

# Simulation de matériaux à changement de phase par une méthode d'éléments finis adaptatifs

Aina RAKOTONDRANDISA<sup>1\*</sup> et Ionut DANAILA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Mathématiques Raphaël Salem, Université de Rouen  
Avenue de l'Université, 76801 Saint-Étienne-du-Rouvray

\* (auteur correspondant : aina.rakotondrandisa@etu.univ-rouen.fr)

**Résumé** - Nous présentons un nouveau système numérique pour la simulation de matériaux à changement de phase (MCP), en prenant en compte la convection naturelle dans la partie liquide, ainsi que la présence d'une zone de mélange entre les deux phases. Nous utilisons une approche mono-domaine basée sur un modèle d'enthalpie combiné avec le modèle de Carman-Kozeny qui permet d'annuler la vitesse dans la partie solide. La discrétisation spatiale est basée sur les éléments finis de Taylor-Hood ; la discrétisation temporelle utilise un schéma implicite d'ordre deux (GEAR). La particularité du code est d'utiliser un maillage adaptatif permettant de suivre efficacement l'interface solide-liquide. Le code est d'abord validé par rapport aux résultats existants en simulant la fusion d'un MCP carré ; son efficacité est ensuite prouvée en simulant d'autres cas de calculs plus complexes.

## Nomenclature

$C$	Chaleur spécifique adimensionnée	<i>Symboles grecs</i>	
$f_B$	Force de flottabilité adimensionnée	$\alpha$	Diffusivité thermique, $m^2/s$
$Fo$	Nombre de Fourier	$\beta$	Coefficient de dilatation thermique, $1/K$
$g$	Accélération gravitationnelle, $m/s^2$	$\mu$	Viscosité dynamique, $kg/(m\ s)$
$K$	Conductivité thermique adimensionnée	$\nu$	Viscosité cinématique, $m^2/s$
$L$	Dimension du domaine, m	$\rho$	Masse volumique, $kg/m^3$
$Re$	Nombre de Reynolds	$\theta$	Température adimensionnée
$Pr$	Nombre de Prandtl	<i>Indices et exposants</i>	
$Ra$	Nombre de Rayleigh	$ref$	Référence
$p$	Pression, $N/m^2$	$s, l$	Solide, liquide
$T$	Température, K	$h, c$	Chaud, froid
$u$	Vecteur vitesse, $m/s$	$f$	Fusion
$x$	Coordonnées spatiales, m		

## 1. Introduction

Les matériaux à changement de phase (MCP) offrent la possibilité d'emmagasiner et de restituer une forte quantité de chaleur au moment de leur changement de phase : au-dessus d'une certaine température caractéristique ils se liquéfient en absorbant la chaleur extérieure et la restituent lorsque la température baisse. Les applications industrielles des MCP couvrent un large nombre de domaines d'activité, de l'électronique jusqu'au bâtiment.

Dans cette étude nous abordons la simulation numérique de systèmes physiques à changement de phase, en prenant en compte la convection naturelle dans la partie liquide, ainsi que la présence d'une zone de mélange entre les deux phases. Nous utilisons un modèle mono-domaine en résolvant le même système d'équations dans la partie liquide et la partie solide : les équations de Navier-Stokes incompressibles avec l'approximation de Boussinesq. Pour ramener la vitesse à zéro dans les cellules solides, nous utilisons le modèle de Carman-Kozeny qui introduit un terme de pénalisation dans les équations de quantité de mouvement. Dans l'équation

de l'énergie, le changement de phase est modélisé par un modèle d'enthalpie. Cette approche présente deux difficultés numériques majeures : suivre avec précision l'évolution de l'interface solide-liquide et résoudre efficacement la convection naturelle dans la partie fluide.

La spécificité de notre code est d'utiliser un maillage adaptatif en raffinant uniquement dans les zones d'intérêt où des variations brusques des coefficients sont observées, notamment au niveau de l'interface solide-liquide. La discrétisation spatiale est basée sur les éléments finis de Taylor-Hood et la discrétisation temporelle utilise un schéma implicite d'ordre deux (GEAR). Les simulations sont effectuées avec le logiciel FreeFem++ [1].

