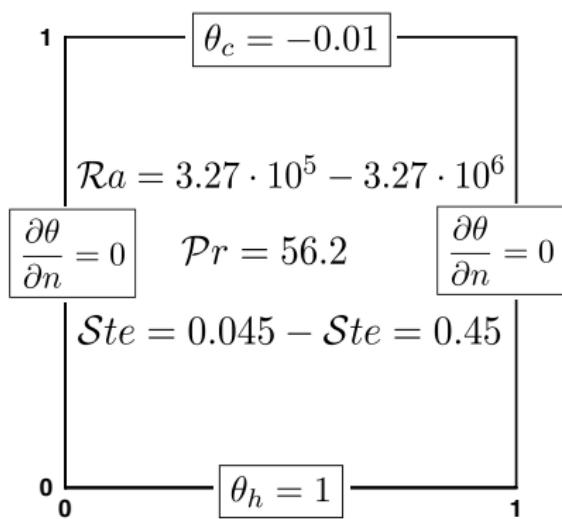


Plan de la thèse



Fusion vertical d'un MCP

- Chauffage par le bas.
- Présence de cellules de Rayleigh-Bénard.



Fusion vertical d'un MCP

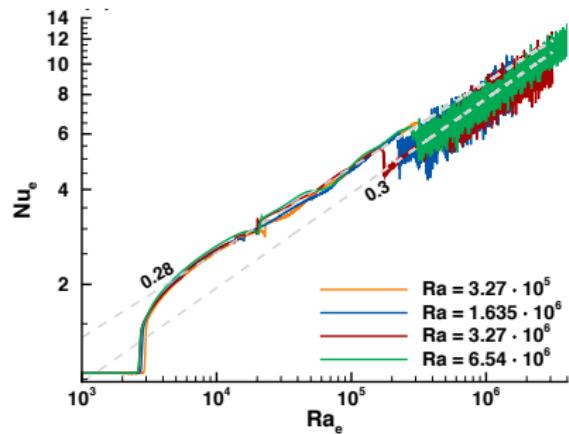
$$\mathcal{R}a = 3.27 \times 10^6$$

3 régimes

- **Conductif** : interface rectiligne.
- **Linéaire** : apparition des cellules convectives.
- **Oscillatoire** : regroupement des cellule de convections.

