Enseirb-Matmeca

— Travail d'Etude et de Recherche —

Adaptation de maillage pour la simulation de la pyrolyse d'un matériau de protection thermique

Clotilde Anastasy Arthur Arnoult Alix Kien Camille Pelletier Jérémy Pourcelot

Encadré par Céline BARRANGER et Héloïse BEAUGENDRE



Table des matières

Introduction		
1	Lois et propriétés physiques1.1 Lois de modélisation du phénomène	4 4 4 5
2	Résolution de l'équation de la chaleur 2.1 Modélisation numérique 2.2 Mise en œuvre d'une méthode numérique : les volumes finis 2.3 Prise en compte des conditions limites 2.4 Résolution du schéma numérique	6 6 6 9 9
3	Adaptation de maillage3.1 Première intuition	11 11 11
4	Résolution pour un maillage mobile 4.1 Schéma sur la masse volumique 4.2 Schéma sur la température 4.2.1 Modèle mathématique 4.2.2 Prise en comte des conditions limites 4.3 Mise sous forme matricielle	14 14 14 15 16
5	Résultats 5.1 Premiers résultats 5.2 Résultats avancés 5.2.1 Maillage mobile 5.2.2 Difficultés rencontrées	17 17 18 18 18
C	onclusion	19
R	eférences	20
Та	ble des figures	20

Introduction

La pyrolyse est un phénomène de décomposition d'un corps suite à une forte augmentation de la température et en l'absence d'oxygène dans le milieu. C'est un procédé commun, utilisé par exemple pour la fabrication du charbon de bois, qui sous l'effet de la chaleur voit sa masse volumique chuter.

À l'inverse, cette dégradation de la matière pourrait être utilisée pour dissiper de la chaleur. Le cas qui nous intéresse est celui des navettes spatiales, lors de leur entrée dans l'atmosphère. Ainsi, des matériaux de protections thermiques sont utilisés afin de protéger le cœur de la structure de très forts flux de chaleur. En effet, les matériaux thermos-dégradables vont se consumer grâce au phénomène de pyrolyse et ainsi dissiper de la chaleur, ce qui est l'objectif ici. Il existe donc des boucliers thermiques placés à l'avant de la structure pour protéger le véhicule de la chaleur. Actuellement, l'utilisation de boucliers thermiques est la meilleure solution pour sortir de l'atmosphère terrestre, grâce au phénomène de pyrolyse. La NASA essaie donc d'améliorer ses boucliers afin de pouvoir visiter les différents astres dotés d'une atmosphère dense et surpasser les problèmes thermiques.

Pour bien dimensionner le bouclier, il est nécessaire d'étudier le comportement du matériau dégradable, suite au phénomène de pyrolyse, grâce à une simulation numérique. L'objectif de notre travail de recherche sera donc de déterminer l'évolution de la masse volumique d'un objet unidimensionnel soumis à un flux thermique variable mais connu. D'un point de vue technique, nous chercherons à implémenter une méthode d'adaptation de maillage pour suivre au mieux les zones les plus importantes.

Dans un premier temps, afin de bien comprendre le phénomène, sans accumuler les difficultés, nous implémenterons une méthode d'adaptation sur un maillage fixe de type volumes finis. Dans un second temps, pour affiner nos résultats, nous implémenterons une méthode d'adaptation sur un maillage mobile ; il y a donc une dépendance en temps des variables d'espace. Enfin, nous utiliserons la méthode ALE – Arbitrary Lagrangian Eulerian – pour adapter notre schéma volumes finis sur le maillage mobile.

1 Lois et propriétés physiques

1.1 Lois de modélisation du phénomène

Physiquement, l'objectif est de déterminer l'évolution de la masse volumique ρ au cours du temps dans un matériau pyrolysable, selon une dimension. Un apport très intense de chaleur d'un côté de la barre étudiée va se diffuser au sein du matériau. C'est l'équation de la chaleur (1) qui régit cette évolution. La difficulté du problème réside en un couplage avec une équation sur la masse volumique : le matériau est peu à peu consumé au cours du temps, et sa masse volumique varie. Nous introduisons donc la loi d'Arrhenius (2) pour modéliser cette évolution. Cette équation traduit en effet une variation de masse volumique lorsque la température du corps change. Mathématiquement, il est évident que l'équation différentielle sur ρ dépend de la température T, et réciproquement, l'équation de la chaleur dépend de la masse volumique. Il faudra donc résoudre un système couplé d'équations ; cette résolution se fera par la méthode des volumes finis :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho C_p (T - T_0) + L_m \rho \right) - div(\lambda \nabla T) = 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} = -A_{ref} e^{-T_A/T} (\rho - \rho_p) \end{cases}$$
 (2)

où T_0 représente la température initiale, T_A la température d'activation, L_m l'entropie de changement d'état et A_{ref} le facteur de fréquence. Enfin, les coefficients thermodynamiques λ – conductivité thermique – et C_p – capacité thermique à pression constante – dépendent eux aussi à la fois de la température et de la masse volumique. Nous introduisons donc deux nouvelles équations pour les définir, en les considérant comme linéaires entre leur deux états, vierge et pyrolysé :

$$\begin{cases} \rho C_p = (1 - \xi)\rho_v C_{pv} + \xi \rho_p C_{pp} & (3) \\ \lambda = (1 - \xi)\lambda_v + \xi \lambda_p & (4) \end{cases}$$

où $C_{pv}, C_{pp}, \lambda_v, \lambda_p, \rho_v, \rho_p$ désignent respectivement les capacités thermiques, les conductivités et les masses volumiques à l'état vierge puis pyrolysé et où ξ désigne la fraction massique, c'est-à-dire tel que :

$$\xi = \frac{\rho_v - \rho(t, x)}{\rho_v - \rho_n} \tag{5}$$

Le système étudié sera une barre unidimensionnelle de longueur L, sur une durée τ .

