

Modélisation et simulation numérique de matériaux à changement de phase

Aina Rakotondrandisa¹

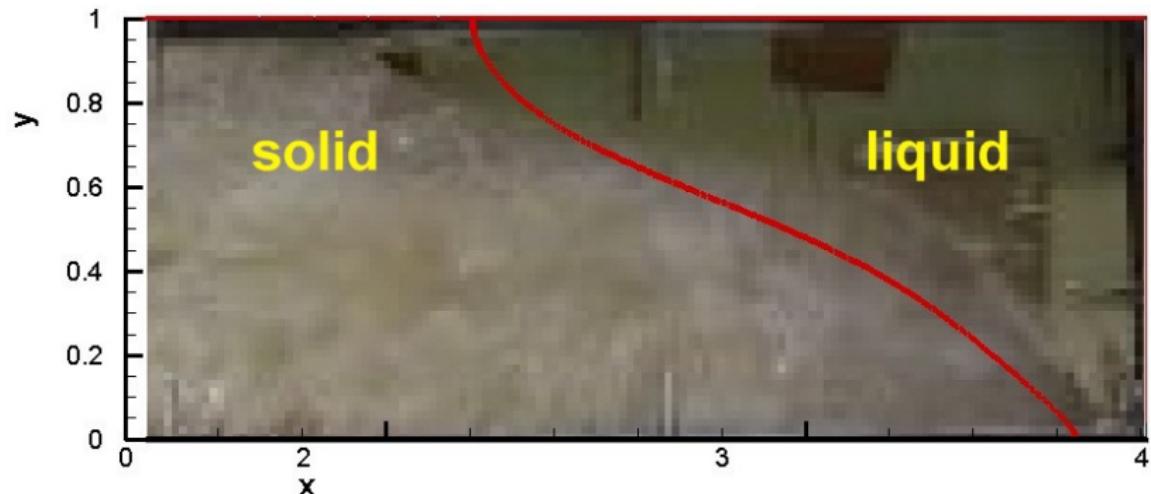
Directeur de thèse : Ionut Danaila¹

¹LMRS, Université de Rouen Normandie,

vendredi 27 septembre 2019



Problème physique et motivations

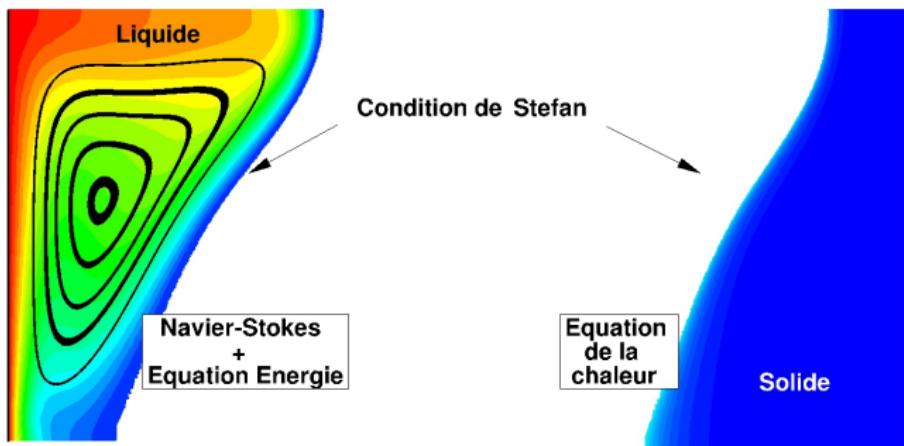


Orange labs, Lannion, France.

*MCP = Matériaux à Changement de Phase

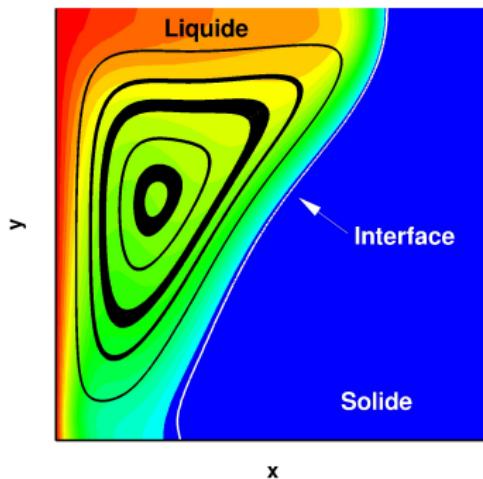
Méthodes de résolution existantes

Méthode de suivi d'interface.

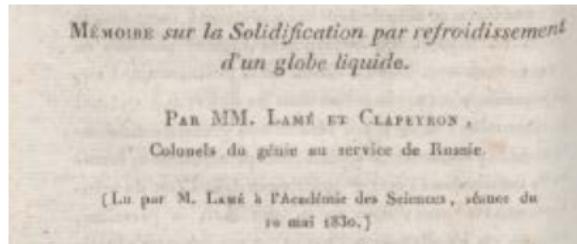


Méthodes de résolution existantes

Méthode mono-domaine.



Historique



G. Lamé and B. P. Clapeyron, Ann. Chem. Phys. (1831)

Über die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere

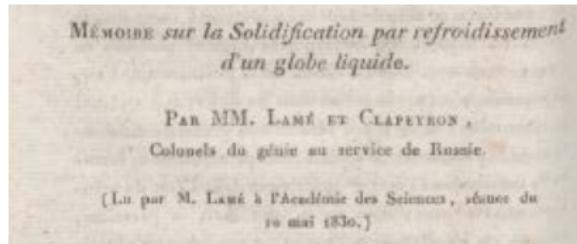
von
J. Stefan,
w. M. k. Akad.

J. Stefan, Ann. of Phys. and Chem. (1891)

* Sur la théorie de la formation de la glace dans les mers polaires

- 1890 : Problème de Stefan
- 1980 : Regain d'intérêt
- 2000 : Développement de codes
- Actuelle : Intérêt pour le stockage d'énergie par changement de phase

Historique



G. Lamé and B. P. Clapeyron, Ann. Chem. Phys. (1831)

Über die Theorie der Eisbildung, insbesondere über
die Eisbildung im Polarmeere

von
J. Stefan,
w. M. k. Akad.

J. Stefan, Ann. of Phys. and Chem. (1891)

* Sur la théorie de la formation de la glace dans les mers
polaires

- 1890 : Problème de Stefan
- 1980 : Regain d'intérêt
- 2000 : Développement de codes
- Actuelle : Intérêt pour le stockage d'énergie par changement de phase

Applications



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

Applications

- bâtiment,
- stockage d'énergie,
- appareils électroniques,
- médecine,
- ...

Applications

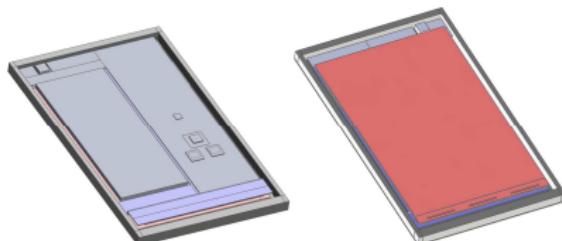


X. Kong et. al, *Energy and Buildings* (2014).

Applications

- bâtiment,
- stockage d'énergie,
- appareils électroniques,
- médecine,
- ...