Nous présentons d'abord la validation du code par rapport aux résultats existants pour la fusion d'un MCP carré. Ensuite, nous montrons l'efficacité du code en calculant des configurations complexes : la formation de croûtes solides dans un MCP qui présente une distorsion de forme et la fusion d'un MCP cylindrique avec plusieurs sources circulaires de chaleur.

## 2. Modèle mathématique et système numérique

Nous utilisons le modèle d'enthalpie proposé par Voller et al. [2]. La conservation de l'énergie est écrite sous la forme :

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \nabla \cdot (H\mathbf{u}) - \nabla \cdot (k\nabla T) = 0, \quad (1)$$

avec l'enthalpie  $H$  donnée par la somme de la chaleur sensible ( $cT$ ) et de la chaleur latente ( $cs$ ) :

$$H = c(T + s). \quad (2)$$

L'idée principale derrière le modèle d'enthalpie consiste à définir le changement de phase dans une zone de mélange définie par un intervalle de température  $[T_f - \varepsilon_1; T_f + \varepsilon_2]$  autour de la température de fusion  $T_f$ . Théoriquement, le terme  $s$  dans (2) est décrit par une fonction de Heaviside qui vaut 0 dans le solide et une grande valeur dans le liquide. Dans la pratique, une fonction linéaire est généralement utilisée pour régulariser la valeur de  $s$  au niveau de la zone de mélange. Dans cette étude, nous utilisons une fonction plus régulière pour décrire la variation de toutes les grandeurs discontinues à travers la zone de mélange :

$$F_s(T; a_s, T_f, R_s) = f_l + \frac{f_s - f_l}{2} \left\{ 1 + \tanh \left( a_s \left( \frac{T_f - T}{R_s} \right) \right) \right\}, \quad (3)$$

où  $f_s$  et  $f_l$  sont les valeurs imposées dans le solide et le liquide et  $a_s$  et  $R_s$  des coefficients contrôlant l'étendue de la zone de mélange.

En combinant les équations (1) et (2), la conservation de l'énergie devient :

$$\frac{\partial (cT)}{\partial t} + \nabla \cdot (cT\mathbf{u}) - \nabla \cdot (k\nabla T) + \frac{\partial (cs)}{\partial t} + \nabla \cdot (cs\mathbf{u}) = 0. \quad (4)$$

La zone de mélange étant de faible épaisseur et se comportant comme un solide, le dernier terme de transport  $\nabla \cdot (cs\mathbf{u})$  peut être négligé.

Le mouvement du fluide est régi par la loi de conservation de la masse :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (5)$$

et la conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho_l \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho_l (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \nabla \cdot (2\mu_l \mathbf{D}(\mathbf{u})) - \rho_l g \mathbf{e}_y = 0, \quad (6)$$

avec  $\mathbf{D}(\mathbf{u}) = (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})/2$  le tenseur des taux de déformation. Afin de pouvoir comparer nos résultats avec les données expérimentales, les équations sont adimensionnées en effectuant le changement d'échelle suivant :

$$\mathbf{x} \rightarrow \frac{\mathbf{x}}{L_{ref}}, \quad \mathbf{u} \rightarrow \frac{\mathbf{u}}{V_{ref}}, \quad \theta = \frac{T - T_{ref}}{T_h - T_c}, \quad t \rightarrow \frac{t}{t_{ref}}, \quad t_{ref} = L_{ref}/V_{ref}. \quad (7)$$

On obtient ainsi le système d'équations adimensionnés :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla \cdot (2\mathbf{D}(\mathbf{u})) + A(\theta) \mathbf{u} - f_B(\theta) \mathbf{e}_y = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial (C\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (C\theta \mathbf{u}) - \nabla \cdot \left( \frac{K}{Pr} \nabla \theta \right) - \frac{\partial (CS)}{\partial t} - \nabla \cdot (CS \mathbf{u}) = 0, \quad (10)$$

avec les nombres sans dimension, Reynolds ( $Re$ ), Prandtl ( $Pr$ ), Rayleigh ( $Ra$ ), et Stefan ( $Ste$ ) :

$$Re = \frac{V_{ref} L_{ref}}{\nu_l}, \quad Pr = \frac{\nu_l}{\alpha_l}, \quad Ra = \frac{g\beta L_{ref}^3 (T_h - T_c)}{\nu_l \alpha_l}, \quad Ste = \frac{1}{s_l}, \quad (11)$$

et  $C = c_s/c_l$ ,  $K = k_s/k_l$ ,  $S = s/(T_h - T_c)$ .