1.2 Propriétés physiques du matériau

Le problème prend en compte différents paramètres physiques concernant le matériau de protection thermique étudié. Dans la suite, les valeurs suivantes seront considérées pour l'intégralité de notre résolution numérique :

- $\rho_v = 1500 \ kg.m^{-3}$ la masse volumique vierge
- $\rho_p = 1000~kg.m^{-3}$ la masse volumique pyrolysée
- $-A_{ref} = 1000 \ s^{-1}$ le facteur de fréquence
- $T_A = 6000 K$ la température d'activation
- $L_m = 3.10^6 \ J.kg^{-1}$ l'entropie de changement d'état
- $C_{pv} = 1000 \ J.K^{-1}$ la capacité thermique massique à pression constante à l'état vierge
- $C_{pp}=1500~J.K^{-1}$ la capacité thermique massique à pression constante à l'état pyrolysé
- $-\lambda_v = 1 W.m^{-1}.K^{-1}$ la conductivité thermique à l'état vierge
- $\lambda_p = 1 \ W.m^{-1}.K^{-1}$ la conductivité thermique à l'état pyrolysé

1.3 Première approche

Dans un premier temps, nous avons simplifié le problème étudié en imposant la température dans le domaine [0,L]. La température est donnée par la formule suivante :

$$T(x) = T_0 + 100 \times t \times (1 - x) \quad \forall x \in [0, L].$$
 (6)

Cette hypothèse pour le champ de température a permis de simplifier grandement le problème puisque désormais il n'y a plus un système couplé d'équations, mais simplement une équation différentielle, celle d'Arrhenius (2). Désormais, la fonction température est un paramètre connu du problème. Nous avons alors pu procéder à la résolution de l'équation et obtenir les graphes sur la FIGURE (1).

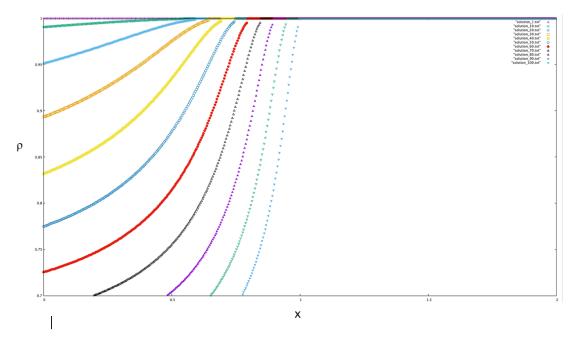


FIGURE 1 – Évolution de la masse volumique pour différents temps en fonction de l'espace.

Cette première approximation nous a permis de visualiser l'allure des courbes attendues. On observe que la masse volumique diminue à gauche du domaine, puis augmente très rapidement pour atteindre un plateau. La zone de très forte accélération est appelée front de pyrolyse. L'importance de mailler plus finement cette zone se fait déjà sentir avec cette approximation. On rencontrera en effet des difficultés à approcher de manière précise cette zone si on n'y place pas un maillage précis : il faudra densifier le nombre de points sur une partie du domaine, afin d'approcher au mieux cette variation. Par ailleurs, on observe que le front de pyrolyse se déplace vers la droite du domaine. Dans le cas de l'utilisation d'un maillage non uniforme, il faudra donc le déplacer d'itération en itération afin de suivre le front.

2 Résolution de l'équation de la chaleur

2.1 Modélisation numérique

Pour résoudre ce problème complexe d'équations imbriquées, nous allons procéder à une étude numérique, et donc discrète. Il faut alors découper le temps étudié $[0,\tau]$ en intervalles $[t_n,t_{n+1}]$ de durée Δt constante. Il faut par ailleurs mailler l'espace. Puisque notre problème est de dimension 1, nous découperons notre segment [0,L] avec N+1 intervalles. Notre maillage sera constitué de N+2 points définis par leur position $x_0,x_1...,x_{N+1}$. Les points numérotés $x_{1/2}$ et $x_{N+1/2}$ seront considérés comme les bords de notre domaine. Ils sont définis respectivement comme les milieux des intervalles $[x_0,x_1]$ et $[x_N,x_{N+1}]$.

Pour la suite, nous introduisons la distance entre deux points $h_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$.

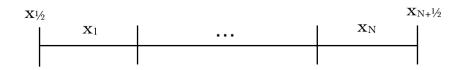


Figure 2 – Schéma du maillage

Nous allons désormais résoudre l'équation sur chaque intervalle de temps. Considérons toutes les grandeurs connues à un instant $n \in [0, \frac{\tau}{\Delta t}]$. Nous chercherons à déterminer ces grandeurs à l'itération n+1.

ETAPE 1

La température est considérée fixe sur cet intervalle suffisamment petit; il faut alors résoudre l'équation d'Arrhenius (2). Pour cela, nous considérons la valeur approchée de la température, calculée à l'itération précédente. On en déduit par différences finies implicites une valeur intermédiaire de ρ au temps t_{n+1} , notée ρ^* .

ETAPE 2

De même qu'à l'étape précédente, on calcule les grandeurs physiques de manière intermédiaire, via l'introduction de ρ^* dans les équations (3) et (4). Les valeurs des constantes thermodynamiques approchées seront donc naturellement notées C_p^* et λ^* .

ETAPE 3

Nous pouvons alors résoudre l'équation de la chaleur via un schéma de volumes finis, avec toutes les grandeurs précédentes considérées comme constantes sur l'intervalle de temps $[t_n, t_{n+1}]$. La valeur de la température à l'instant n+1 est ensuite déduite.

ETAPE 4

Enfin, afin de corriger – en partie – l'erreur faite sur ρ qui avait été calculée avec la température au temps t_n et non t_{n+1} , il faut appliquer à nouveau le schéma sur l'équation d'Arrhenius, mais cette fois-ci en considérant la température fixée à la valeur calculée au temps t_{n+1} . Cela nous permet de retrouver ρ^{n+1} .

Ces opérations sont itérées pour tous les intervalles de temps.

2.2 Mise en œuvre d'une méthode numérique : les volumes finis

Le principe d'une méthode volumes finis est de partir de l'équation étudiée, puis d'intégrer en espace, sur une cellule – en dimension 1, un intervalle –, et sur un pas de temps. Nous allons donc

établir les équations pour les quatre étapes définies précédemment. Le maillage considéré est représenté sur la FIGURE 3.

Remarquons que sur la cellule d'intégration $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$, la masse volumique approchée ρ^* , et les autres grandeurs physiques sont constantes. Cela nous permettra de les sortir des intégrales en espace.