Applications



D. Groulx, TFESC (2015)

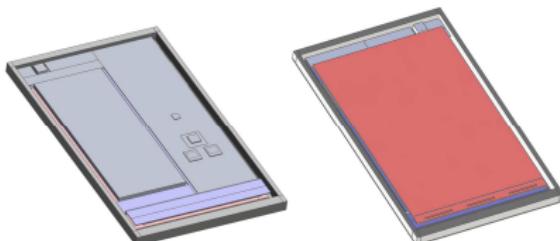


X. Kong et. al, *Energy and Buildings* (2014).

Applications

- bâtiment,
- stockage d'énergie,
- appareils électroniques,
- médecine,
- ...

Applications



D. Groulx, TFESC (2015)

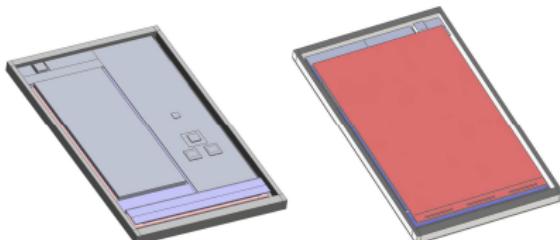


X. Kong et. al, *Energy and Buildings* (2014).

Applications

- bâtiment,
- stockage d'énergie,
- appareils électroniques,
- médecine,
- ...

Applications



D. Groulx, TFESC (2015)

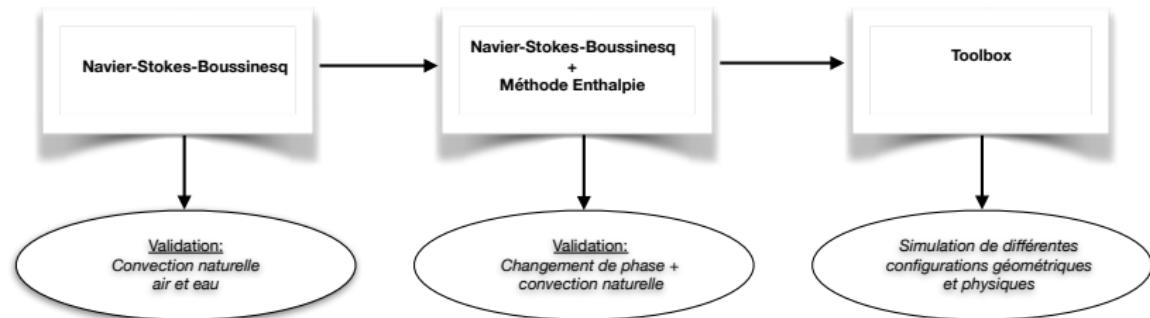


X. Kong et. al, *Energy and Buildings* (2014).

Applications

- bâtiment,
- stockage d'énergie,
- appareils électroniques,
- médecine,
- ...

Plan de la thèse



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.



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.



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.



Plan

1 Modèle mathématique

- Navier-Stokes-Boussinesq
- Modèle de Carman-Kozeny
- Méthode d'enthalpie

2 Système numérique

- Formulation variationnelle
- Algorithme de Newton
- Test de convergence
- Méthode de décomposition de domaine

3 Résultat des simulations numériques en 2D

- Convection naturelle de l'air
- Fusion et solidification d'un MCP

4 Résultat des simulations numériques en 3D

- Fusion d'un MCP dans une cavité cubique
- Formation d'un glaçon dans une cavité cubique

Plan

1 Modèle mathématique

- Navier-Stokes-Boussinesq
- Modèle de Carman-Kozeny
- Méthode d'enthalpie

2 Système numérique

- Formulation variationnelle
- Algorithme de Newton
- Test de convergence
- Méthode de décomposition de domaine

3 Résultat des simulations numériques en 2D

- Convection naturelle de l'air
- Fusion et solidification d'un MCP

4 Résultat des simulations numériques en 3D

- Fusion d'un MCP dans une cavité cubique
- Formation d'un glaçon dans une cavité cubique



Navier-Stokes-Boussinesq

Approche mono-domaine :

Navier-Stokes-Boussinesq

Approche mono-domaine :

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



Navier-Stokes-Boussinesq

Approche mono-domaine :

interface solide-liquide : iso-ligne de température $\theta = 0$.

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

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

$$Re = \frac{V_{ref} h}{\nu_{liq}}, \quad Pr = \frac{\nu_l}{\alpha_l}, \quad Ra = \frac{g \beta h^3 \delta T}{\nu_l \alpha_l}, \quad Ste = \frac{c \delta T}{L}.$$

Re : nombre de Reynolds, Pr : nombre de Prandtl,
 Ra : nombre de Rayleigh, Ste : nombre de Stefan.



Modèle de Carman-Kozeny

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

Modèle de Carman-Kozeny

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

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

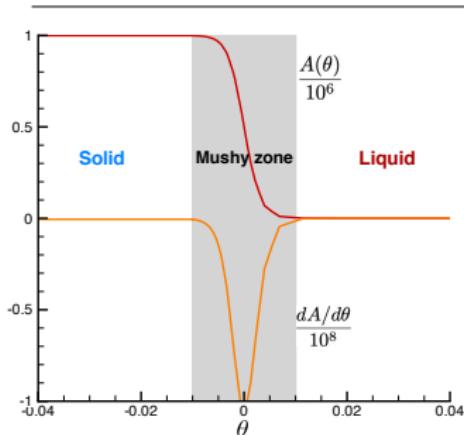
$$L_f(\theta) = 1 + \frac{1}{2} \left\{ 1 + \tanh \left(\frac{\theta_f - \theta}{R_f} \right) \right\},$$

C_{CK} : constante de Carman-Kozeny,
 L_f : fraction liquide.



Modèle de Carman-Kozeny

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



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

C_{CK} : constante de Carman-Kozeny,
 L_f : fraction liquide.

Méthode d'enthalpie

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

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

$$\frac{\partial (C\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (C\theta \mathbf{u}) - \frac{K}{Pr Re} \nabla^2 \theta + \frac{\partial (CS)}{\partial t} = 0.$$

⁽¹⁾ $H = c(s + T)$: chaleur latente + chaleur sensible.