On choisit par la suite :

$$V_{ref} = \frac{\nu_l}{L} \Rightarrow t_{ref} = \frac{\nu_l}{L^2} \Rightarrow Re = 1. \quad (12)$$

Dans l'équation de quantité de mouvement (9),  $f_B$  est le terme de flottabilité qui est obtenu en appliquant l'hypothèse de Boussinesq pour approcher le terme  $\rho_l g$  dans (6) :

$$f_B(\theta) = \frac{Ra}{Pr Re^2} \theta. \quad (13)$$

Le terme de Carman-Kozeny  $A(\theta)$  est introduit dans (9) comme terme de pénalité permettant de ramener la vitesse à zéro dans le solide :

$$A(\theta) = -\frac{C_{ck}(1-\lambda)^2}{\lambda^3 + b}, \quad (14)$$

où  $\lambda$  est la porosité représentée par la fonction (3) qui vaut 1 dans le fluide et 0 dans le solide,  $b$  est un terme de pénalité pour éviter une division par 0 et  $C_{ck}$  est une constante qui prend une grande valeur ( $\approx 10^8$ ). Avec ce modèle, l'équation (9) est valable dans les deux phases, solide et liquide (elle devient  $\mathbf{u} = 0$  dans la phase solide).

La discrétisation spatiale est basée sur les éléments finis de Taylor-Hood ( $P_2$  pour la vitesse et  $P_1$  pour la pression). La discrétisation temporelle utilise un schéma d'ordre deux (schéma GEAR ou BDF2) :

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

Après une discrétisation implicite (tous les termes sont considérés à l'instant  $n + 1$ ), le système d'équations non-linéaires (8) à (10) est résolu par un algorithme de Newton. La présence de forts gradients à l'interface solide-liquide nécessite un maillage fin : l'avantage de notre code de calcul est de pouvoir effectuer une adaptation de maillage à chaque pas de temps au niveau des zones d'intérêt, en permettant ainsi d'optimiser le temps de calcul.

### 3. Résultats

#### 3.1. Fusion d'un MCP

Afin de valider le modèle numérique proposé dans la section précédente, nous considérons le cas de la fusion d'un MCP n-octadécane de forme carré. Les résultats seront comparés avec les résultats expérimentaux d'Okada [3] et les simulations de Wang et al. [4] et de Danaila et al. [5].

Le domaine carré est rempli d'un MCP n-octadécane, initialement solide, à une température  $\theta_0 = \theta_c = -0.01$ , inférieure à la température de fusion ( $\theta_f = 0$ ). La frontière gauche est chauffée et maintenue à une température constante  $\theta_h = 1$ . Le côté droit est maintenu à une température constante (température du solide  $\theta_c = -0.01$ ) et les frontières horizontales sont adiabatiques. La zone de mélange entre la partie solide et la partie liquide est définie pour  $\theta \in [-0.01, 0.01]$ . Les paramètres physiques sont :  $Ra = 3.27 \cdot 10^5$ ,  $Pr = 56.2$ ,  $Ste = 0.045$ , et  $C = K = 1$ .

Les champs de vitesses et de température à l'instant  $t = 78.7s$ , sont présentés sur la figure 1, avec un domaine composé de 17 000 triangles. La simulation prend 10h sur un ordinateur portable (processeur Intel Core i7 2, 8 GHz). La présence d'une zone de recirculation dans la partie fluide est bien observée. La convection naturelle, qui est prédominante par rapport à la conduction thermique, explique la forme courbée de l'interface solide-liquide.

Nos résultats sont d'abord comparés avec les résultats obtenus par Danaila et al. [5] qui utilisent la méthode des éléments finis avec un autre modèle basé sur la variation de la viscosité entre le solide et le liquide à la place de la pénalisation de Carman-Kozeny, et un schéma d'ordre un en temps. Les courbes de la figure 1, représentant la position de l'interface liquide-solide, montrent que les résultats de notre modèle sont très proches de la courbe expérimentale et des résultats numériques de Danaila et al [5].