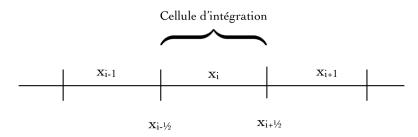


Figure 3 – Schéma de la cellule d'intégration

ETAPE 1

L'équation à résoudre est :

$$\forall t \in [t_n, t_{n+1}], \quad \frac{\partial \rho}{\partial t}(x, t) = -A_{ref} e^{-T_A/T(t_n, x)} (\rho(x, t) - \rho_p)$$
 (7)

Nous appliquons alors la méthode d'EULER IMPLICITE, en considérant la température constante sur le pas de temps. Nous optons pour un schéma implicite de manière à ne pas être contraints pour la stabilité et obtenons donc :

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \Delta t f(\rho_i^{n+1}, T_i^n) \tag{8}$$

οù

$$f(\rho) = A_{ref}e^{-T_A/T(t_n,x)}(\rho(x,t) - \rho_p)$$

Donc

$$\rho^{\star} \left(1 + \Delta t A_{ref} e^{-T_A/T_i^n} \right) = \rho_i^n + \Delta t \rho_p A_{ref} e^{-T_A/T_i^n}$$
(9)

Nous obtenons finalement le schéma suivant :

$$\rho * = \frac{\rho_i^n + \Delta t \rho_p A_{ref} e^{-T_A/T_i^n}}{1 + \Delta t A_{ref} e^{-T_A/T_i^n}}$$

$$\tag{10}$$

ETAPE 2

Nous avons désormais une expression approchée de la masse volumique au temps t_{n+1} ; nous pouvons en déduire l'expression approchée de C_p et λ au même temps, en utilisant les équations (3) et (4). Introduisons d'abord

$$\xi^* = \frac{\rho_v - \rho^*}{\rho_v - \rho_p}.\tag{11}$$

Nous obtenons donc la valeur des constantes cherchées :

$$C_p^* = \frac{(1 - \xi^*)\rho_v C_{pv} + \xi^* \rho_p C_{pp}}{\rho^*}$$
 (12)

$$\lambda^* = (1 - \xi^*)\lambda_v + \xi^*\lambda_p \tag{13}$$

ETAPE 3

Il faut résoudre l'équation de la chaleur simplifiée :

$$\forall t \in [t_n, t_{n+1}], \quad \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho^*(x) C_p^*(x) T + L_m \rho \right) - \lambda^* div(\nabla T) = 0$$
 (14)

Remarquons que l'expression de la dérivée partielle de ρ , par rapport au temps, est déjà connue explicitement car donnée par l'équation d'Arrhenius. Ainsi, nous obtenons, pour un problème en dimension 1 :

$$\forall t \in [t_n, t_{n+1}], \quad \frac{\partial}{\partial t} (\rho^*(x) C_p^*(x) T) - \lambda^*(x) div(\nabla T) = f(\rho^*) L_m$$
 (15)

Procédons alors à la double intégration de l'équation (15):

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\rho^{\star}(x) C_p^{\star}(x) \frac{\partial}{\partial t} T - \lambda^{\star}(x) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) dx dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} L_m f(\rho^{\star}) dx dt$$

Donc,

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \rho^{\star}(x) C_p^{\star}(x) (T(t_{n+1}, x) - T(t_n, x)) dx - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \lambda^{\star}(x) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} dx dt = L_m h_i \Delta t f(\rho^{\star})$$

Or, sur la cellule $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, la masse volumique, la capacité thermique et la conductivité sont constantes. Elles sont ensuite indicées avec i pour montrer leur dépendance à la cellule de calcul, puis sorties des intégrales. Enfin, la température approchée T_i^n est définie par :

$$T_i^n = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} T(t_n, x) dx$$
(16)

En injectant l'expression précédente dans l'équation, nous trouvons :

$$\rho_i^{\star}C_{p_i}^{\star}h_i(T_i^{n+1}-T_i^n)-\lambda_i^{\star}\int_{t_-}^{t_{n+1}}\left(\frac{\partial T}{\partial x}(t,x_{i+\frac{1}{2}})-\frac{\partial T}{\partial x}(t,x_{i-\frac{1}{2}})\right)dt=L_mh_i\Delta tf(\rho_i^{\star})$$

La méthode par volumes finis consiste donc seulement à donner une expression pour les flux dus à l'intégrale en temps de la dérivée en espace. Pour le terme temporel, nous considérons la dérivée partielle de la température, par rapport au temps, constante sur le pas de temps Δt . En cherchant à établir un schéma implicite, nous avons donc :

$$\rho_i^{\star} C_{p_i}^{\star} h_i (T_i^{n+1} - T_i^n) - \lambda_i^{\star} \Delta t \left(\frac{\partial T}{\partial x} (t_{n+1}, x_{i+\frac{1}{2}}) - \frac{\partial T}{\partial x} (t_{n+1}, x_{i-\frac{1}{2}}) \right) = L_m h_i \Delta t f(\rho_i^{\star}) \tag{17}$$

Pour approcher la dérivée en espace, nous utilisons une approximation par différences finies:

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t_{n+1}, x_{i+\frac{1}{2}}) = 2\frac{T_{i+1}^{n+1} - T_{i}^{n+1}}{h_{i} + h_{i+1}} + O(max(h_{i}, h_{i+1}))$$

Cela revient donc à calculer le flux $\Phi^{n+1}_{i+1/2}$ entre les mailles i et i+1. Le schéma (18) est finalement obtenu, et est valable à l'intérieur du maillage, ie $\forall i \in [2, N-1]$:

$$T_{i}^{n+1} = T_{i}^{n} + \frac{2\lambda_{i}^{\star}\Delta t}{\rho_{i}^{\star}C_{p_{i}}^{\star}} \frac{1}{hi} \left(\frac{(h_{i-1} + h_{i})T_{i+1}^{n+1} - (h_{i-1} + 2h_{i} + h_{i+1})T_{i}^{n+1} + (h_{i} + h_{i+1})T_{i-1}^{n+1}}{(h_{i} + h_{i-1})(h_{i} + h_{i+1})} \right) + \frac{L_{m}}{\rho_{i}^{\star}C_{p_{i}}^{\star}} \Delta t f(\rho_{i}^{\star})$$

$$(18)$$

Nous avons établi un système de N-2 équations à N inconnues (T_1, \ldots, T_N) . Pour le rendre complet, il reste à déterminer les équations issues des conditions aux bords.

ETAPE 4

On peut désormais recalculer la masse volumique. Le même schéma que celui de l'ÉTAPE 1 est utilisé, mais désormais appliqué avec la température approchée au temps t_{n+1} . Nous obtenons donc :

$$\rho_i^{n+1} = \frac{\rho_i^n + \rho_p A_{ref} e^{-T_A/T_i^{n+1}}}{1 + A_{ref} e^{-T_A/T_i^{n+1}}}$$
(19)

2.3 Prise en compte des conditions limites

Jusqu'à présent nous avons considéré une discrétisation sur un domaine quelconque. Notre domaine d'étude réel étant borné, il faut prendre en compte les conditions aux limites imposées par notre système. Le domaine est constitué de n points, numérotés de 1 à n. Les points x_0 et x_{n+1} sont des points fictifs qui n'interviennent que mathématiquement dans les schémas. Il faudra donc définir une valeur pour la température en ces points.