Chaudage vertical d'un MCP

Evolution temporelle du nombre de Nusselt effectif

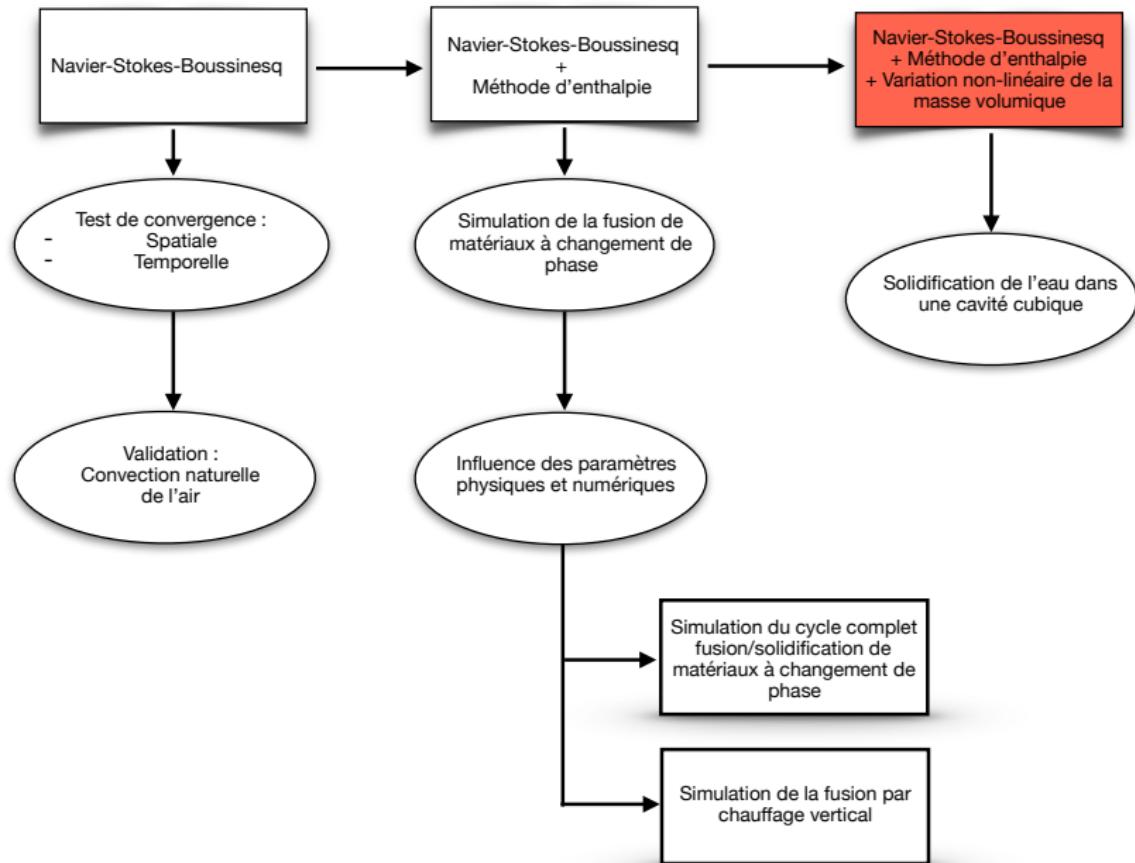


$$\mathcal{R}a_e = \mathcal{R}a \times \delta_H^3(t)$$

$$\mathcal{N}u_e = \mathcal{N}u \times \delta_H(t)$$

δ_H : hauteur du MCP fondu.

Plan de la thèse



Solidification de l'eau

Variation anormale de la masse volumique autour de $4^\circ C$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - f_B(\theta) \mathbf{e}_y = A(\theta) \mathbf{u},$$