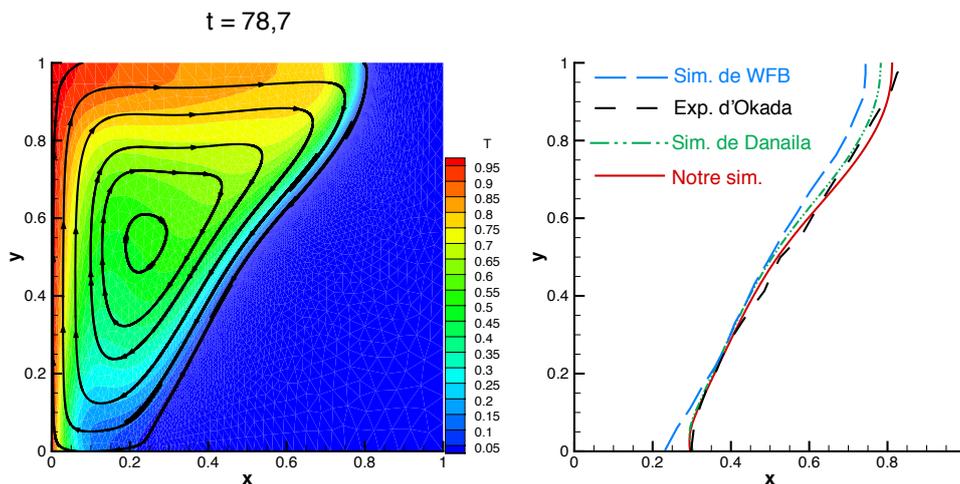


Figure 1 Fusion d'un MCP de forme carré. Résultats à l'instant  $t = 78.7$  s. Champ de température et lignes de courant (à gauche) et position de l'interface liquide-solide (à droite).

### 3.2. Formation de croûte solide dans un MCP

Nous simulons dans cette partie le cas proposé par Nourgaliev et. al [6] qui représente la formation de croûtes solides dans un MCP avec une distorsion de forme. La présence de la distorsion, comme il est montré sur la Figure 2, rajoute une difficulté supplémentaire pour l'adaptation de maillage. Le taux de distorsion est régi par les angles  $a_1$  et  $a_2$ . Ici nous prenons  $a_1 = a_2 = 20^\circ$  conformément à la simulation de Nourgaliev et. al [6] (voir la figure 2).

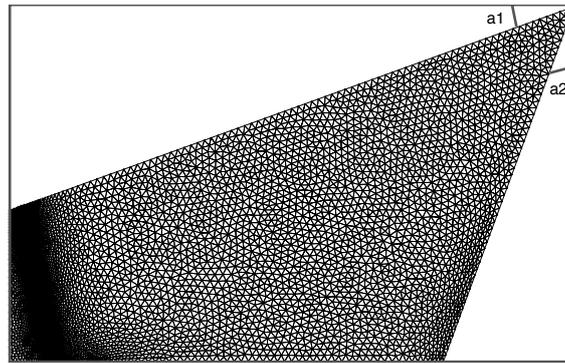


Figure 2 Formation de croûte solide dans un MCP. Domaine de calcul considéré dans cette étude avec  $a_1 = a_2 = 20^\circ$  : adaptation de maillage suivant la température de solidification.

Le MCP est initialement liquide, à une température  $\theta_h = 2$ , supérieure à la température de solidification  $\theta_s = 1.4$ . Le bord droit est maintenu à la température  $\theta_h$ . Les autres frontières étant adiabatiques, dans un premier temps, la température à gauche est abaissée à une température légèrement supérieure à la température de solidification pour créer une convection naturelle dans le MCP jusqu'à obtenir un état stationnaire. Cette étape permet d'avoir un gradient de température moins important, avant la simulation de la solidification. Elle est ensuite abaissée en dessous de la température de solidification, à  $\theta_c = 1$ . On observe ainsi la formation de croûte solide se propageant de la gauche vers la droite.