Nous pouvons alors reprendre l'expression de l'équation exacte (17), faisant intervenir deux dérivées partielles.

LIMITE À GAUCHE

A gauche – ie pour i = 1 –, l'approximation aux différences finies fait intervenir la température T_0 qui n'existe pas : on ne peut donc pas l'utiliser.

Nous considérerons que la source de chaleur impose, à gauche du système, un flux d'énergie $\Phi(t)$ dont l'expression est donnée analytiquement par la formule suivante :

$$\begin{cases}
\Phi(t) = 10000t \text{ pour } t \in [0, 50] \\
\Phi(t) = 500000 - 9000(t - 50) \text{ pour } t \in [50, 100]
\end{cases}$$
(20)

La loi de Fourier $\Phi = -\lambda \partial_x T$ nous permet alors de donner une expression de la dérivée en espace. Nous obtenons ainsi :

$$T_1^{n+1} = T_1^n + \frac{2\lambda_1^{\star} \Delta t}{\rho_1^{\star} C_{p_1}^{\star}} \frac{1}{h_1} \left(2 \frac{T_2^{n+1} - T_1^{n+1}}{h_1 + h_2} + \frac{\Phi}{\lambda^{\star}} \right) + \frac{L_m}{\rho_1^{\star} C_{p_1}^{\star}} \Delta t f(\rho_1^{\star})$$
 (21)

Limite à droite

De même que précédemment, c'est le flux sortant qui permet de déterminer cette condition limite. Nous imposons à droite une dissipation d'énergie nulle, c'est-à-dire que le flux d'énergie sortant est nul. On considère en effet que le bord gauche est adiabatique. La loi de FOURIER nous permet donc d'exprimer la dérivée spatiale : $\partial_x T = 0$. Cette expression permettra de déterminer les conditions de bord à droite :

$$T_N^{n+1} = T_N^n + \frac{2\lambda_N^* \Delta t}{\rho_N^* C_{p_N}^*} \frac{1}{h_N} \left(-2 \frac{T_N^{n+1} - T_{N-1}^{n+1}}{h_{N-1} + h_N} \right) + \frac{L_m}{\rho_N^* C_{p_N}^*} \Delta t f(\rho_N^*)$$
 (22)

2.4 Résolution du schéma numérique

Puisque nous avons établi un schéma implicite, la résolution n'est pas immédiate : il faut résoudre un système linéaire. Celui-ci est donné, d'une part avec les équations du schéma, d'autre part avec les équations issues des conditions limites.

On réécrit alors ce problème sous forme matricielle.

$$(I+A)\widetilde{T}^{n+1} = \widetilde{T}^n + \widetilde{f}$$
(23)

avec les vecteurs \widetilde{T}^n et \widetilde{f} définis par

$$\widetilde{T}^{n} = \begin{pmatrix} T_{1}^{n} \\ \vdots \\ T_{N}^{n} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \widetilde{f} = \begin{pmatrix} \gamma_{1} + \frac{\Delta t \Phi}{\rho_{1} C_{p_{1}} h_{1}} \\ \gamma_{2} \\ \vdots \\ \gamma_{N} \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \gamma_{i} = \frac{L_{m} \Delta t}{\rho_{i}^{\star} C_{p_{i}}^{\star}} f(\rho_{i}^{\star}) \quad \forall i = \{1, N\}$$

et la matrice A définie par

$$A = \begin{pmatrix} \frac{2\lambda_1^*\Delta t}{\rho_1^*C_{p_1}^*h_1\beta_1} & \frac{-2\lambda_1^*\Delta t}{\rho_1^*C_{p_1}^*h_1\beta_1} \\ -\alpha_2\beta_2 & \alpha_2(\beta_1+\beta_2) & -\alpha_2\beta_1 \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & \\ & & & \\$$

où
$$\alpha_i = \frac{2\lambda_i^* \Delta t}{\rho_i^* C_{p_i}^* h_i \beta_{i-1} \beta_i}$$
 et $\beta_i = h_i + h_{i+1}, \forall i \in [1, N]$

Le second membre étant entièrement connu après l'itération n, le problème est bien posé.

Au final, nous avons bien un système de N équations à N inconnues. La matrice obtenue est clairement à diagonale dominante : on a en effet $\forall i \in [1, N], |(A+I)_{ii}| > \sum_{i \neq j} |(A+I)_{ij}|$, le terme d'une diagonale de la matrice A étant égal à la somme des termes extradiagonaux. Le lemme d'HADAMARD nous permet donc de conclure que la matrice (A+I) est inversible. Le problème est alors bien posé et admet une unique solution.

Pour la résolution de ce système linéaire, une méthode LU est utilisée pour factoriser la matrice A, puis les deux systèmes triangulaires sont résolus pour retrouver \widetilde{T}^{n+1} .

3 Adaptation de maillage

Afin d'augmenter la précision sans augmenter le nombre de mailles, nous procédons à une adaptation du maillage aux points les plus intéressants. Nous allons raffiner le maillage au niveau du front de pyrolyse – accélération la plus élevée – afin d'approcher précisément cette zone cruciale. Deux méthodes de raffinement de maillage ont été explorées. Dans un premier temps, nous avons imaginé une méthode intuitive et dans un second temps nous en avons étudié une autre : la méthode des ressorts.

3.1 Première intuition

L'idée est de faire avancer notre maillage à la même vitesse que le front de pyrolyse. De cette manière, la zone fortement maillée se trouve théoriquement au front de pyrolyse, et à chaque fois que celui-ci avance, le maillage dense devrait se déplacer d'une même longueur.

En pratique, nous souhaitions calculer la distance séparant deux points du front de pyrolyse à l'instant n et n+1, pour ensuite faire avancer tous nos points du maillage de cette même distance. Pour appliquer cette méthode, nous avons choisi un point au milieu du front de pyrolyse, présenté sur la FIGURE ()4), et nous avons calculé la distance, à chaque itération de la manière suivante :

$$d = x^{n+1} - x^n \tag{24}$$

où x^n est l'abscisse telle que $y(x^n) = \frac{\max((x_i)_{i \in N}) + \min((x_i)_{i \in N})}{2}$ avec x_i les points du maillage à l'itération n.