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

⁽¹⁾ [Voller, IJHMT (1987)]



Plan

1 Modèle mathématique

- Navier-Stokes-Boussinesq
- Modèle de Carman-Kozeny
- Méthode d'enthalpie

2 Système numérique

- Formulation variationnelle
- Algorithme de Newton
- Test de convergence
- Méthode de décomposition de domaine

3 Résultat des simulations numériques en 2D

- Convection naturelle de l'air
- Fusion et solidification d'un MCP

4 Résultat des simulations numériques en 3D

- Fusion d'un MCP dans une cavité cubique
- Formation d'un glaçon dans une cavité cubique

Système numérique

- Discretisation temporelle : schéma implicite d' ordre deux (BDF2).
- Discretisation spatiale : éléments finis de Taylor Hood. \mathbb{P}_2 pour la vitesse et \mathbb{P}_1 pour la pression.
- Algorithme de Newton.
- Implémentation avec le logiciel élément fini FreeFem++.
- Adaptation de maillage à chaque pas de temps.
- 3D : librairie FFDDM. Décomposition de domaine.
- Adaptation de maillage 3D : MMG3D et MSHMET.

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



Système numérique

- Discretisation temporelle : schéma implicite d' ordre deux (BDF2).
- Discretisation spatiale : éléments finis de Taylor Hood. \mathbb{P}_2 pour la vitesse et \mathbb{P}_1 pour la pression.
- Algorithme de Newton.
- Implémentation avec le logiciel élément fini FreeFem++.
- Adaptation de maillage à chaque pas de temps.
- 3D : librairie FFDDM. Décomposition de domaine.
- Adaptation de maillage 3D : MMG3D et MSHMET.

Système numérique

- Discretisation temporelle : schéma implicite d' ordre deux (BDF2).
- Discretisation spatiale : éléments finis de Taylor Hood. \mathbb{P}_2 pour la vitesse et \mathbb{P}_1 pour la pression.
- Algorithme de Newton.
- Implémentation avec le logiciel élément fini FreeFem++.
- Adaptation de maillage à chaque pas de temps.
- 3D : librairie FFDDM. Décomposition de domaine.
- Adaptation de maillage 3D : MMG3D et MSHMET.

Formulation variationnelle

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

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

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

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



Résolution avec Newton

Avancement de t^n à t^{n+1} par un algorithme de Newton.

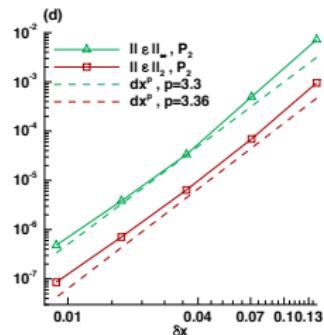
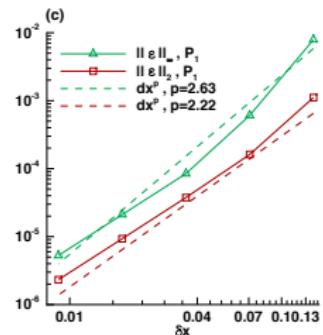
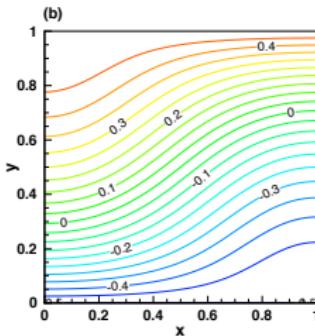
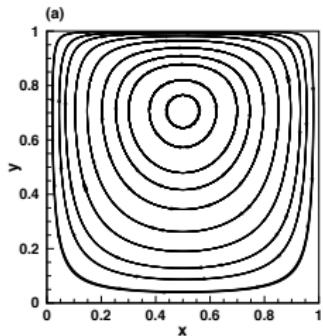
$$\begin{aligned} b \left(\mathbf{u}^{k+1}, q \right) - \gamma(p^{k+1}, q) &= 0, \\ \frac{3}{2\delta t} \left(\mathbf{u}^{k+1}, \mathbf{v} \right) + c \left(\mathbf{u}^{k+1}; \mathbf{u}^k, \mathbf{v} \right) &+ c \left(\mathbf{u}^k; \mathbf{u}^{k+1}, \mathbf{v} \right) \\ + a \left(\mathbf{u}^{k+1}, \mathbf{v} \right) - \left(\frac{dA}{d\theta}(\theta^k) \theta^{k+1} \mathbf{u}^k, \mathbf{v} \right) &- \left(A(\theta^k) \mathbf{u}^{k+1}, \mathbf{v} \right) + b \left(\mathbf{v}, p^{k+1} \right) \\ - \left(\frac{df_B}{d\theta}(\theta_k) \theta^{k+1} \mathbf{e}_y, \mathbf{v} \right) &= \frac{1}{\delta t} \left(2\mathbf{u}^n - \frac{1}{2}\mathbf{u}^{n-1}, \mathbf{v} \right) \\ + c \left(\mathbf{u}^k; \mathbf{u}^k, \mathbf{v} \right) &- \left(\frac{dA}{d\theta}(\theta^k) \theta^k \mathbf{u}^k, \mathbf{v} \right), \\ \frac{3}{2\delta t} \left(\theta^{k+1} + \frac{dS}{d\theta}(\theta^k) \theta^{k+1}, \phi \right) - \left(\mathbf{u}^k \cdot \nabla \phi, \theta^{k+1} \right) &- \left(\mathbf{u}^{k+1} \cdot \nabla \phi, \theta^k \right) \\ + \left(\frac{K}{RePr} \nabla \theta^{k+1}, \nabla \phi \right) &= \frac{2}{\delta t} \left(\theta^n + S(\theta^n), \phi \right) \\ - \left(\mathbf{u}^k \cdot \nabla \phi, \theta^k \right) + \frac{1.5}{\delta t} \left(\frac{dS}{d\theta}(\theta^k) \theta^k - S(\theta^n), \phi \right) &- \frac{1}{2\delta t} \left(\theta^{n-1} + S(\theta^{n-1}), \phi \right). \end{aligned}$$



Test de convergence

Burggraf : cavité entraînée

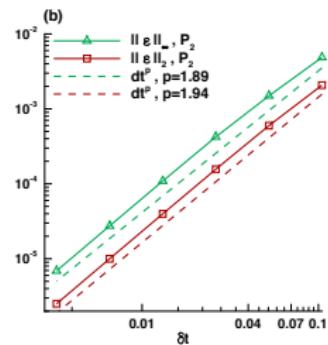
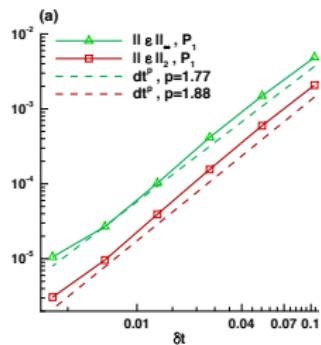
- Solution stationnaire



Test de convergence

Solution manufacturée, [Nourgaliev, JCP] (2016)

- $\delta x = 10^{-2}$ et $t_f = \pi/3$



Méthode de décomposition de domaine

Problématique

Résoudre un système linéaire de grande taille $Au = b \in \mathbb{R}^n$

Méthode de décomposition de domaine

Problématique

Résoudre un système linéaire de grande taille $Au = b \in \mathbb{R}^n$

Avantages et limitations des méthodes directes :

