

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



Plan

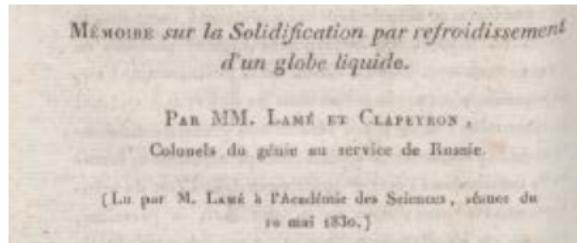
- 1 Problème physique et motivations
- 2 Modèle mathématique
- 3 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq
 - Méthode numérique et implémentation
 - Test de convergence
 - Simulation numérique de la convection naturelle de l'air
- 4 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie
 - Influence de l'adaptation de maillage
 - Influence de la constante de Carman-Kozeny
 - Validation du code : Fusion d'un MCP octadecane
- 5 Simulation d'un cycle complet fusion/solidification
- 6 Simulation de la fusion d'un MCP par chauffage vertical
- 7 Simulation de la solidification de l'eau
- 8 Conclusion et perspectives



Plan

- 1 **Problème physique et motivations**
- 2 **Modèle mathématique**
- 3 **Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq**
 - Méthode numérique et implémentation
 - Test de convergence
 - Simulation numérique de la convection naturelle de l'air
- 4 **Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie**
 - Influence de l'adaptation de maillage
 - Influence de la constante de Carman-Kozeny
 - Validation du code : Fusion d'un MCP octadecane
- 5 **Simulation d'un cycle complet fusion/solidification**
- 6 **Simulation de la fusion d'un MCP par chauffage vertical**
- 7 **Simulation de la solidification de l'eau**
- 8 **Conclusion et perspectives**

Historique



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

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

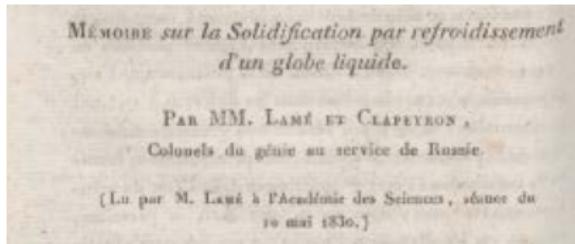
von
J. Stefan,
w. M. k. Akad.

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

Applications

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



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

Applications

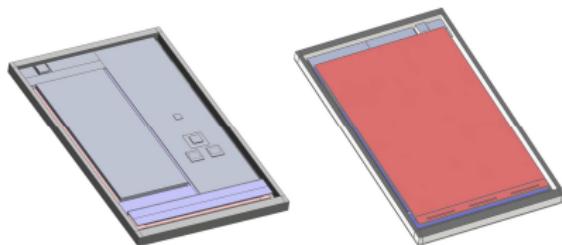
Applications

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



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

Applications



D. Groulx, TFESC (2015)

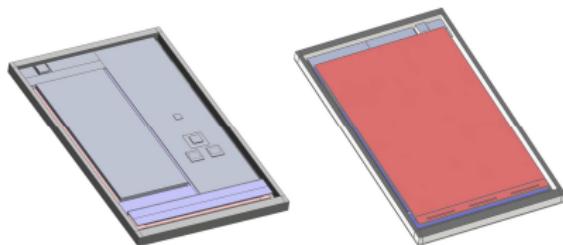
Applications

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



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

Applications



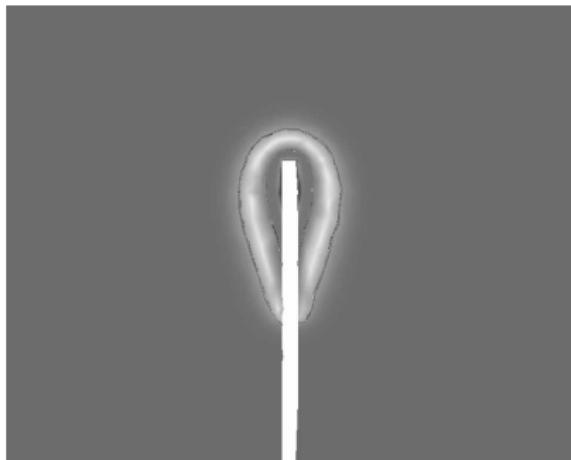
D. Groulx, TFESC (2015)



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

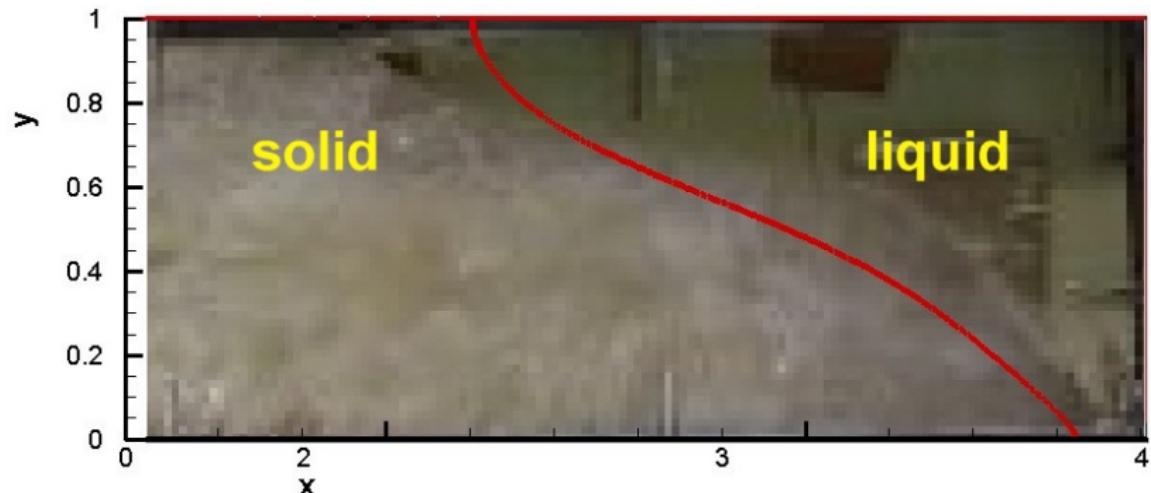
Applications

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



A. Fortin, CMBBE (2008)

Problème physique et motivations



Orange labs, Lannion, France.

*MCP = Matériaux à Changement de Phase

Contexte de la thèse

[Danaila, JCP (2014)]

- Code élément fini 2D avec adaptation de maillage.
- Schéma implicit d'ordre 1.
- Pénalisation par viscosité variable.

Apport pendant la thèse

- Implémentation d'un schéma d'ordre 2.
- Implémentation du modèle de Carman-Kozeny.
- Amélioration de la procédure d'adaptation de maillage.
- Continuation sur \mathcal{Ra} pour les cas sationnaires.
- Amélioration des conditions initiales.
- Réalisation de configurations plus compliquées.
- Passage au 3D.
- Distribution d'une toolbox.