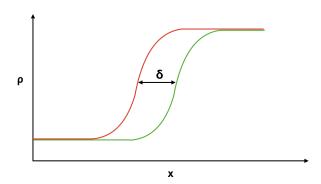


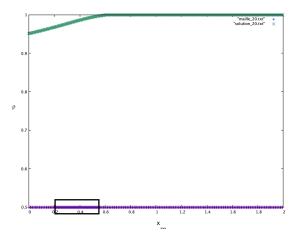
Figure 4 – Représentation de la distance entre les fronts de pyrolyse.

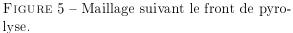
Enfin, nous avons ajouté cette distance à la position des points du maillage à l'instant n, afin d'obtenir le maillage à l'instant n+1. Les premiers résultats que nous avons obtenus étaient plutôt cohérents. Le maillage, représenté en violet sur la FIGURE (5), se situait au même endroit que le front de pyrolyse, représenté en vert. Toutefois, nous avons remarqué que plus le temps s'écoulait, plus le maillage avançait lui aussi mais beaucoup trop rapidement, comme on peut le voir sur la FIGURE (6).

Nous avons donc essayé d'adapter la formule pour que le maillage ralentisse et suive bien le front de pyrolyse et nous y sommes arrivés. Malheureusement, cela n'avait plus rien de physique et ce n'était pas pertinent pour la suite de notre étude, c'est pourquoi nous nous sommes tournés vers une autre méthode.

3.2 Méthode des ressorts

La méthode des ressorts consiste à reconstruire le maillage en assimilant chaque couple de noeuds connexes du maillage à un ressort de raideur k(i) (voir la FIGURE (8)). L'idée est ensuite d'établir la position d'équilibre de l'ensemble des ressorts. Cet équilibre traduit en fait la volonté d'équirépartition des erreurs au sein du maillage.





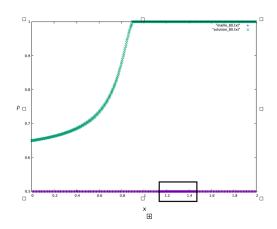


FIGURE 6 – Maillage ne suivant plus le front de pyrolyse.

Pour cela, il faut introduire une $m\acute{e}trique\ m_i$ basée sur la dérivée seconde en chacun des points x_i du maillage :

$$m_i = \sqrt{max(|u_i''|, \min)}$$
 (25)

avec min une valeur déterminant la précision de l'adaption et u_i'' la valeur approchée (ou exacte) de la dérivée seconde de u au point x_i . Nous avons choisit de poser min = 0.5 dans notre programme. Pour approcher la dérivée seconde, nous avons utilisé les développements de TAYLOR:

$$\begin{cases} u(x_{i+1}) = u(x_i) + (x_{i+1} - x_i)u'(x_i) + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2}u_i'', \\ u(x_{i-1}) = u(x_i) + (x_{i-1} - x_i)u'(x_i) + \frac{(x_{i-1} - x_i)^2}{2}u_i'', \\ u'(x_i) = \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}}. \end{cases}$$

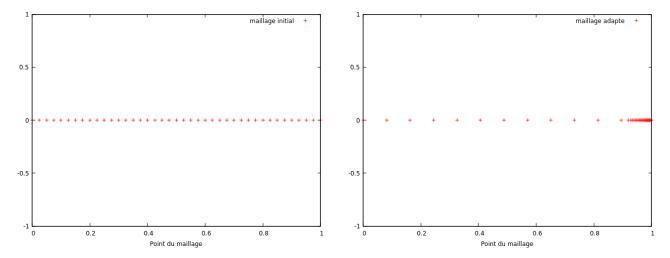


FIGURE 7 – Représentation d'un maillage 1D avant et après application de la méthode des ressorts.

Nous obtenons finalement l'expression de la dérivée seconde approchée au point x_i :

$$u_i'' = \frac{2}{x_{i+1} - x_{i-1}} \left(\frac{u_{i+1} - u_i + u_i'(x_{i+1} - x_i)}{x_{i+1} - x_i} - \frac{u_{i-1} - u_i + u_i'(x_{i-1} - x_i)}{x_{i-1} - x_i} \right). \tag{26}$$

Après avoir déterminé la valeur de la métrique en chacun des noeuds, il faut déterminer la valeur de chacun des ressorts k_i . Il s'agit en fait de la valeur moyenne de la métrique dans un élément ressort :

$$k_i = \frac{m_{i-1} + m_i}{2} \tag{27}$$

Ensuite, les noeuds du maillage x_i sont solutions du système suivant à N inconnues (les points x_0 et x_{N+1} sont les bords du domaine) :

$$k_i(x_i - x_{i-1}) = k_{i+1}(x_{i+1} - x_i) \quad \forall i = 1, ..., N.$$
 (28)

Ce système se met sous la forme matricielle d'un problème MX = B.

Le vecteur B correspond à l'erreur de la méthode, on parle de $p\'{e}nalisation$. Ainsi, toutes ses composantes sont nulles sauf la dernière, qui vaut p=1e12. La matrice M est appelée matrice des raideurs du système. Là aussi, il faut ajouter une pénalisation pour prendre en compte l'erreur de la méthode. Ainsi, nous imposerons M(1,1)=M(n,n)=p.

Le système MX=B peut se résoudre avec une méthode LU adaptée par rapport au caractère creux de la matrice.

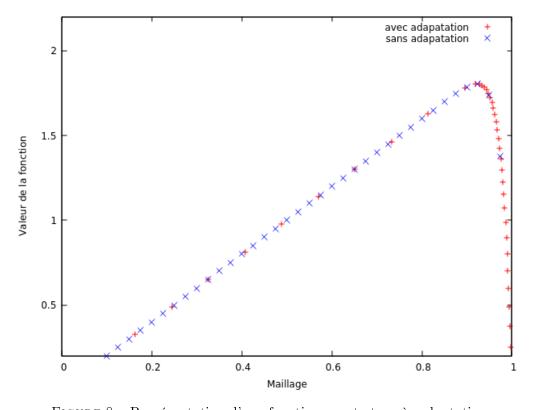


Figure 8 – Représentation d'une fonction avant et après adaptation.