$$\frac{\partial (C\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (C\theta \mathbf{u}) - \frac{K}{Pr Re} \nabla^2 \theta + \frac{\partial (CS)}{\partial t} = 0.$$

$$(*) \rho(T) = \rho_m (1 - w |T - T_m|^q),$$

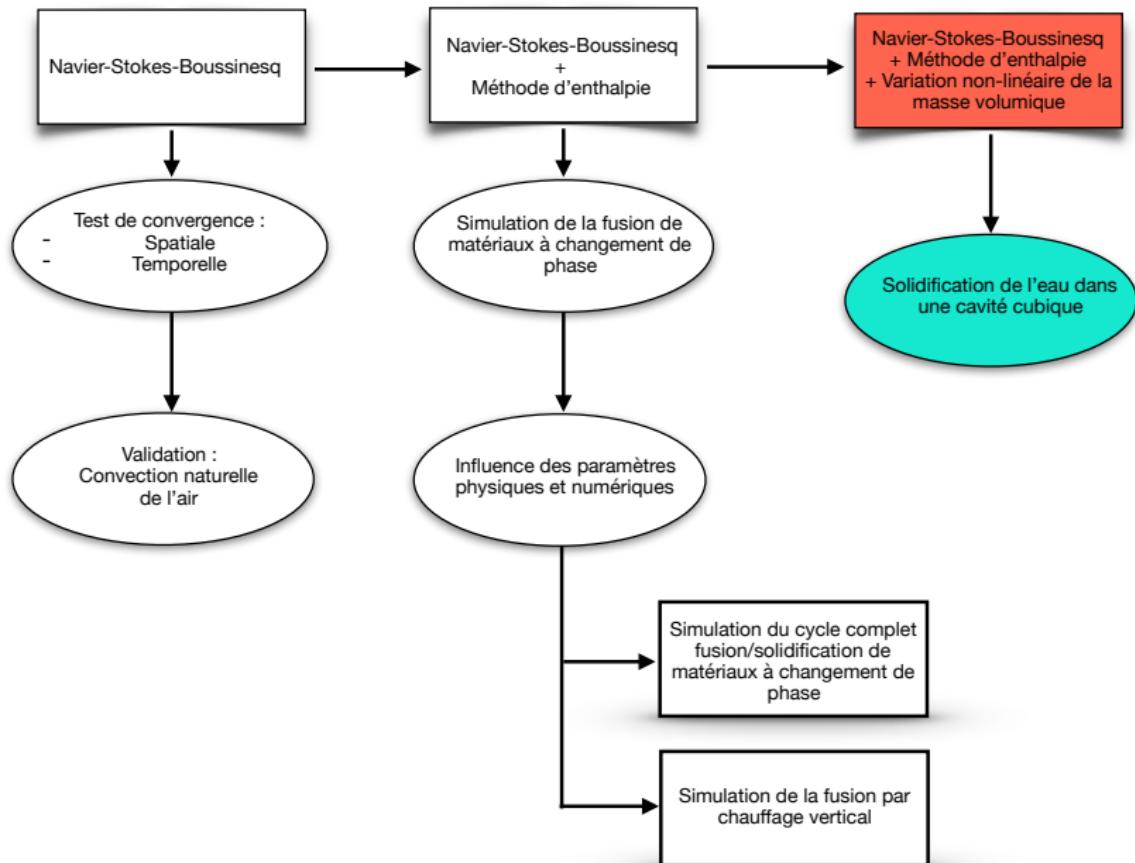
$$\rho_m = 999.972 \text{ [kg/m}^3], w = 9.2793 \cdot 10^{-6} [({}^\circ C)^{-q}], q = 1.894816.$$