- Méthodes robustes
- Besoin de beaucoup de mémoire
- Peu parallélisable

Méthode de décomposition de domaine

Problématique

Résoudre un système linéaire de grande taille $Au = b \in \mathbb{R}^n$

Avantages et limitations des méthodes directes :

- Méthodes robustes
- Besoin de beaucoup de mémoire
- Peu parallélisable

Avantages et limitations des méthodes itératives :

- Méthodes peu robustes
- Besoin de peu de mémoire
- Parallélisable



DDM de type Schwarz avec recouvrement

Considérons le système linéaire $Au = b \in \mathbb{R}^n$

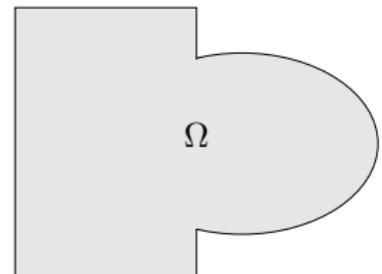
Étant donnée une décomposition de $\llbracket 1; n \rrbracket$, $(\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2)$, on définit :
l'opérateur de restriction R_i de $\llbracket 1; n \rrbracket$ dans \mathcal{N}_i ,
 R_i^T comme l'extension par 0 de \mathcal{N}_i dans $\llbracket 1; n \rrbracket$.

On résout simultanément :

$$u_1^{m+1} = u_1^m + A_{11}^{-1} R_1(b - Au^m) \quad u_2^{m+1} = u_2^m + A_{22}^{-1} R_2(b - Au^m)$$

ou $u_i = R_i u$ et $A_{ij} := R_i A R_j^T$

[Schwarz 1870]



DDM de type Schwarz avec recouvrement

Considérons le système linéaire $Au = b \in \mathbb{R}^n$

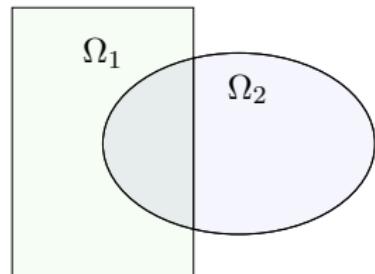
Étant donnée une décomposition de $\llbracket 1; n \rrbracket$, $(\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2)$, on définit :
l'opérateur de restriction R_i de $\llbracket 1; n \rrbracket$ dans \mathcal{N}_i ,
 R_i^T comme l'extension par 0 de \mathcal{N}_i dans $\llbracket 1; n \rrbracket$.

On résout simultanément :

$$u_1^{m+1} = u_1^m + A_{11}^{-1} R_1(b - Au^m) \quad u_2^{m+1} = u_2^m + A_{22}^{-1} R_2(b - Au^m)$$

ou $u_i = R_i u$ et $A_{ij} := R_i A R_j^T$

[Schwarz 1870]

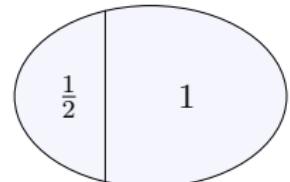
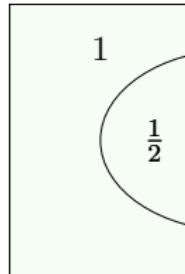


DDM de type Schwarz avec recouvrement

Inconnues *dupliquées* couplées via une *partition de l'unité* :

$$I = \sum_{i=1}^N R_i^T D_i R_i$$

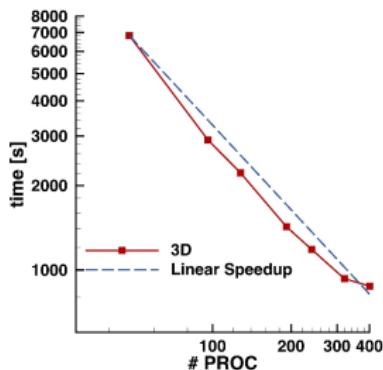
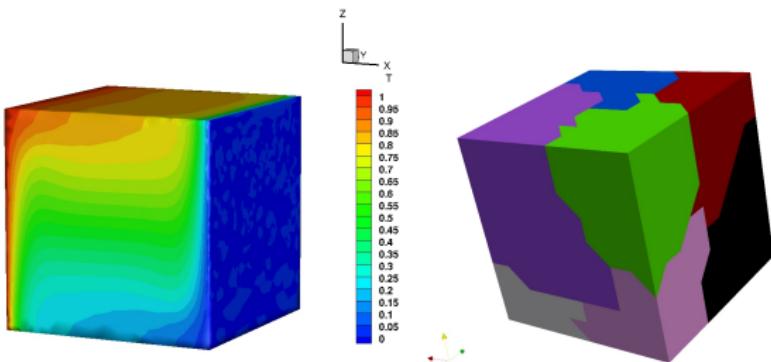
$$\implies u^{m+1} = \sum_{i=1}^N R_i^T D_i u_i^{m+1}$$



$$u^{m+1} = u^m + M^{-1}(b - Au^m)$$

$$M_{\text{ORAS}}^{-1} := \sum_{i=1}^N R_i^T D_i \mathcal{B}_i^{-1} R_i \quad \text{Conditions d'interface optimisées}$$

Test de scalabilité



N'	Factorization (s)	GMRES (s)	Total Step (s)
48	6186.33	473.66	6659.99
96	2468.68	283.099	2751.779
128	1814.26	237.853	2052.113
192	1111.5	169.174	1280.674
240	889.422	146.539	1035.961
320	674.204	114.346	788.55
400	614.418	107.422	721.84

Plan

1 Modèle mathématique

- Navier-Stokes-Boussinesq
- Modèle de Carman-Kozeny
- Méthode d'enthalpie

2 Système numérique

- Formulation variationnelle
- Algorithme de Newton
- Test de convergence
- Méthode de décomposition de domaine

3 Résultat des simulations numériques en 2D

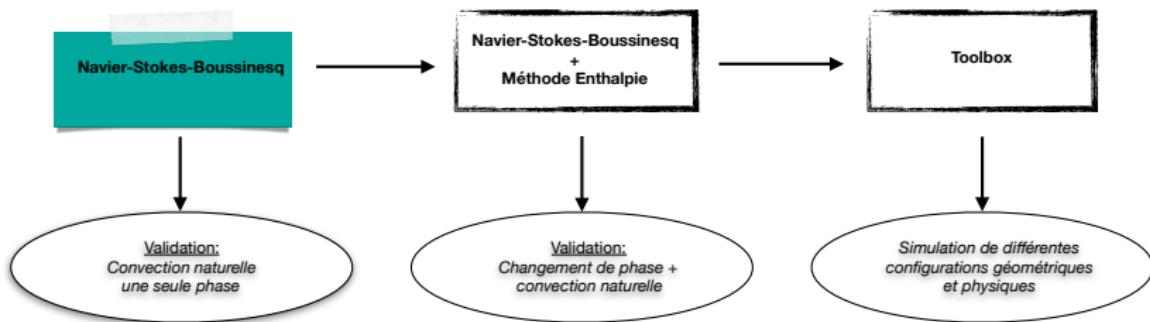
- Convection naturelle de l'air
- Fusion et solidification d'un MCP