4 Résolution pour un maillage mobile

Pour que le maillage s'ajuste au niveau de la courbe, nous effectuons une adaptation de maillage. La première étape d'une itération consiste à calculer le nouveau maillage avec la méthode vue précédemment. Ainsi, lorsque l'on commence l'itération n+1, où $(x_i^n)_N$, $(T_i^n)_N$ et $(\rho_i^n)_N$ sont connus, on va pouvoir déterminer le nouveau maillage. On obtient donc $(x_i^{n+1})_N$, qui sera nécessaire à la résolution du problème. Cependant, cette fois-ci, la position des points du maillage dépend du temps. Nous l'avons donc indicé avec n et nous avons défini la longueur entre deux points $h_i^n = x_{i+1/2}^n - x_{i-1/2}^n$ où les points $x_{i\pm 1/2}^n$ sont toujours les milieux de deux points consécutifs, tels que : $x_{i+1/2}^n = \frac{x_i^n + x_{i+1}^n}{2}$.

4.1 Schéma sur la masse volumique

Le même schéma que pour un maillage fixe est conservé, puisque les coordonnées des points x_i^n n'interviennent pas directement dans le schéma. De la même manière, la même méthode est conservée pour définir les termes étoilés.

4.2 Schéma sur la température

4.2.1 Modèle mathématique

On se place donc à l'itération n+1, où on souhaite résoudre la même équation que précédemment :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\rho^*(x) C_p^*(x) \frac{\partial}{\partial t} T - \lambda^*(x) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) dx dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} L_m f(\rho^*) dx dt$$
 (29)

Cette fois-ci, il n'est plus possible d'intervertir les intégrales en temps et en espace, puisque les variables d'espace dépendent du temps. On utilise donc la formule de REYNOLDS suivante, suivie d'une formule de STOKES :

$$\int_{t_{n}}^{t^{n+1}} \left(\int_{x_{i-1/2}(t)}^{x_{i+1/2}(t)} \frac{\partial T}{\partial t}(t, x) dx \right) dt
= \int_{t_{n}}^{t_{n+1}} \frac{d}{dt} \left(\int_{x_{i-1/2}(t)}^{x_{i+1/2}(t)} T(t, x) dx \right) dt - \int_{t_{n}}^{t_{n+1}} \left(\left[\widehat{\nu} T \right]_{x_{i-1/2}(t)}^{x_{i+1/2}(t)} \right) dt
\simeq \left(\int_{x_{i-1/2}(t)}^{x_{i+1/2}(t)} T(t_{n+1}, x) dx - \int_{x_{i-1/2}(t)}^{x_{i+1/2}(t)} T(t_{n}, x) dx \right)
- \int_{t_{n}}^{t_{n+1}} \left(\widehat{\nu}(x_{i+1/2}) T(t, x_{i+1/2}) - \widehat{\nu}(x_{i-1/2}) T(t, x_{i-1/2}) \right) dt
\simeq h_{i}^{n+1} T_{i}^{n+1} - h_{i}^{n} T_{i}^{n} - \Delta t \left(\widehat{\nu}_{i+1/2} T_{i+1/2}^{n+1} - \widehat{\nu}_{i-1/2} T_{i-1/2}^{n+1} \right)$$
(30)

Cette formule fait intervenir le terme $\hat{\nu}$ qui représente la vitesse de déplacement du maillage. On cherche à l'estimer via l'écart de distance entre un même point, entre deux itérations en temps :

$$\widehat{\nu}_{i+1/2} = \frac{x_{i+1/2}^{n+1} - x_{i+1/2}^n}{\Delta t} \tag{31}$$

Pour le reste de l'équation, le choix du flux reste le même que pour le maillage fixe, tout comme l'approximation du second membre. On aboutit finalement au schéma (32) :

$$\left(h_{i}^{n+1}T_{i}^{n+1} - h_{i}^{n}T_{i}^{n} - (x_{i+1/2}^{n+1} - x_{i+1/2}^{n})T_{i+1/2}^{n} + (x_{i-1/2}^{n+1} - x_{i-1/2}^{n})T_{i-1/2}^{n}\right) \\
= \frac{2\lambda_{i}^{\star}\Delta t}{\rho_{i}^{\star}C_{p_{i}}^{\star}} \left(\frac{(h_{i-1}^{n+1} + h_{i}^{n+1})T_{i+1}^{n+1} - (h_{i-1}^{n+1} + 2h_{i}^{n+1} + h_{i+1}^{n+1})T_{i}^{n+1} + (h_{i}^{n+1} + h_{i+1}^{n+1})T_{i-1}^{n+1}}{(h_{i}^{n+1} + h_{i-1}^{n+1})(h_{i}^{n+1} + h_{i+1}^{n+1})}\right) + \Delta t \frac{L_{m}h_{i}^{n+1}}{\rho_{i}^{\star}C_{p_{i}}^{\star}}f(\rho_{i}^{\star}) \tag{32}$$

Nous remarquons aussi l'apparition du terme de température $T^n_{i+1/2}$ qui n'est pas défini. Pour le fixer, nous utilisons une méthode classique, qui consiste à suivre le sens d'advection. Selon le signe de $\widehat{\nu}$, qui représente l'advection de notre schéma, la valeur de $T^n_{i+1/2}$ sera décentrée à gauche ou à droite et défini comme suit :

$$\begin{cases} T_{i+1/2}^n = T_i^n & \text{si } \widehat{\nu}_{i+1/2} \geqslant 0 \\ T_{i+1/2}^n = T_{i+1}^n & \text{si } \widehat{\nu}_{i+1/2} < 0 \end{cases}$$

4.2.2 Prise en comte des conditions limites

Le système est toujours soumis à un flux entrant connu, à gauche, et un flux nul, à droite. Pour prendre en compte ces conditions aux limites, nous avons réécrit le schéma en i=1 et i=N. Pour simplifier les notations, nous avons introduit le terme G_i^{n+1} défini par

$$G_i^{n+1} = \frac{2\lambda_i^\star}{\rho_i^\star C_{p_i}^\star} \left(\frac{(h_{i-1}^{n+1} + h_i^{n+1})T_{i+1}^{n+1} - (h_{i-1}^{n+1} + 2h_i^{n+1} + h_{i+1}^{n+1})T_i^{n+1} + (h_i^{n+1} + h_{i+1}^{n+1})T_{i-1}^{n+1}}{(h_i^{n+1} + h_{i-1}^{n+1})(h_i^{n+1} + h_{i+1}^{n+1})} \right) + \frac{L_m}{\rho_i^\star C_{p_i}^\star} f(\rho_i^\star)$$