Plan

- 1 Problème physique et motivations
- 2 Modèle mathématique
- 3 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq
 - Méthode numérique et implémentation
 - Test de convergence
 - Simulation numérique de la convection naturelle de l'air
- 4 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie
 - Influence de l'adaptation de maillage
 - Influence de la constante de Carman-Kozeny
 - Validation du code : Fusion d'un MCP octadecane
- 5 Simulation d'un cycle complet fusion/solidification
- 6 Simulation de la fusion d'un MCP par chauffage vertical
- 7 Simulation de la solidification de l'eau
- 8 Conclusion et perspectives

Navier-Stokes-Boussinesq

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

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

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

Navier-Stokes-Boussinesq

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

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

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

Re : nombre de Reynolds, *Pr* : nombre de Prandtl,

Ra : nombre de Rayleigh



Modèle de Boussinesq

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

Convection naturelle de l'air :

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



Modèle de Boussinesq

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

Convection naturelle de l'eau :

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

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

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

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



Changement de phase solide / liquide

- Dans le liquide :

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

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

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

Changement de phase solide / liquide

- Dans le liquide :

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

- Dans le solide :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{K}{Pr Re} \nabla^2 \theta = 0.$$

Changement de phase solide / liquide

- Dans le liquide :

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

- Dans le solide :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{K}{Pr Re} \nabla^2 \theta = 0.$$

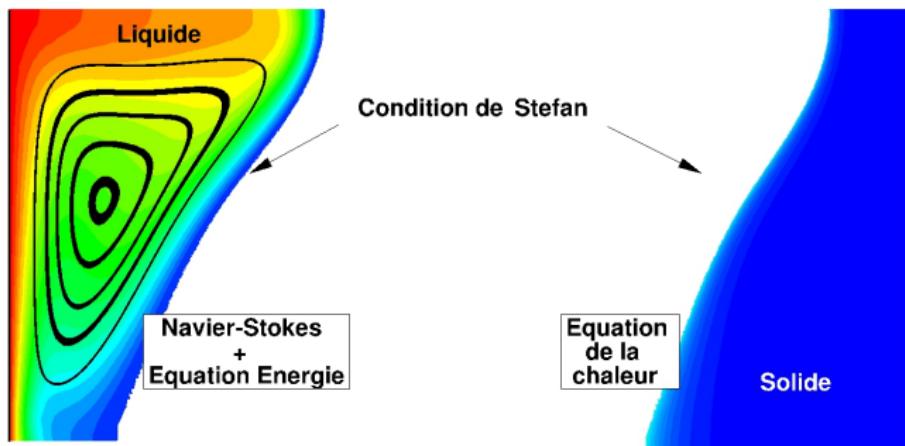
- À l'interface solide / liquide Γ_i

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



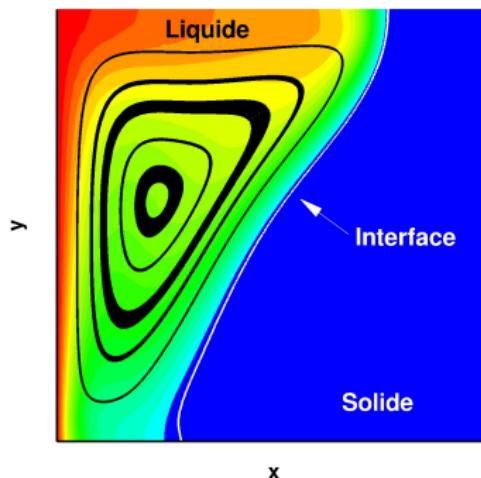
Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie

Méthode de suivi d'interface.



Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie

Méthode mono-domaine.



Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie

Approche mono-domaine :

Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie

Approche mono-domaine :

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

Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie

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

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

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

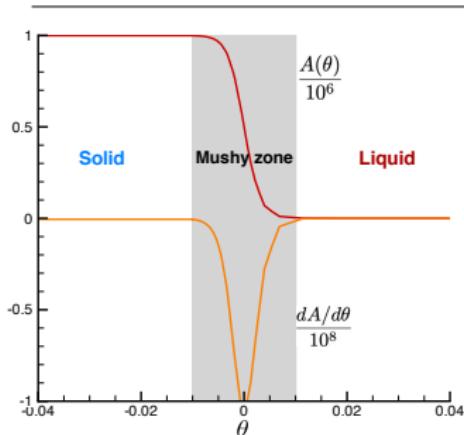
$$L_f(\theta) = 1 + \frac{1}{2} \left\{ 1 + \tanh \left(\frac{\theta_f - \theta}{R_f} \right) \right\},$$

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 Problème physique et motivations
- 2 Modèle mathématique
- 3 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq
 - Méthode numérique et implémentation
 - Test de convergence
 - Simulation numérique de la convection naturelle de l'air
- 4 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie
 - Influence de l'adaptation de maillage
 - Influence de la constante de Carman-Kozeny
 - Validation du code : Fusion d'un MCP octadecane
- 5 Simulation d'un cycle complet fusion/solidification
- 6 Simulation de la fusion d'un MCP par chauffage vertical
- 7 Simulation de la solidification de l'eau
- 8 Conclusion et perspectives



Méthode numérique

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

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

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

Méthode numérique

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

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

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

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

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

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 régularisation.

γ	0	0.1	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}
$\nabla \cdot \mathbf{u}$	-	$6.09618 \cdot 10^{-3}$	$4.7471 \cdot 10^{-3}$	$4.7471 \cdot 10^{-3}$	



Méthode numérique

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

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

Résolution avec Newton

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

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

+ CL : Dirichlet homogène pour la vitesse.



Implémentation

- 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.



www.freefem.org



Implémentation

- 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.



www.freefem.org



Implémentation

- 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.



www.freefem.org



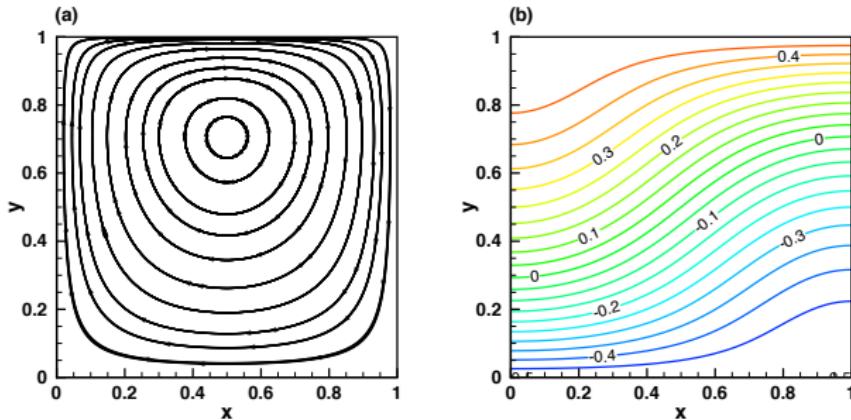
www.mmgtools.org



Test de convergence

- Convergence en espace : Burggraf.