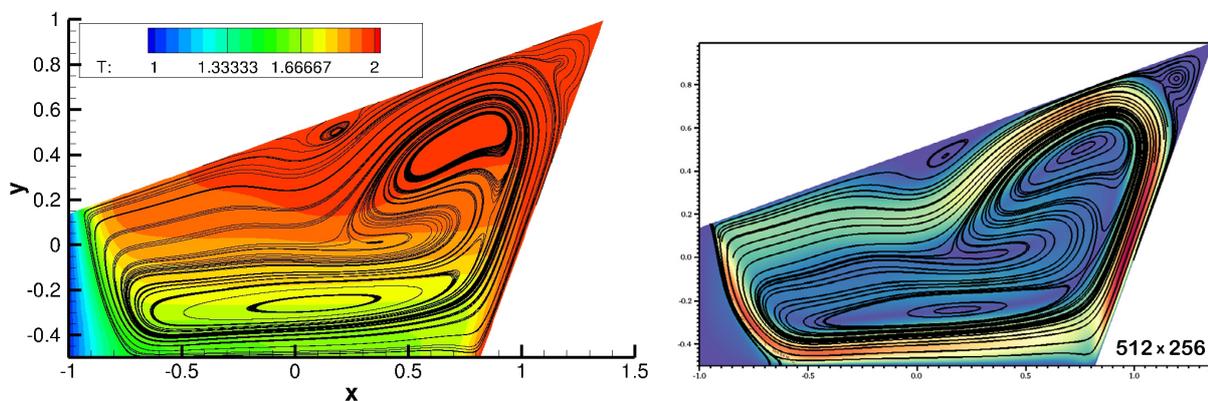


Figure 3 Formation de croûte solide dans un MCP. Champ de température et lignes de courant à  $t = 60s$  : à gauche, notre simulation avec un maillage de 11 600 triangles, à droite, le résultat de Nourgaliev et al. [6] obtenu avec un maillage de 131 072 éléments.

Les paramètres physiques sont :  $Ra = 10^6$ ,  $Pr = 0.1$ ,  $Ste = 4.854$ . Pour ce cas, la mise à l'échelle utilise les grandeurs caractéristiques suivantes :

$$V_{ref} = \frac{\nu_l}{L} \sqrt{\frac{Ra}{Pr}} \Rightarrow t_{ref} = \frac{\nu_l}{L^2} \sqrt{\frac{Ra}{Pr}} \Rightarrow Re = \sqrt{\frac{Ra}{Pr}}. \quad (15)$$

La figure 3 montre le champ de température et les lignes de courant pour  $t = 60s$ . Nos résultats sont similaires aux résultats obtenus par Nourgaliev et al. [6].

Le maillage est raffiné dans les zones d'intérêts et de-raffiné dans le reste du domaine à chaque pas de temps, permettant ainsi de réduire le temps de calcul. Le raffinement est fait dans les zones à forts gradients, notamment à l'interface solide-liquide suivant la température de solidification  $\theta_s = 1.4$  et aux bords, comme il est visible sur la figure 2. Nous obtenons ainsi les mêmes résultats que Nourgaliev et al [6] avec dix fois moins d'éléments grâce à l'adaptation de maillage dynamique. Le temps de simulation pour ce cas test est d'environ 24h sur un ordinateur portable.

### 3.3. Fusion d'un MCP cylindrique

Nous considérons dans cette partie un MCP cylindrique. Il est initialement solide, à une température initiale  $\theta_0 = -0.01$ , légèrement inférieure à la température de fusion  $\theta_f = 0$ . Une source circulaire de chaleur, maintenue à température constante  $\theta_h = 1$  est placée au centre du MCP. On trace l'évolution en temps de la fraction de fluide totale ainsi que l'effet de la source de chaleur en simulant différentes configurations suggérées par Luo et al. [7] : une seule source au centre, quatre sources, et neuf sources placées de façon symétrique. Dans les trois cas, les sources ont les mêmes surfaces de contact. En utilisant la symétrie du problème, seule la moitié du domaine est simulée. Les paramètres physiques sont :  $Ra = 5 \cdot 10^4$ ,  $Pr = 0.2$ ,  $Ste = 0.02$ .