4 Résultat des simulations numériques en 3D

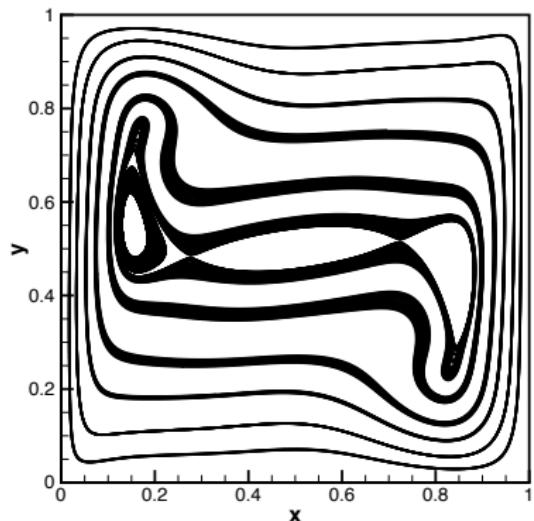
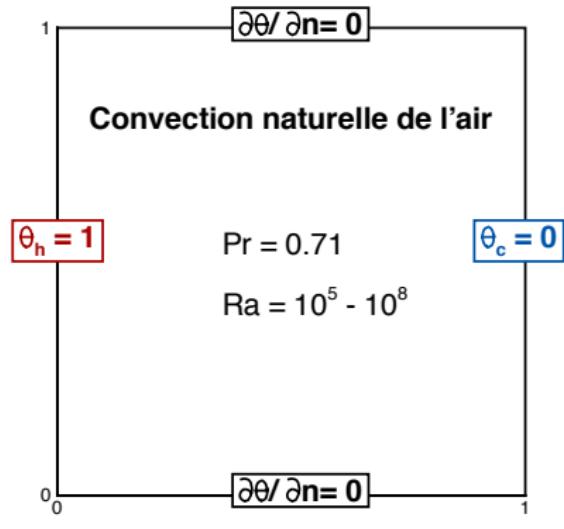
- Fusion d'un MCP dans une cavité cubique
- Formation d'un glaçon dans une cavité cubique



Convection naturelle de l'air

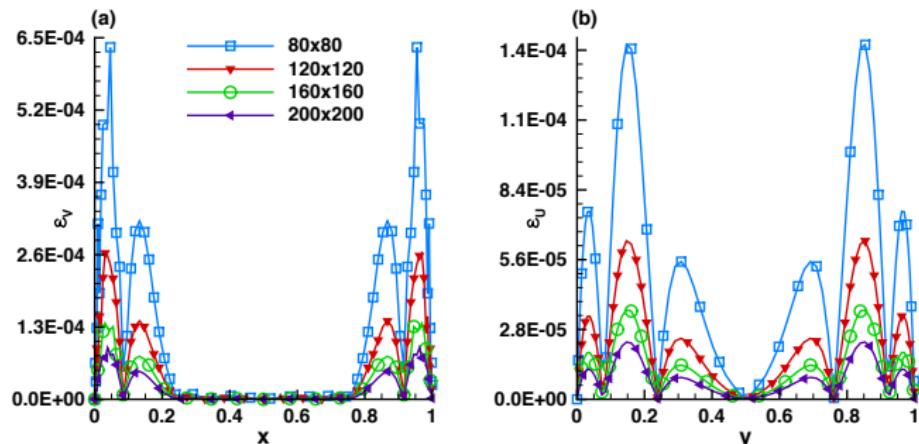


Convection naturelle de l'air



Convection naturelle de l'air : $\mathcal{R}a = 10^6$

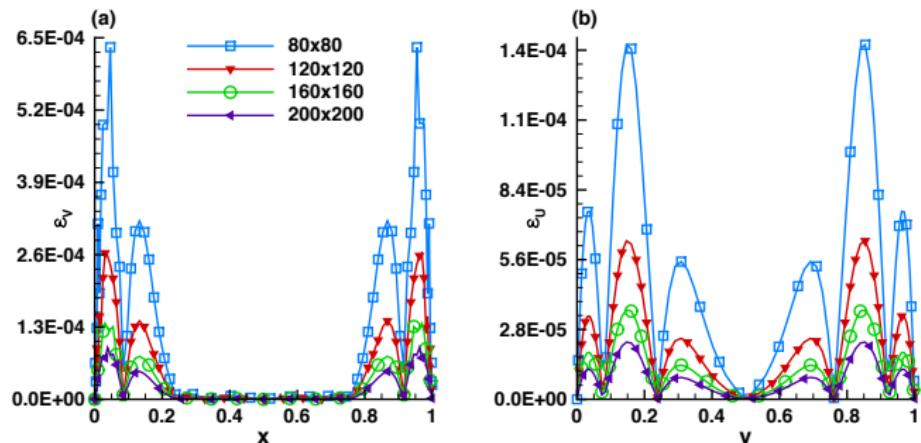
Comparaison avec le code spectral de [Le Quere, CF (1990)].



	u_{max} y	v_{max} x	Nu_0	$Nu_{1/2}$	Nu_{max} y	Nu_{min} y
$\mathcal{R}a = 10^6$	6.48369 0.850394	22.0306 0.0393701	8.82521	8.82513	17.5344 0.0393701	0.979543 1
[Le Quere]	6.48344 0.850	22.0559 0.038	8.8252	8.8252	17.5360 0.039	0.97946 1

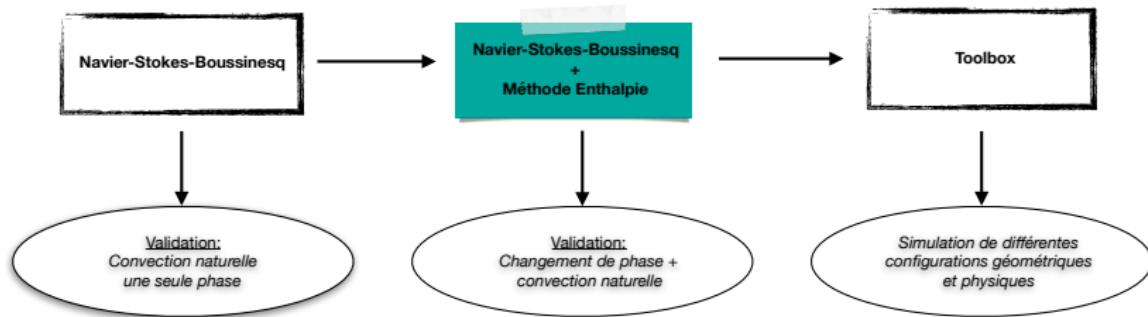
Convection naturelle de l'air : $\mathcal{R}a = 10^6$

Comparaison avec le code spectral de [Le Quere, CF (1990)].