Burggraf : cavité entraînée régularisée



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

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

$$\begin{aligned} p(x, y) &= \frac{\sigma}{Re} \left(h^{(3)}(y)g(x) + g''(x)h'(y) \right) \\ &\quad + \frac{\sigma^2}{2} g'(x)^2 \left(h(y)h''(y) - h'(y)^2 \right), \end{aligned}$$

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

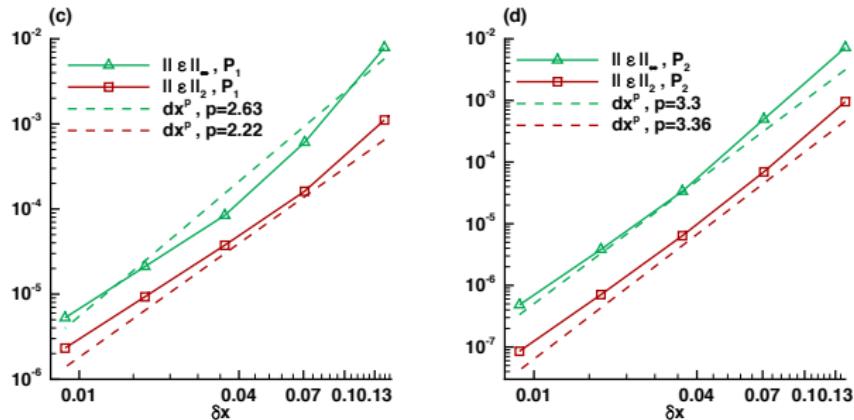
$$g(x) = \frac{x^5}{5} - \frac{x^4}{2} + \frac{x^3}{3},$$

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

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

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

Burggraf : cavité entraînée régularisée



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

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

$$\begin{aligned} p(x, y) &= \frac{\sigma}{Re} \left(h^{(3)}(y)g(x) + g''(x)h'(y) \right) \\ &\quad + \frac{\sigma^2}{2} g'(x)^2 \left(h(y)h''(y) - h'(y)^2 \right), \end{aligned}$$

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

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

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

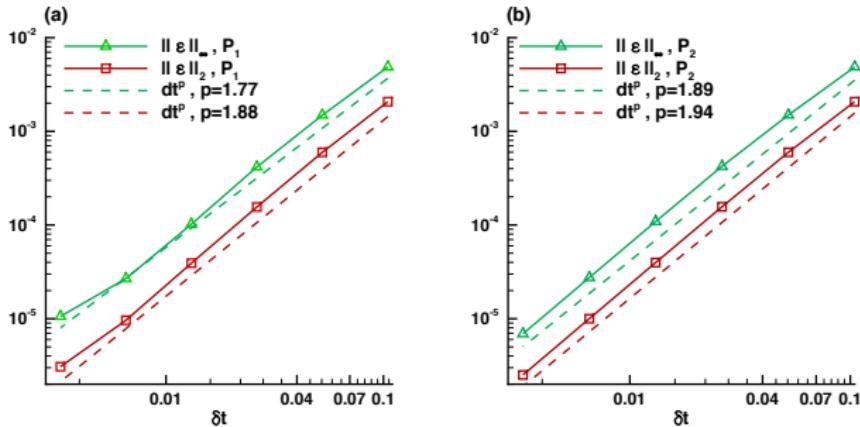
$$a(x) = \cos(\pi x),$$

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

Test de convergence

- Convergence en espace : Burggraf.
- Convergence en temps : Solution manufacturée.

Solution manufacturée, [Nourgaliev, JCP] (2016)



$$u_1(x, y, t) = (\delta U_0 + \alpha_u \sin(t)) \cos(x + \gamma_1 t) \sin(y + \gamma_2 t),$$

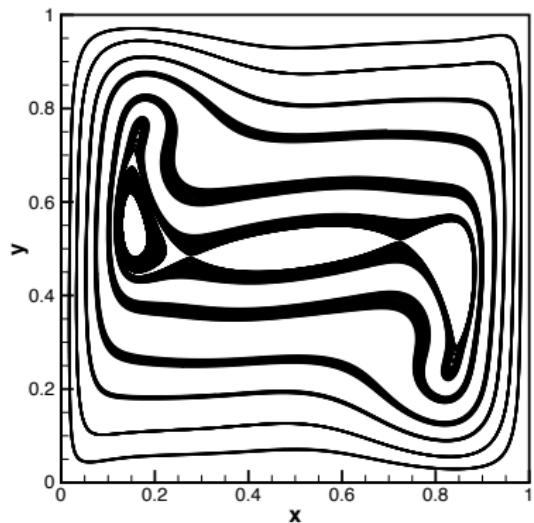
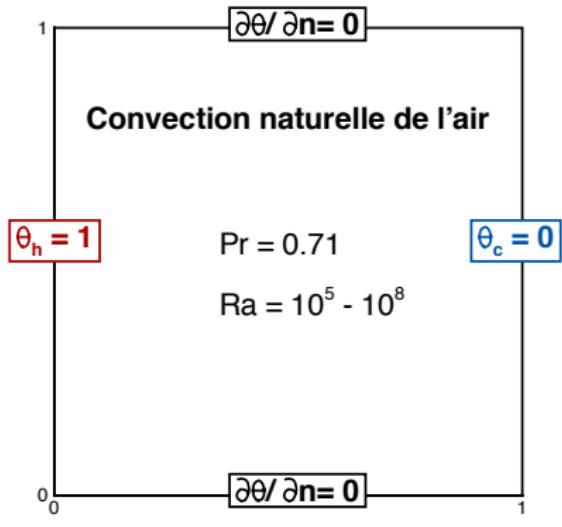
$$u_2(x, y, t) = -(\delta U_0 + \alpha_u \sin(t)) \sin(x + \gamma_1 t) \cos(y + \gamma_2 t),$$

$$T(x, y, t) = \bar{T} + (\delta T_0 + \alpha_t \sin(t)) \cos(x + \gamma_1 t) \sin(y + \gamma_2 t),$$

$$p(x, y, t) = \bar{P} + (\delta P_0 + \alpha_p \sin(t)) \sin(x + \gamma_1 t) \cos(y + \gamma_2 t),$$

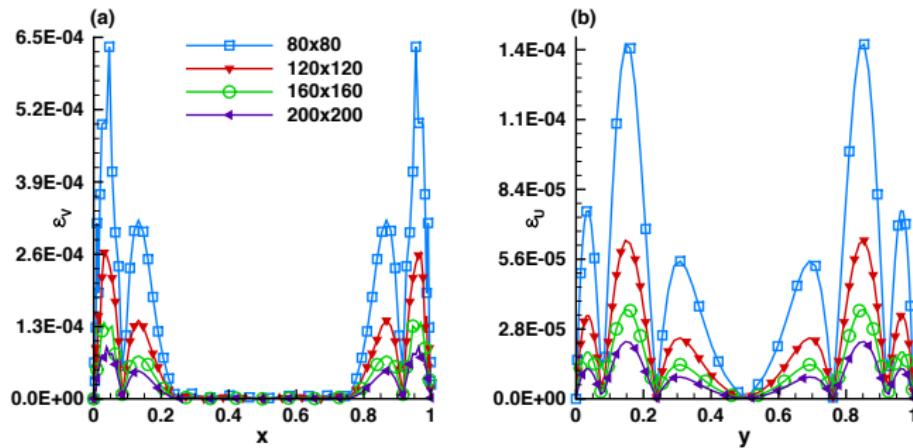
γ_1	γ_2	\bar{P}	\bar{T}	δP_0	δT_0	δU_0	α_p	α_u	α_t
0.1	0.1	0	1.0	0.1	1.0	1.0	0.05	0.4	0.1