$$f_B(\theta) = \frac{\mathcal{R}a}{Pr Re^2} \frac{1}{\beta \delta T} \frac{\rho(\theta_f) - \rho(\theta)}{\rho(\theta_f)}$$

(*) [Gebhart and Mollendorf, DSR (1977)].

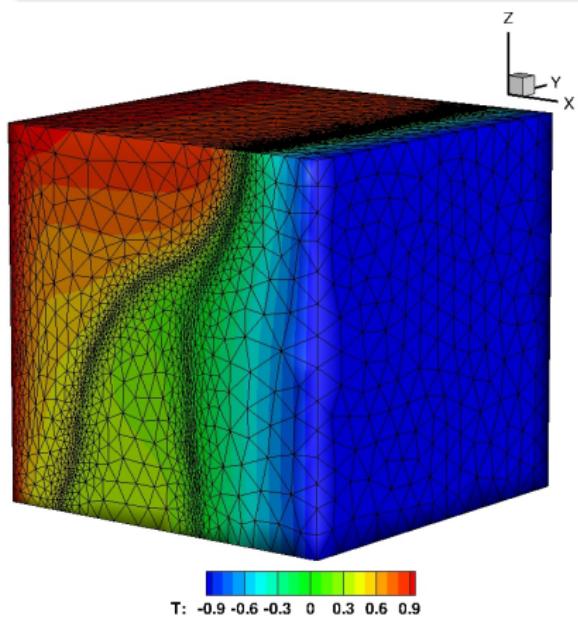


Plan de la thèse

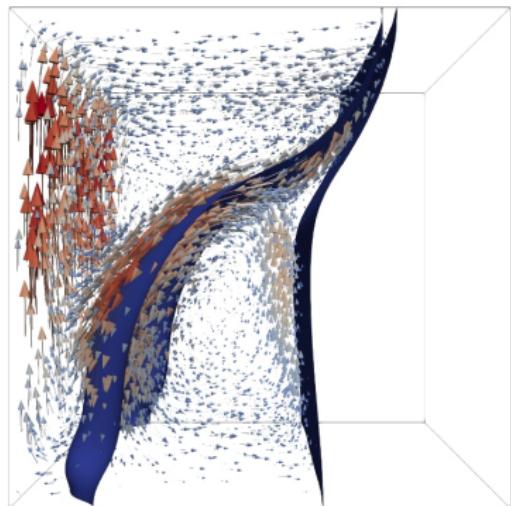


Formation d'un glaçon dans une cavité cubique

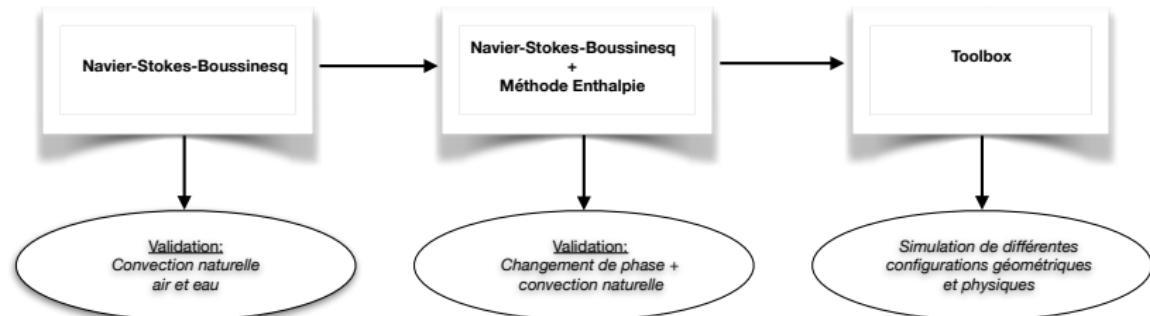
Maillage adapté



Champ de vecteurs et isosurfaces de température $\theta = 0$ et $\theta = 0.4$



Conclusion



- Implémentation d'un schéma implicit d'ordre 2.
- Pénalisation de la vitesse par le modèle de Carman-Kozeny.
- Validation du solveur N-S-B
- Validation du solveur N-S-B + Enthalpy.
- Adaptation du maillage à chaque pas de temps en 2D et 3D.
- Simulation de configuration complexes.

Amélioration du modèle physique

- Prise en compte de la surfusion
- Modélisation de mélanges binaires
- Masse volumique variable

Amélioration du système numérique

- Algorithme à pas de temps variable
- Tester d'autres préconditionneurs

Articles

- A. Rakotondrandisa, I. Danaila, L. Danaila, Numerical modelling of a melting-solidification cycle of a phase-change material with complete or partial melting. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2019.
- A. Rakotondrandisa, G. Sadaka, I. Danaila, A finite-element Toolbox for the simulation of solid-liquid phase-change systems with natural convection, *submitted to CPC, hal-02126697*, 2019
- G. Sadaka, A. Rakotondrandisa, F. Luddens, C. Lothodé, P-H. Tournier, I. Danaila, Parallel finite-element codes for the simulation of solid-liquid phase-change systems with natural convection, *to be submitted*, 2019

Conférences

Aina Rakotondrandisa, Georges Sadaka, Ionut Danaila, Corentin Lothodé, Francky Luddens, Pierre Jolivet, Pierre-Henri Tournier, Parallel 2D and 3D numerical simulations of melting with convection - workshop VAVIDEN - Rouen 2019.

A. Rakotondrandisa, I. Danaila, S. Le Masson, L. Danaila, Numerical simulations of melting - solidification problems with natural convection. Application to phase-change materials - *12th European Fluid Mechanics Conference* - Vienne 2018.

A. Rakotondrandisa, I. Danaila, F. Hecht, C. Lothodé, F. Luddens, P. H. Tournier, Modélisation et simulation de matériaux à changement de phase - *Congrès National d'Analyse Numérique - Cap d'Agde* 2018

A. Rakotondrandisa, I. Danaila, Simulations of phase change materials using a Finite Element method with mesh adaptivity - *Journée Maths-Physique-Industrie sur les matériaux à changement de phase* - Rouen 2016

Prix

Prix scientifique de l'École doctorale Mathématiques, Information, Ingénierie des Systèmes, Normandie Université. (2017)

Finaliste régionale "Ma thèse en 180 s", Caen 2017.