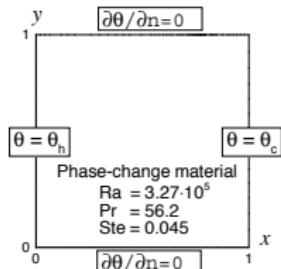


	u_{max} y	v_{max} x	Nu_0	$Nu_{1/2}$	Nu_{max} y	Nu_{min} y
$Ra = 10^6$	6.48369 0.850394	22.0306 0.0393701	8.82521	8.82513	17.5344 0.0393701	0.979543 1
[Le Quere]	6.48344 0.850	22.0559 0.038	8.8252	8.8252	17.5360 0.039	0.97946 1

Fusion d'un MCP

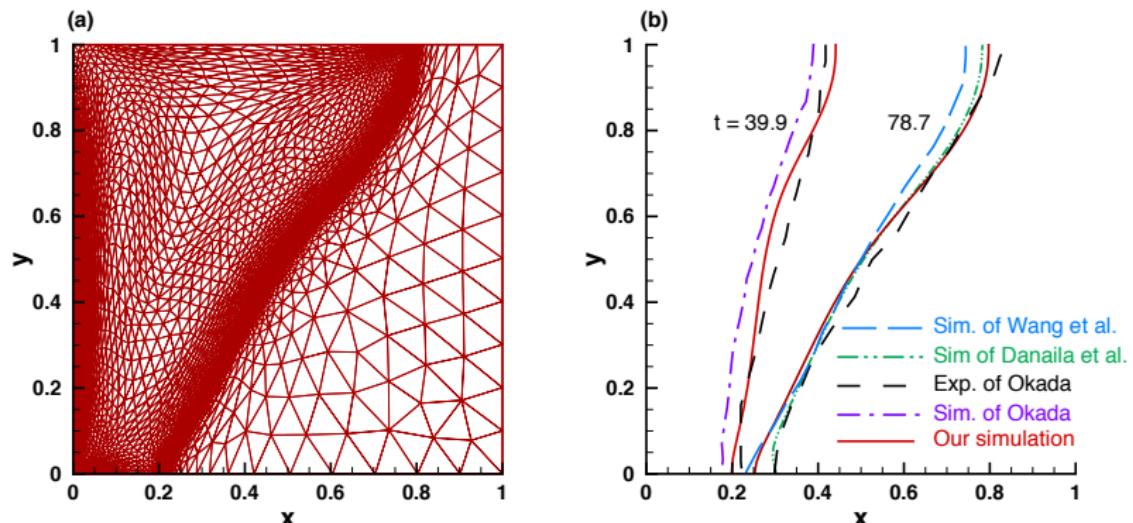


Fusion d'un MCP : $\mathcal{R}a = 3.27 \times 10^5$



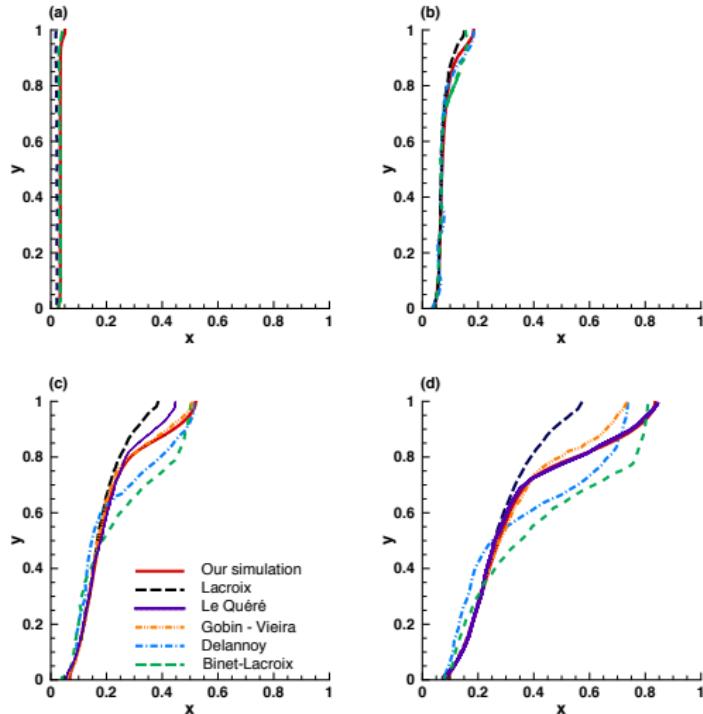
*Étude expérimentale de
[Okada, IJHMT (1984)].*
avec $\theta_h = 1$ et $\theta_c = -0.01$.

Position de l'interface solide-liquide



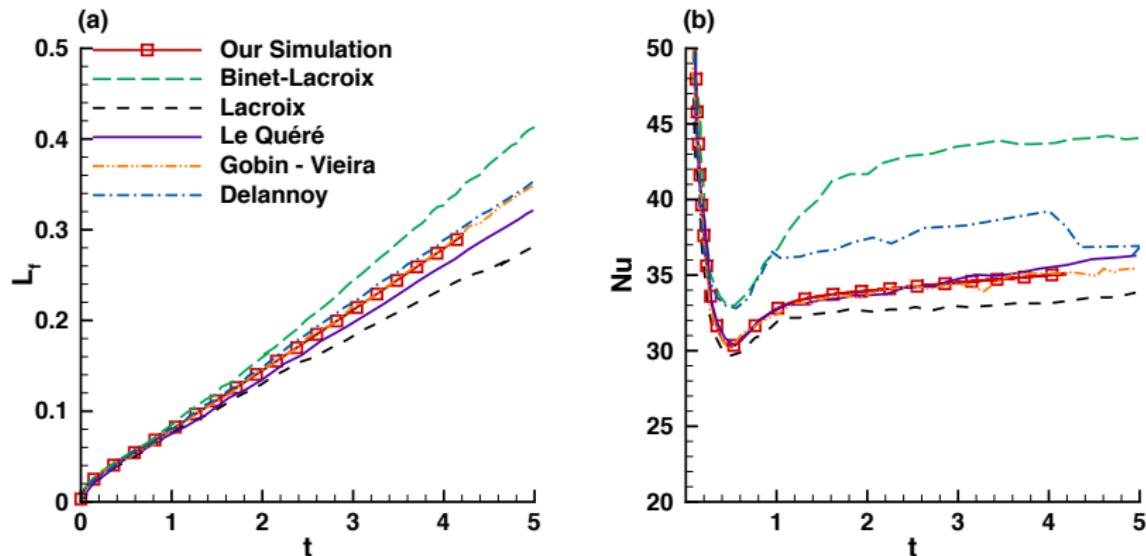
Comparaison avec les résultats expérimentaux de
[Okada, IJHFF (1984)].

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



Comparaison avec [Bertrand, IJTS (1999)].