Convection naturelle de l'air en 2D



Validation du code : comparaison avec un code spectral

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



$$\varepsilon = \|U_{LQ} - U\|_2$$

Validation du code : comparaison avec un code spectral

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

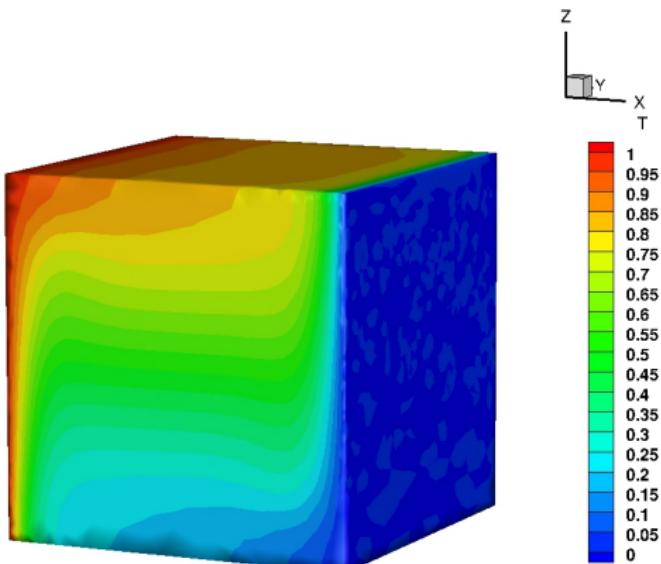
	u_{max} y	v_{max} x	$\mathcal{N}u_0$	$\mathcal{N}u_{1/2}$	$\mathcal{N}u_{max}$ y	$\mathcal{N}u_{min}$ y
$Ra = 10^6$	6.48369	22.0306	8.82521	8.82513	17.5344	0.979543
	0.850394	0.0393701			0.0393701	1
[Le Quere]	6.48344	22.0559	8.8252	8.8252	17.5360	0.97946
	0.850	0.038			0.039	1
$Ra = 10^7$	4.69349	2.19517	16.5237	16.5194	39.3455	1.36675
	0.88189	0.023622			0.015748	1
[LeQuere91]	4.69862	2.21118	16.523	16.523	39.3947	1.36635
	0.879	0.021			0.018	1
$Ra = 10^8$	3.20182	2.09841	30.2353	30.1604	87.3469	1.92085
	0.929134	0.015748			0.00787402	1
[Le Quere]	3.21875	2.22239	30.225	30.225	87.2355	1.91907
	0.928	0.012			0.008	1

$$\mathcal{N}u_0 = - \int_0^1 \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{x=0} dy$$



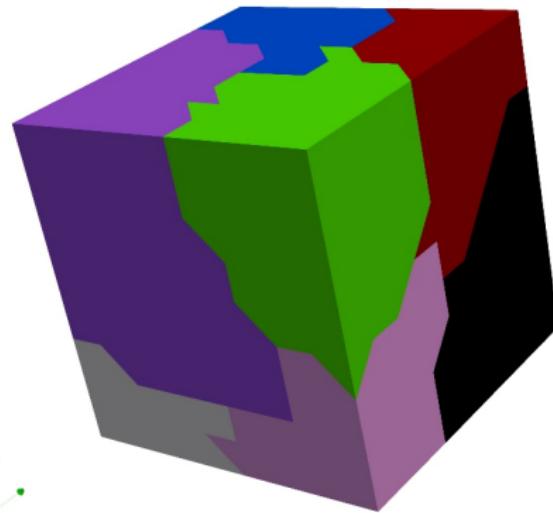
Passage au 3D

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



Passage au 3D

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



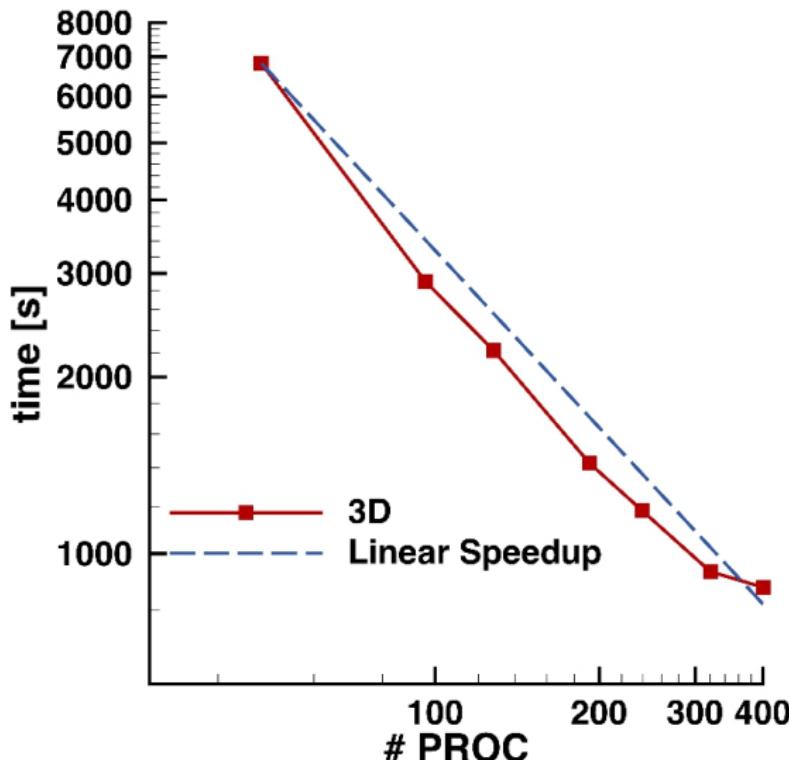
Décomposition en 8 domaines avec METIS

Comparaison séquentiel et parallèle

Ra	<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

- 7.2 millions d'inconnues.