Les équations de la température aux limites du domaine réel sont donc :

$$\begin{cases}
T_1^{n+1} = \frac{\Delta t}{h_1^{n+1}} \left(G_1^{n+1} + \frac{h_1^n}{\Delta t} T_1^n + \widehat{\nu}_{3/2} T_{3/2}^n - \widehat{\nu}_{1/2} T_{1/2}^n \right) \\
T_N^{n+1} = \frac{\Delta t}{h_N^{n+1}} \left(G_N^{n+1} + \frac{h_N^n}{\Delta t} T_N^n + \widehat{\nu}_{N+1/2} T_{N+1/2}^n - \widehat{\nu}_{N-1/2} T_{N-1/2}^n \right)
\end{cases} (33)$$

Nous pouvons constater l'apparition des termes $T^n_{1/2}$ et $T^n_{N+1/2}$ dans les équations précédentes. Ces termes s'expriment en fonction du signe de la vitesse comme expliqué précédemment. Le terme $T^n_{1/2}$ vaut soit T^n_1 , soit T^n_0 . Le terme $T^n_{N+1/2}$ vaut soit T^n_N , soit T^n_{N+1} . Cependant, les termes T^n_0 et T^n_{N+1} ne sont pas définis. En revanche, ils peuvent être estimés en utilisant les expressions approchées des flux en ces points. En utilisant des formules aux différences finies et la loi de FOURIER, nous avons :

$$\begin{cases} \frac{\partial T_{1/2}^n}{\partial x} = -\frac{\Phi_{1/2}}{\lambda_{1/2}} \simeq 2\frac{T_1^n - T_0^n}{h_0^n + h_1^n} \\ \frac{\partial T_{N+1/2}^n}{\partial x} = 0 \simeq 2\frac{T_{N+1}^n - T_N^n}{h_N^n + h_{N+1}^n} \end{cases}$$

Nous obtenons finalement les termes recherchés :

$$\begin{cases}
T_0^n = T_1^n + \frac{h_0^n + h_1^n}{2\lambda_{1/2}} \Phi_{1/2} \\
T_{N+1}^n = T_N^n
\end{cases}$$
(34)

Pour la suite, nous noterons $\Phi = \Phi_{1/2}$ le flux imposé au bord gauche.

Le schéma étant maintenant entièrement défini, nous pouvons à nouveau le mettre sous la forme matricielle AX = B. Seulement, cette fois, chaque valeur du vecteur B sera conditionnée par le calcul de la vitesse du maillage. De plus, nous remarquons que pour une méthode de volumes finis, avoir un maillage qui se déplace ne fait qu'ajouter un terme au schéma obtenu pour un maillage fixe. Par ailleurs, nous pouvons retrouver le schéma (18), pour $\hat{\nu}_{i+1/2} = 0$, qui correspond au cas d'un maillage fixe

4.3 Mise sous forme matricielle

Le système est semblable à celui obtenu précédemment : la matrice A reste la même, mais le second membre est changé. Il faut rajouter l'expression due à l'advection du schéma. Pour en obtenir une écriture condensée, on fait intervenir les notations de partie positive et partie négative telle que :

$$\begin{cases} \Psi^+ = max(\Psi, 0) \\ \Psi^- = min(\Psi, 0) \end{cases}$$

On a alors, sous cette convention : $\hat{\nu}_{i+1/2}T_{i+1/2}^n = \hat{\nu}_{i+1/2}^+T_i^n + \hat{\nu}_{i+1/2}^-T_{i+1}^n$

Enfin, on définit le vecteur des inconnus tel que :

$$\widetilde{T}^n = {}^t (T_1^n, \dots, T_N^n)$$

On aboutit finalement au système linéaire :

$$(I+A)\widetilde{T}^{n+1} = \widetilde{f} \tag{36}$$

5 Résultats

5.1 Premiers résultats

Tout d'abord, l'équation différentielle du premier ordre donnée par la loi d'Arrhenius a due être résolue afin de déterminer la masse volumique ρ en fonction du temps et de l'espace. Ainsi, pour différents temps τ fixés, l'évolution de la masse volumique a été tracée en fonction de l'espace. Remarquons que lorsque le temps est très court le matériau n'a pas le temps de chauffer, ainsi la masse volumique varie très peu. Cependant, pour des temps très longs, le matériau chauffe et la chaleur se propage dans celui-ci. Ainsi la masse volumique décroît dans les zones chauffées et reste constante dans les zones où la chaleur ne s'est pas propagée. Le phénomène de pyrolyse consume le matériau de protection. Comme son nom l'indique, ce dernier sert justement à protéger le coeur de la structure de la dégradation causée par les frottements thermiques. Ainsi, il ne faut pas que le matériau soit chauffé trop longtemps sous peine d'atteindre le coeur qui doit rester intact.

Nous avons tracé le résultat issu de la résolution numérique pour un maillage équidistant qui ne varie pas au cours du temps. Ce résultat est représenté sur la FIGURE (9). Nous obtenons bien la forme attendue, où le front de pyrolyse est clairement visible. L'intérêt d'avoir un maillage fin au niveau du front de pyrolyse est alors bien compréhensible.

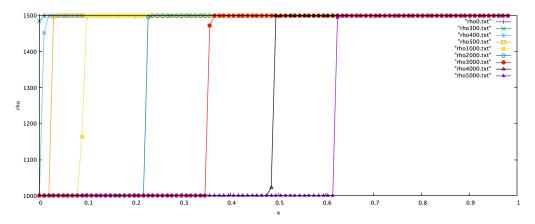


FIGURE 9 – Résolution du schéma équidistant constant.

Ensuite, nous avons vérifié que notre schéma fonctionnait aussi avec un maillage non équidistant, mais fixe au cours du temps. Le résultat a été tracé sur la FIGURE (10).

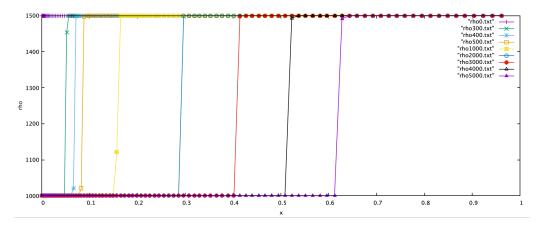


FIGURE 10 - Résolution du schéma avec un maillage non équidistant.