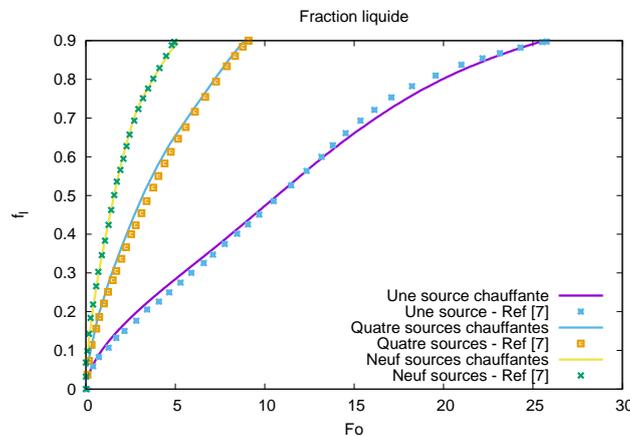


Figure 4 Fusion d'un MCP cylindrique. Variation de la fraction liquide totale en fonction du nombre de Fourier  $Fo = \alpha t / L^2$  pour différentes sources de chaleur.

Les courbes de la figure 4, qui sont comparées avec les résultats obtenus par Luo et al. [7], permettent d'observer une fusion plus rapide (augmentation plus rapide de la fraction de fluide) dans le cas avec neuf tubes chauffants, comparé avec le cas avec quatre, ou encore avec un seul tube chauffant. Cette remarque est cohérente avec les champs de température et de vitesse montrés sur la figure 5. Nous pouvons remarquer que les effets sont différents en fonction du nombre de sources de chaleur. L'évolution de la fusion est différente dans chaque cas : la forme et la position de l'interface change, comme il est illustré sur la figure 5.