Validation du code 3D

	$u_{max} (z_{max})$	$w_{max} (x_{max})$
$Ra = 10^4$	0.198094 (0.826772)	0.220973 (0.11811)
[Wakashima-2004]	0.1984 (0.8250)	0.2216 (0.1177)
[Raluca2013]	0.1859 (0.8230)	0.2234 (0.1172)
$Ra = 10^5$	0.140367 (0.850394)	0.245454 (0.0629921)
[Wakashima-2004]	0.1416 (0.8500)	0.2464 (0.0677)
[Raluca2013]	0.1461 (0.8540)	0.2459 (0.0703)
$Ra = 10^6$	0.0809247 (0.858268)	0.257719 (0.0393701)
[Wakashima-2004]	0.08111 (0.8603)	0.2583 (0.0323)
[Raluca2013]	0.0830 (0.8550)	0.2553 (0.03905)

Plan

- 1 Problème physique et motivations
- 2 Modèle mathématique
- 3 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq
 - Méthode numérique et implémentation
 - Test de convergence
 - Simulation numérique de la convection naturelle de l'air
- 4 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie
 - Influence de l'adaptation de maillage
 - Influence de la constante de Carman-Kozeny
 - Validation du code : Fusion d'un MCP octadecane
- 5 Simulation d'un cycle complet fusion/solidification
- 6 Simulation de la fusion d'un MCP par chauffage vertical
- 7 Simulation de la solidification de l'eau
- 8 Conclusion et perspectives

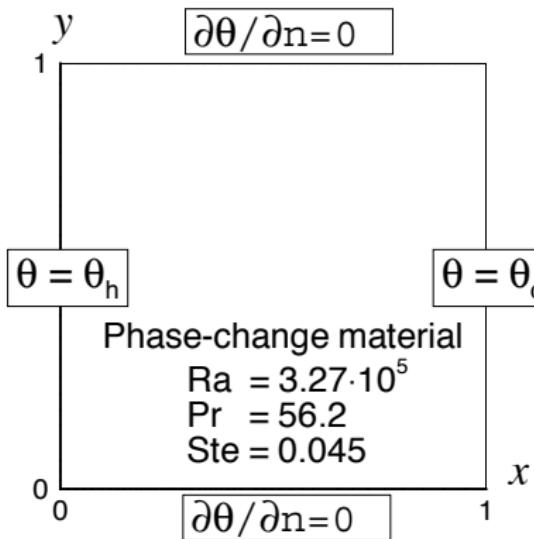
N-S-B + Enthalpie

- Prise en compte du phénomène de changement de phase.
- Rajout de terme non-linéaire supplémentaire.
- Adaptation de maillage à chaque pas de temps.

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

N-S-B + Enthalpie

- Prise en compte du phénomène de changement de phase.
- Rajout de terme non-linéaire supplémentaire.
- Adaptation de maillage à chaque pas de temps.



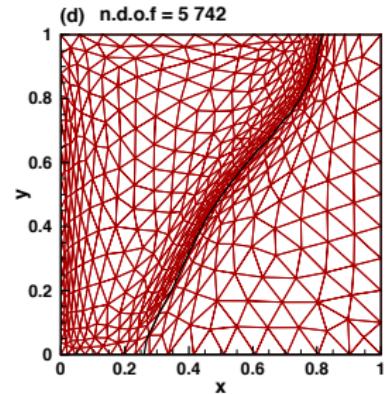
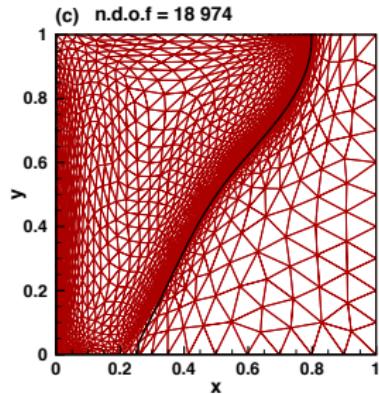
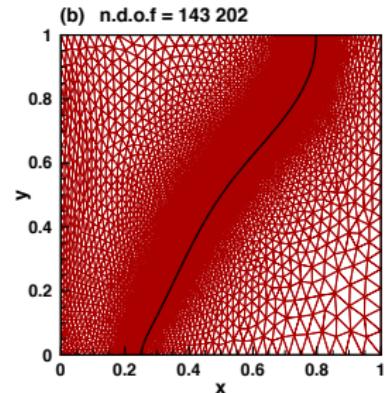
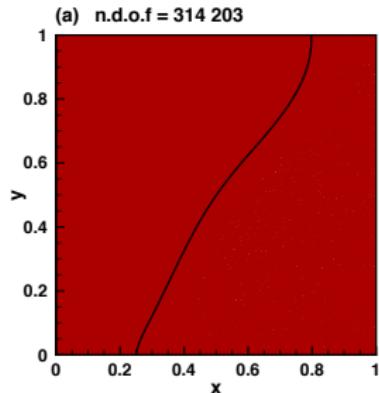
Influence du maillage adapté

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

$Ratio = 1.2$

$Ratio = 1.5$

$Ratio = 1.8$



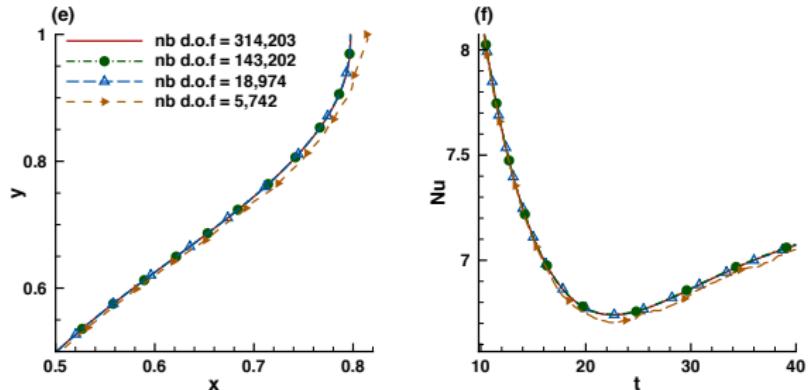
Influence du maillage adapté

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

$$Ratio = 1.2$$

$$Ratio = 1.5$$

$$Ratio = 1.8$$



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

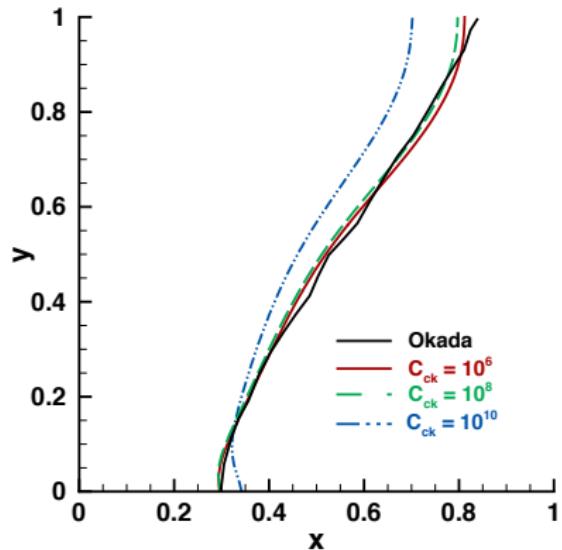
Influence du modèle de Carman-Kozeny

- Prise en compte du phénomène de changement de phase.
- Rajout de terme non-linéaire supplémentaire.
- Adaptation de maillage à chaque pas de temps.
- Pénalisation avec le modèle de Carman-Kozeny.