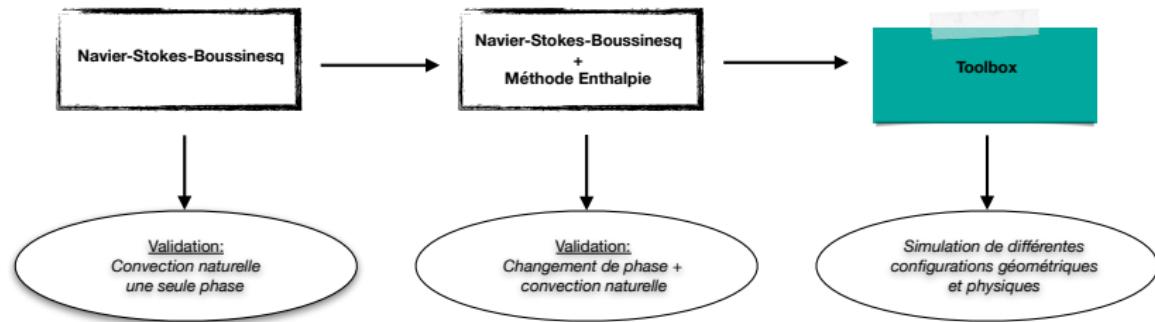
Fusion d'un MCP : $\mathcal{R}a = 10^8$



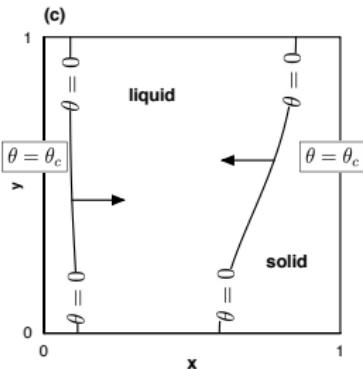
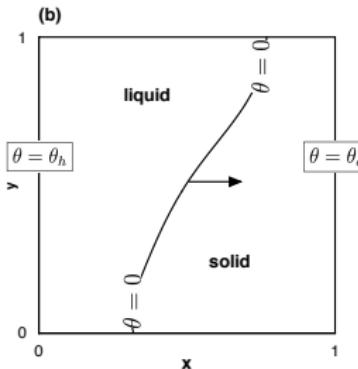
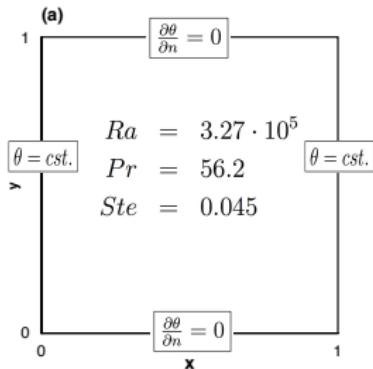
Comparaison avec [Bertrand, IJTS (1999)].

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

Simulation d'un cycle complet fusion / solidification

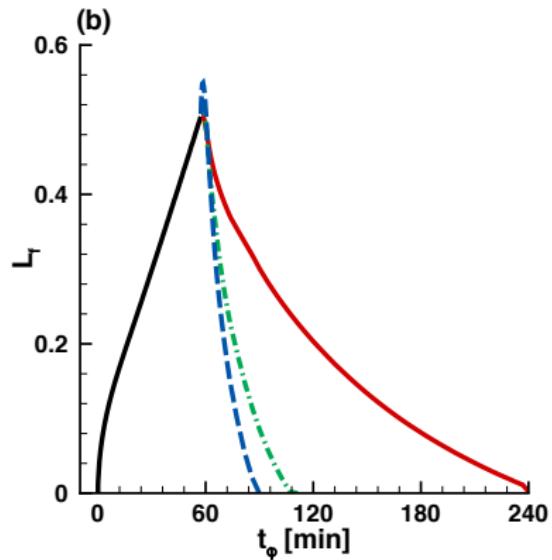
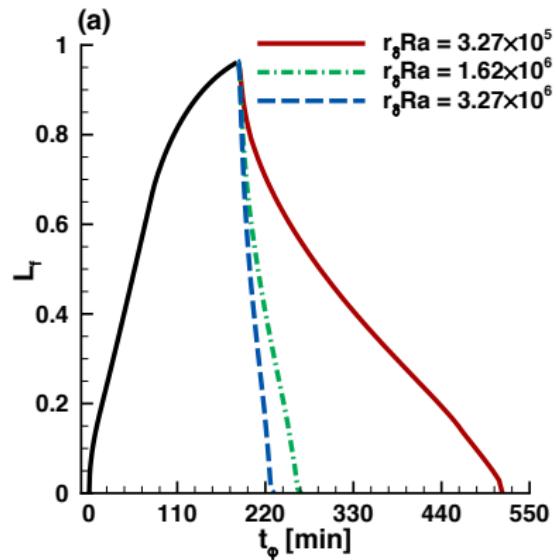


Cycle complet fusion / solidification

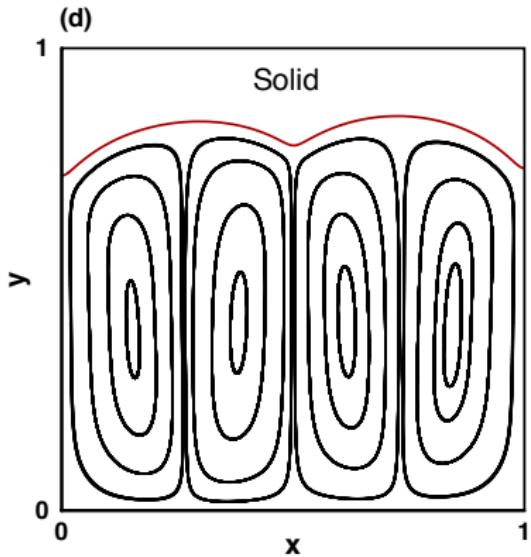
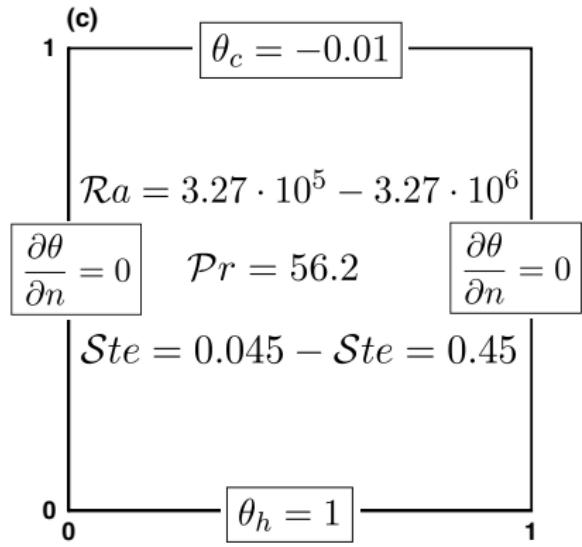