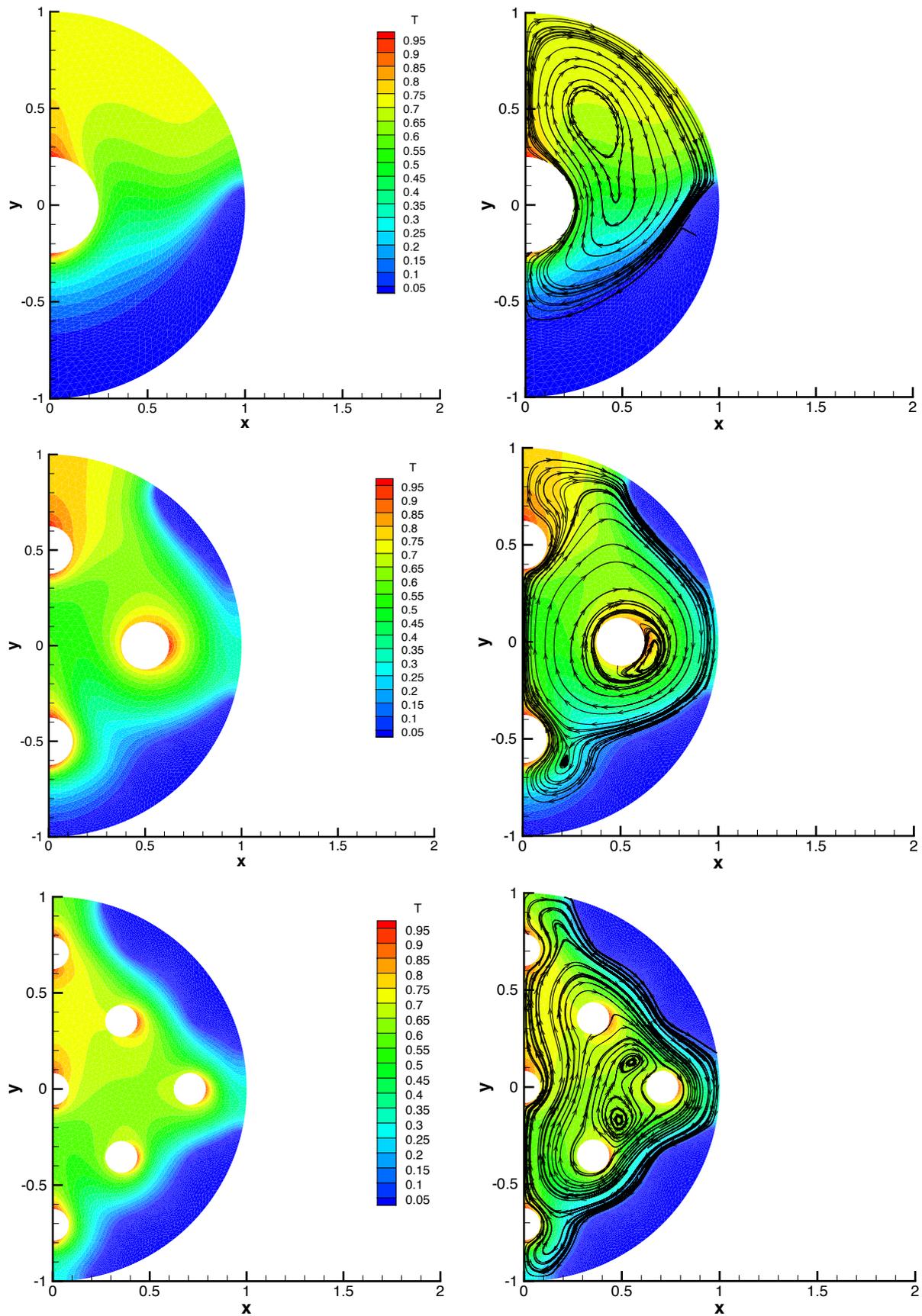


Figure 5 Fusion d'un MCP cylindrique. Cas de calcul avec une, quatre et neuf sources circulaires de chaleur, disposées symétriquement par rapport à l'axe des  $y$ . Champs de température (à gauche) et lignes de courant (à droite). Le nombre maximum d'éléments du maillage est de 5370 et le temps de simulation varie de 5h (un tube) à 3h (neuf tubes).

## 4. Conclusion

Nous avons présenté dans ce travail un nouveau système numérique basé sur FreeFem++ pour la simulation de matériaux à changement de phase. En utilisant un modèle d'enthalpie, le même système d'équations a été résolu dans les parties liquide et solide. Le terme de pénalisation de Carman-Kozeny a été utilisé pour ramener la vitesse à zéro dans la partie solide. Le principal avantage du code de calcul réside dans sa capacité à adapter le maillage à chaque pas de temps, lui permettant de suivre avec précision l'interface entre les deux phases.

Le système numérique a été validé pour le cas de la fusion d'un MCP carré. Un très bon accord avec les données numériques et expérimentales présentes dans la littérature a été obtenu. En particulier, la position de l'interface solide-liquide est proche des résultats expérimentaux, ce qui a permis à la fois de valider et de montrer l'efficacité de notre algorithme.

Cette efficacité et robustesse ont par la suite été confirmées par la capacité du code à simuler des cas complexes : la formation de cristaux solides dans une géométrie avec distorsion et la fusion d'un MCP cylindrique avec des sources de chaleur circulaires internes. Une extension de ces cas de calcul en trois dimensions est envisagée à la suite de cette étude.

## Références

- [1] F. Hecht, New developments in FreeFem++, *Journal of Numerical Mathematics*, 20 (2012) 251-266.
- [2] V. R. Voller, M. Cross, N. C. Markatos, An enthalpy method for convection/diffusion phase change, *Int. J. for Num. Meth. in Eng.*, 24 (1987) 271-284.
- [3] M. Okada, Analysis of heat transfer during melting from a vertical wall, *Int. J. of Heat and Mass Transf.*, 27 (1984) 1986-2000.
- [4] S. Wang, A. Faghri, T. L. Bergman, A comprehensive numerical model for melting with natural convection, *Int. J. of Heat and Mass Transf.*, 53 (2010) 2057-2066.
- [5] I. Danaïla, R. Moglan, F. Hecht, S. Le Masson, A Newton method with adaptive finite elements for solving phase-change problems with natural convection, *J. Comp. Physics*, 274 (2014) 826-840.
- [6] R. Nourgaliev, H. Luo, B. Weston, A. Anderson, S. Schofield, T. Dunn, J.-P. Delplanque, Fully-implicit orthogonal reconstructed Discontinuous Galerkin method for fluid dynamics with phase change, *J. Comp. Physics*, 305 (2016) 964-996.
- [7] K. Luo, F. J. Yao, H. Yi, H. Tan, Lattice Boltzmann simulation of convection melting in complex heat storage systems filled with phase change materials, *Applied Thermal Engineering*, 86 (2015) 238-250.

## Remerciements

This project was co-financed by the European Union with the European regional development fund (ERDF, HN0002081) and by the Normandy Regional Council via the M2NUM project.