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

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

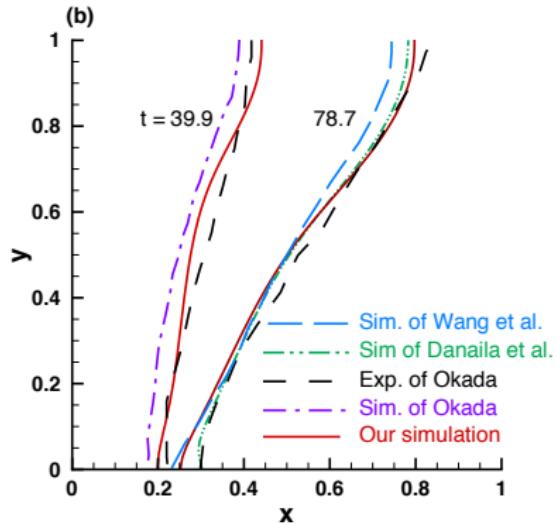
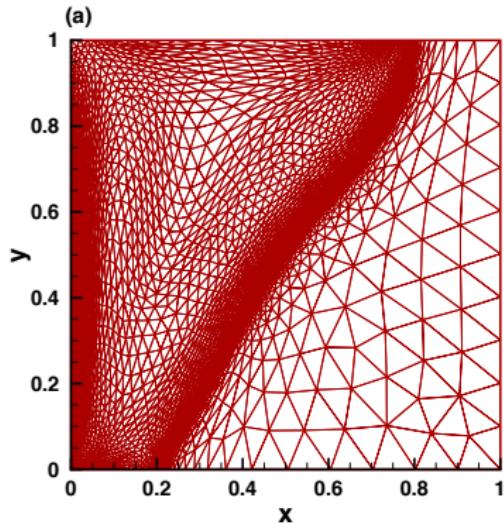
Influence du modèle de Carman-Kozeny



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

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

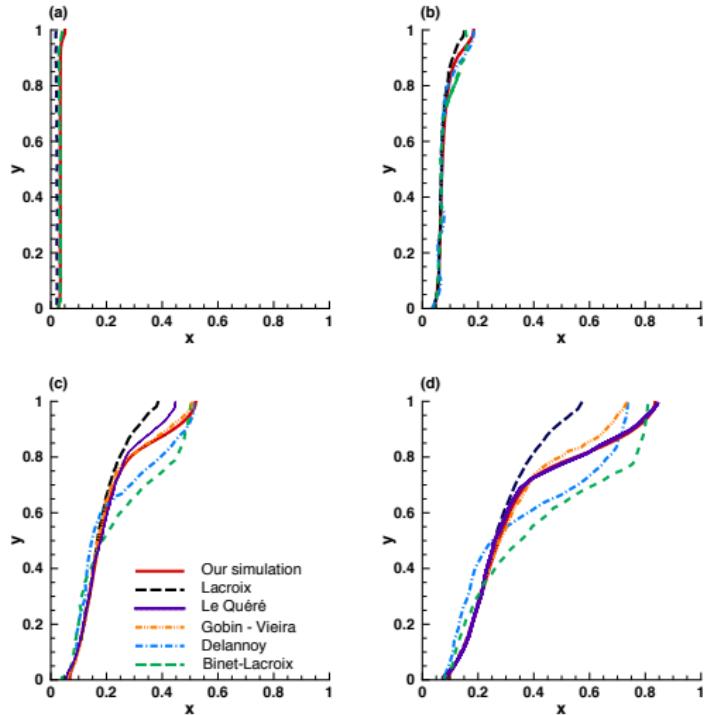
Position de l'interface solide-liquide



- Mesh : $h_{min} = 10^{-3}$, $h_{max} = 10^{-1}$, Ratio = 1.5.
- $C_{CK} = 10^6$.

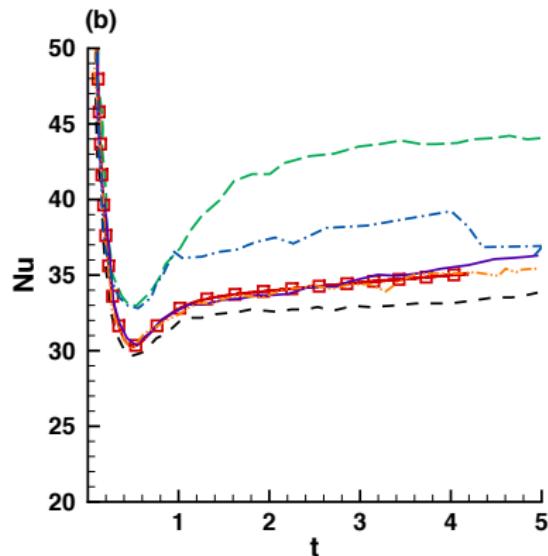
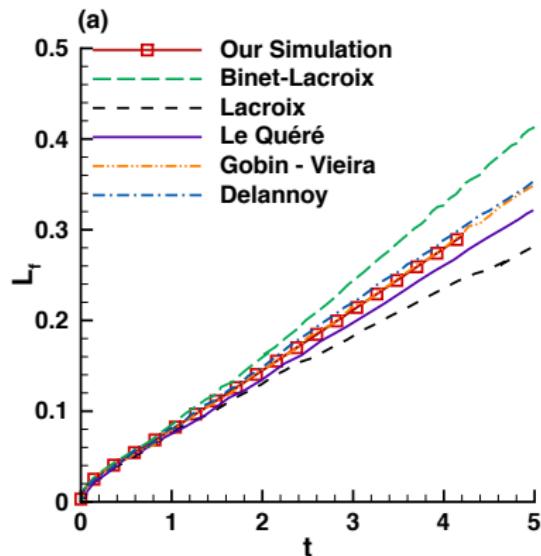
Comparaison avec les résultats expérimentaux de [Okada, IJHFF (1984)].

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



Comparaison avec [Bertrand, IJTS (1999)].

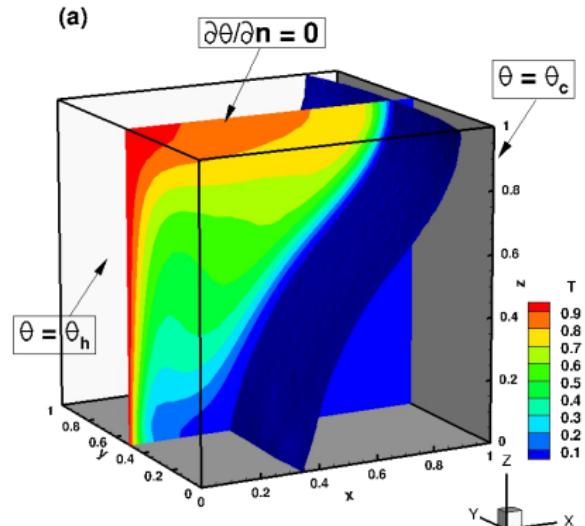
Fusion d'un MCP : $\mathcal{R}a = 10^8$



Comparaison avec [Bertrand, IJTS (1999)].