Cycle complet fusion / solidification

Cycle complet fusion / solidification

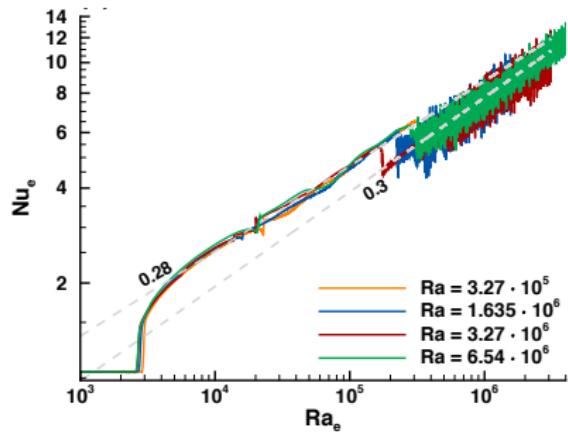


Chauffage vertical d'un MCP



Chaudage vertical d'un MCP

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



Plan

1 Modèle mathématique

- Navier-Stokes-Boussinesq
- Modèle de Carman-Kozeny
- Méthode d'enthalpie

2 Système numérique

- Formulation variationnelle
- Algorithme de Newton
- Test de convergence
- Méthode de décomposition de domaine

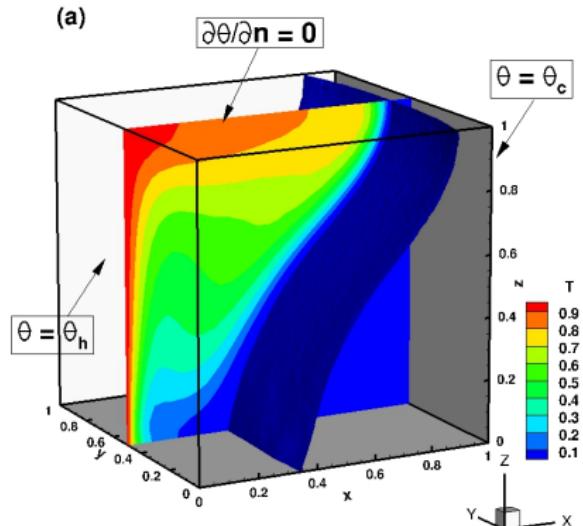
3 Résultat des simulations numériques en 2D

- Convection naturelle de l'air
- Fusion et solidification d'un MCP

4 Résultat des simulations numériques en 3D

- Fusion d'un MCP dans une cavité cubique
- Formation d'un glaçon dans une cavité cubique

Fusion d'un MCP dans une cavité cubique

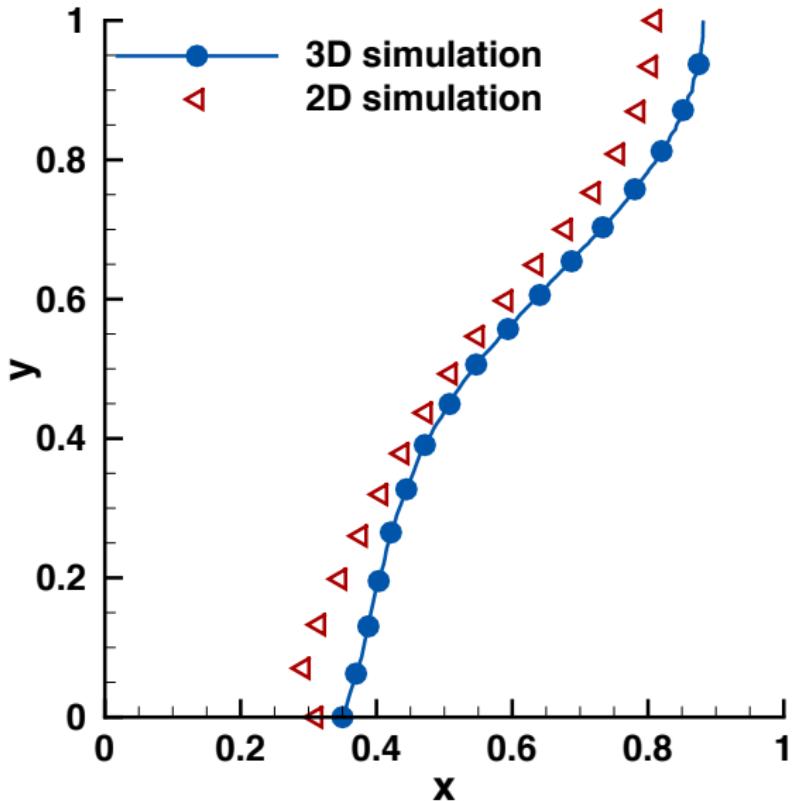


$$\mathcal{R}a = 3.27 \times 10^5$$

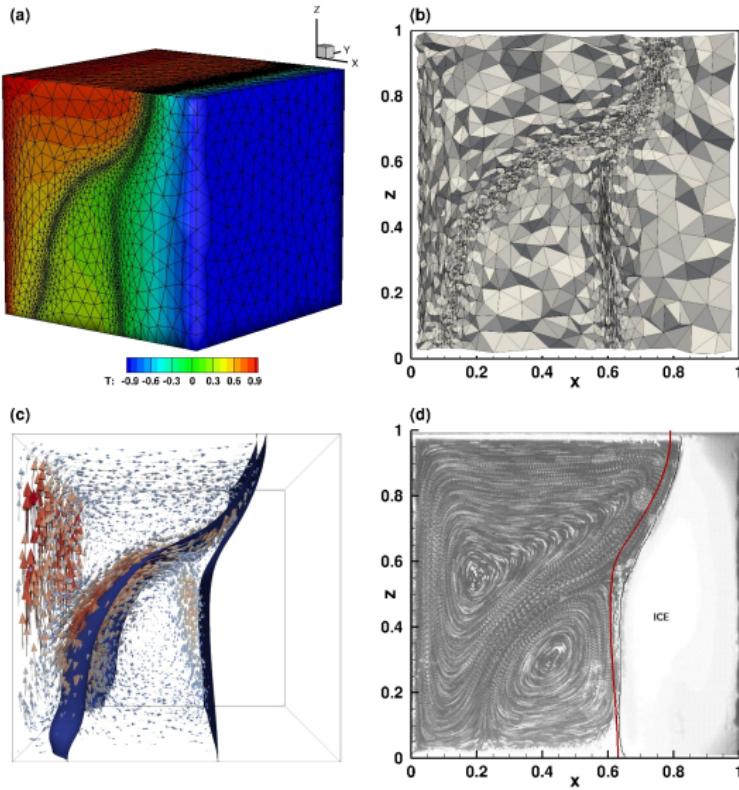
$$\mathcal{P}r = 56.2$$

$$\mathcal{S}te = 0.045$$

Fusion d'un MCP dans une cavité cubique



Formation d'un glaçon dans une cavité cubique



Conclusion

- Modélisation du changement de phase par une méthode d'enthalpy.
- Prise en compte de la convection naturelle par les équations de Navier-Stokes-Boussinesq.
- Pénalisation de la vitesse par le modèle de Carman-Kozeny.
- Utilisation d'un schéma implicit d'ordre 2.
- Adaptation du maillage à chaque pas de temps en 2D et 3D.
- Validation du code : convection naturelle de l'air, fusion et solidification d'un MCP, formation d'un glaçon.

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