5.2 Résultats avancés

5.2.1 Maillage mobile

Une fois le nouveau système linéaire implémenté, nous avons pu procéder à la résolution. Dans un premier temps, et afin de ne pas accumuler les sources d'erreurs, nous avons testé notre programme avec un maillage fixe. Cela n'a pas posé de problème particulier. En effet, puisque dans ce cas les termes $\hat{\nu}$ sont nuls et $h_i^n = h_i^{n+1}$, le schéma obtenu est le même que précédemment. Dans un second temps, nous avons testé le schéma avec un maillage mobile, mais sans utiliser la fonction d'adaptation, potentielle source d'erreur supplémentaire. Nous avons alors fait qu'à chaque itération, le maillage se dilate. Mathématiquement, nous avons posé $x_i^{n+1} = 0.99 \times x_i^n$. De cette manière, nous avons pu confirmer le fonctionnement de notre schéma puisque nous avons obtenu des résultats conformes à ce que nous souhaitions : le maillage se déplace – artificiellement –, mais la résolution a fonctionné. Nous représentons le résultat obtenu sur la FIGURE (11).

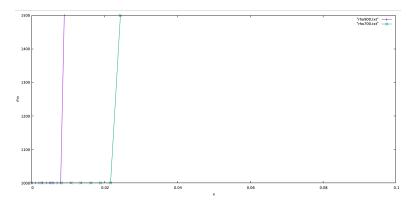


FIGURE 11 – Exemple de maillage mobile non adapté.

A ce stade, nous avons validé le fonctionnement de notre schéma pour un maillage mobile, puisque nous avons retrouvé les graphes (9) et (10). Il ne reste donc plus qu'à insérer la fonction d'adaptation pour forcer le déplacement du maillage aux points cruciaux.

5.2.2 Difficultés rencontrées

Avec l'introduction de l'adaptation de maillage dans notre code et donc d'un maillage mobile, de nombreux problèmes sont arrivés. En effet, au bout de quelques itérations seulement, les valeurs de la masse volumique ρ et de la température T explosent pour devenir des NaN. Comme tout est interconnecté dans notre méthode de résolution, il est très difficile de localiser précisément le problème. Puisque nous avions validé le schéma, nous supposons que les erreurs proviennent de l'adaptation du maillage. Cette fonction avait été testée elle aussi de manière indépendante dans la partie sur l'adaptation de maillage. Elle semblait fonctionner. Néanmoins, dans notre cas la pente est telle que la dérivée seconde devient démesurée dès l'apparition du front.

Bien que nous n'ayons pas réussi à expliquer le dysfonctionnement, nous avons essayé de corriger ce problème de différentes manières :

- Notre première intuition fut l'étude de la dérivée seconde. Celle utilisée pour l'adaptation du maillage, dans le code, nous a paru par moment énorme. Peut-être est-elle tellement grande que tous les points sont attirés au même endroit et donc se superposent. Cela poserait alors nécessairement des problèmes pour la suite. Nous avons donc tenté de la borner pour adapter de manière moins forte le maillage, mais sans succès.
- Une autre méthode tentée pour gérer les points extrêmement proches, voire égaux, a été de rajouter une boucle permettant de décaler légèrement les points trop collés, sans succès à nouveau.

Après maints et maints essais, nous n'avons pas réussi à corriger ce problème, nous empêchant d'obtenir le résultat tant attendu de la bonne courbe avec le bon maillage bien adapté.

Conclusion

L'objectif de notre travail de recherche était d'implémenter une méthode d'adaptation de maillage pour suivre le front de pyrolyse dans un objet 1D soumis à un flux thermique. Pour le réaliser, nous avons séparé notre travail en deux grandes parties : d'abord étudier l'adaptation d'un maillage fixe afin de se familiariser avec les différentes méthodes connues, pour un maillage uniforme ou non, puis étudier celle d'un maillage mobile, dans le but de modéliser au mieux notre problème.

Dans un premier temps, la résolution simplifiée de l'équation d'Arrhenius nous a permis d'observer l'allure du front de pyrolyse et de comprendre l'intérêt d'adapter le maillage sur cette zone particulière. Ensuite, l'étude sur un maillage fixe nous a fait comprendre les différentes notions proposées par notre sujet. Nous avons pu prendre en main la méthode des ressorts, ainsi que la méthode des volumes finis qui nous a permis d'obtenir notre schéma. À partir de cela, nous avons obtenu des résultats cohérents où le front de pyrolyse était clairement visible, avec un maillage adapté, qu'il soit équidistant ou non.

Dans un second temps, nous avons voulu rendre le maillage mobile en utilisant la méthode des ressorts pour qu'il suive et s'adapte bien au front de pyrolyse en fonction du temps. Le système à résoudre a donc évolué car des termes supplémentaires dus à la vitesse du maillage sont apparus. Malheureusement, nous n'avons pas réussit à aboutir à des résultats notamment à cause de problèmes dans l'adaptation de maillage. L'objectif final serait de réussir à faire fonctionner la méthode d'adaptation pour pouvoir conclure le travail que nous avions commencé.

Enfin, de manière générale, ce travail d'étude et de recherche a été très intéressant dans le sens où il représentait un sujet concret, bien différent de ce que nous pouvons voir en cours. Il nous a permis d'appliquer de nouvelles méthodes de travail, comme la méthode des volumes finis jusqu'alors seulement étudiée théoriquement, et de mettre en application nos connaissances et techniques en programmation.

Références

BOUVET, Adrien, Didier DEMANGE, Philippe HERVE et Rachid BENNACER. Caractérisation thermophysique des matériaux thermo-dégradables. AFM, EDP Sciences, 2006.

Pestourie, Romain. Adaptation de maillage pour la simulation de la pyrolyse d'un matériau de protection thermique. Rapport de stage, CEA, 2019.

Saiac, Jacques-Hervé. Eléments finis. Analyse d'erreur et adaptation de maillages en dimension un Travaux Pratiques, CNAM, 2010.

Table des figures

1	Evolution de la masse volumique pour différents temps en fonction de l'espace
2	Schéma du maillage
3	Schéma de la cellule d'intégration
4	Représentation de la distance entre les fronts de pyrolyse
5	Maillage suivant le front de pyrolyse
6	Maillage ne suivant plus le front de pyrolyse
7	Représentation d'un maillage 1D avant et après application de la méthode des ressorts.
8	Représentation d'une fonction avant et après adaptation
9	Résolution du schéma équidistant constant
10	Résolution du schéma avec un maillage non équidistant
11	Exemple de maillage mobile non adapté