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

Passage au 3D

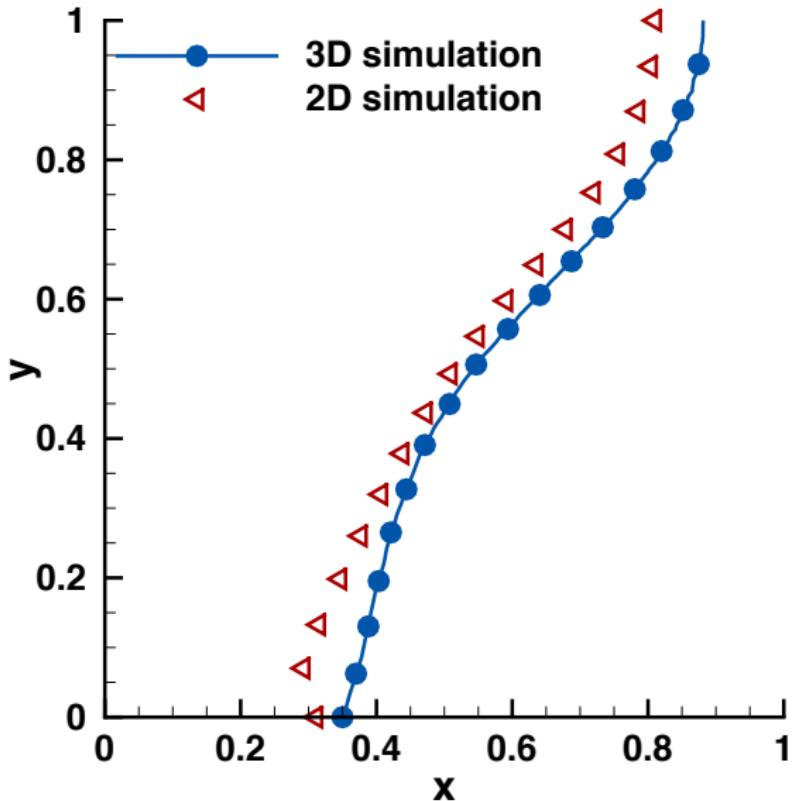


$$\mathcal{R}a = 3.27 \times 10^5$$

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

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

Comparaison 2D et 3D

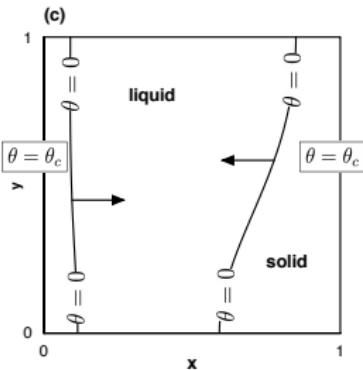
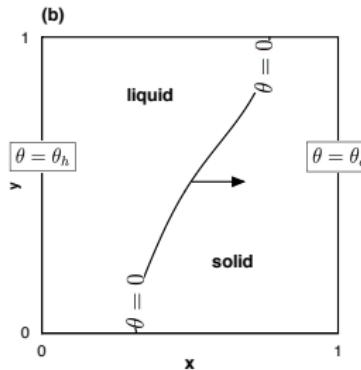
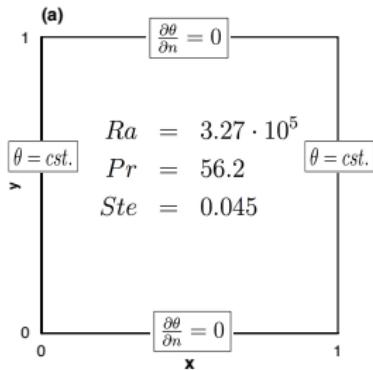


Plan

- 1 Problème physique et motivations
- 2 Modèle mathématique
- 3 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq
 - Méthode numérique et implémentation
 - Test de convergence
 - Simulation numérique de la convection naturelle de l'air
- 4 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie
 - Influence de l'adaptation de maillage
 - Influence de la constante de Carman-Kozeny
 - Validation du code : Fusion d'un MCP octadecane
- 5 **Simulation d'un cycle complet fusion/solidification**
- 6 Simulation de la fusion d'un MCP par chauffage vertical
- 7 Simulation de la solidification de l'eau
- 8 Conclusion et perspectives

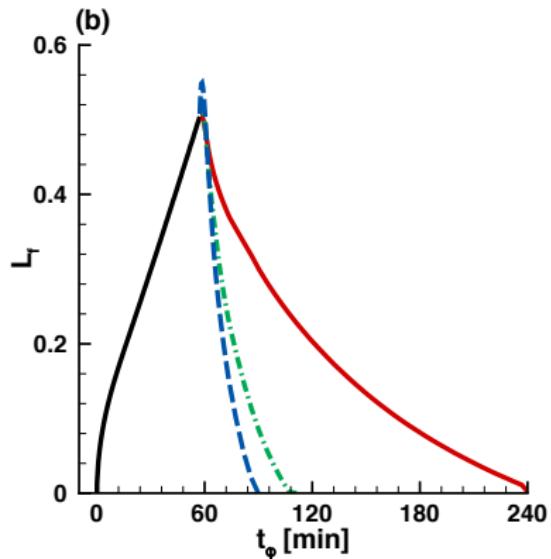
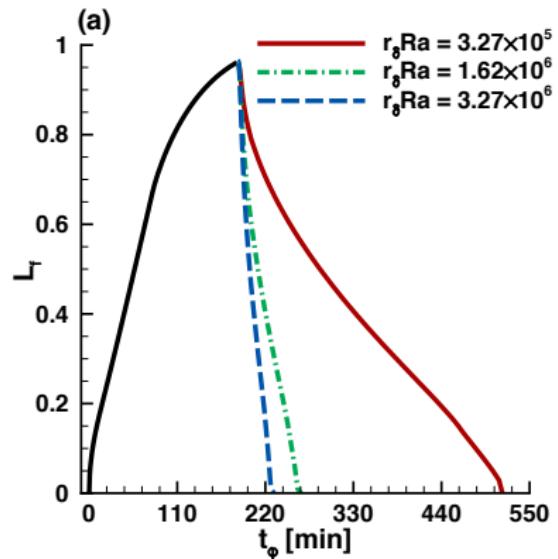


Cycle complet fusion / solidification



Cycle complet fusion / solidification

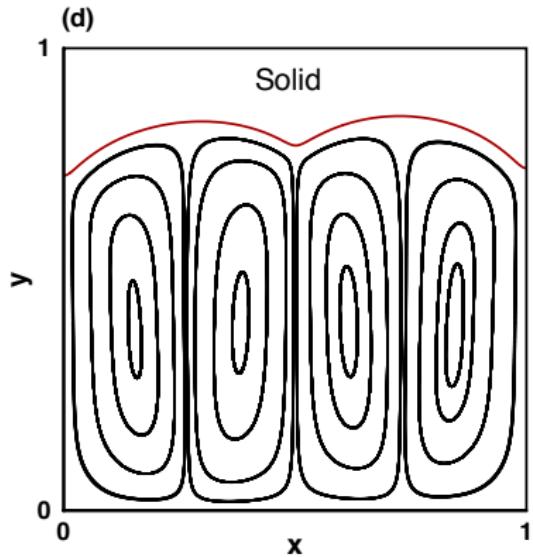
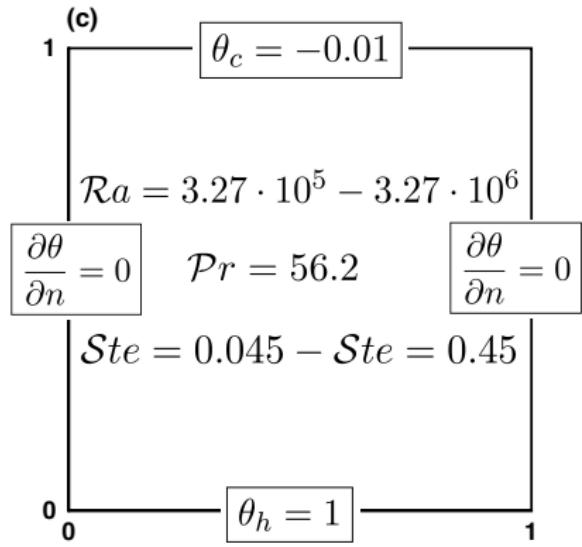
Cycle complet fusion / solidification



Plan

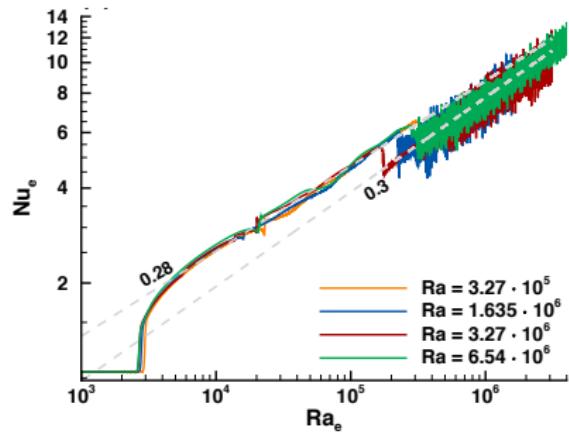
- 1 Problème physique et motivations
- 2 Modèle mathématique
- 3 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq
 - Méthode numérique et implémentation
 - Test de convergence
 - Simulation numérique de la convection naturelle de l'air
- 4 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie
 - Influence de l'adaptation de maillage
 - Influence de la constante de Carman-Kozeny
 - Validation du code : Fusion d'un MCP octadecane
- 5 Simulation d'un cycle complet fusion/solidification
- 6 Simulation de la fusion d'un MCP par chauffage vertical
- 7 Simulation de la solidification de l'eau
- 8 Conclusion et perspectives

Chauffage vertical d'un MCP



Chaudage vertical d'un MCP

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

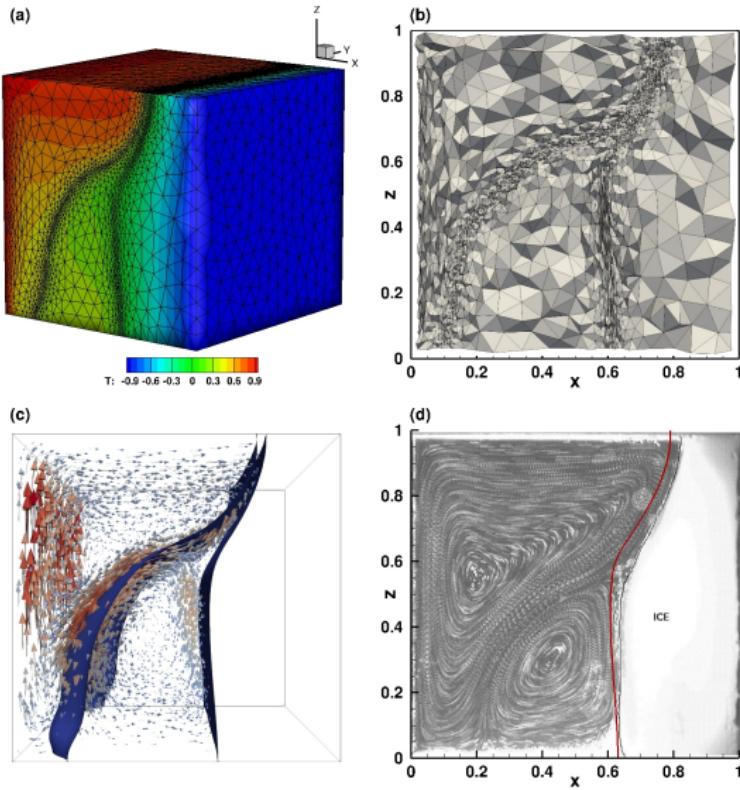


Plan

- 1 Problème physique et motivations
- 2 Modèle mathématique
- 3 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq
 - Méthode numérique et implémentation
 - Test de convergence
 - Simulation numérique de la convection naturelle de l'air
- 4 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie
 - Influence de l'adaptation de maillage
 - Influence de la constante de Carman-Kozeny
 - Validation du code : Fusion d'un MCP octadecane
- 5 Simulation d'un cycle complet fusion/solidification
- 6 Simulation de la fusion d'un MCP par chauffage vertical
- 7 Simulation de la solidification de l'eau
- 8 Conclusion et perspectives



Formation d'un glaçon dans une cavité cubique

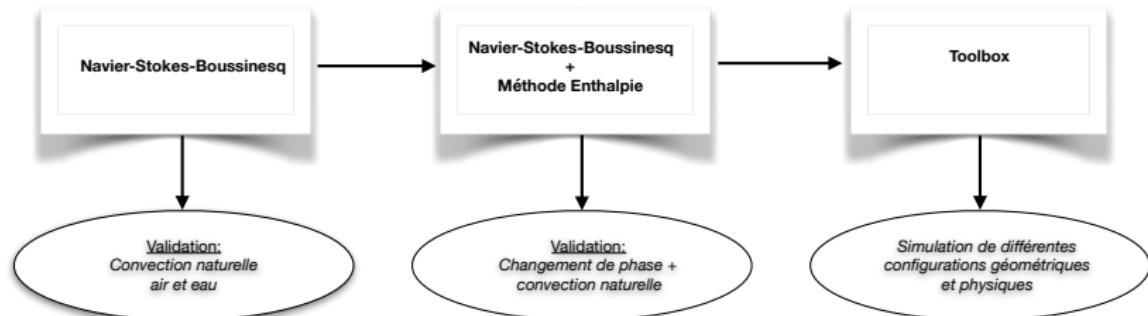


Plan

- 1 Problème physique et motivations
- 2 Modèle mathématique
- 3 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq
 - Méthode numérique et implémentation
 - Test de convergence
 - Simulation numérique de la convection naturelle de l'air
- 4 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes-Boussinesq + Enthalpie
 - Influence de l'adaptation de maillage
 - Influence de la constante de Carman-Kozeny
 - Validation du code : Fusion d'un MCP octadecane
- 5 Simulation d'un cycle complet fusion/solidification
- 6 Simulation de la fusion d'un MCP par chauffage vertical
- 7 Simulation de la solidification de l'eau
- 8 Conclusion et perspectives



Conclusion



- Validation du solveur N-S-B
- Implémentation d'un schéma implicit d'ordre 2.
- Validation du solveur N-S-B + Enthalpy.
- Pénalisation de la vitesse par le modèle de Carman-Kozeny.
- 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.

