

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À CHICOUTIMI

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À  
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À CHICOUTIMI  
COMME EXIGENCE PARTIELLE  
DE LA MAÎTRISE EN INGÉNIERIE

SÉBASTIEN PERRON

RÉSOLUTION AVEC LA MÉTHODE DES VOLUMES FINIS DIRIGÉS  
DE L'ÉQUATION DE LA CHALEUR  
POUR DES PROBLÈMES DIPHASIQUES EN 1D ET 2D

MAI 1998



### **Mise en garde/Advice**

Afin de rendre accessible au plus grand nombre le résultat des travaux de recherche menés par ses étudiants gradués et dans l'esprit des règles qui régissent le dépôt et la diffusion des mémoires et thèses produits dans cette Institution, **l'Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** est fière de rendre accessible une version complète et gratuite de cette œuvre.

Motivated by a desire to make the results of its graduate students' research accessible to all, and in accordance with the rules governing the acceptance and diffusion of dissertations and theses in this Institution, the **Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** is proud to make a complete version of this work available at no cost to the reader.

L'auteur conserve néanmoins la propriété du droit d'auteur qui protège ce mémoire ou cette thèse. Ni le mémoire ou la thèse ni des extraits substantiels de ceux-ci ne peuvent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

The author retains ownership of the copyright of this dissertation or thesis. Neither the dissertation or thesis, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

# Résumé

Ce travail porte sur la résolution de problèmes de changement de phase en 1D et 2D lorsque le seul mode de transfert de chaleur est la conduction. On ne considère que les changements de phase liquide-solide (solidification) et solide-liquide (fusion) à une température donnée.

Ce type de problème peut être modélisé par l'équation aux dérivées partielles

$$\frac{\partial H(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T(\mathbf{x}, t)) = 0,$$

où

$$H = \begin{cases} \rho c_{ps} T, & T \leq T_f \\ \rho c_{ps} T_f + \rho c_{pl}(T - T_f) + \rho L, & T \geq T_f \end{cases}$$

est une fonction discontinue à  $T = T_f$ . Cette discontinuité marque la séparation entre le solide et le liquide et est appelée interface diphasique. Les propriétés  $k$ ,  $c_{ps}$  et  $c_{pl}$  sont constantes pour une phase donnée,  $L$  et  $\rho$  sont constantes.

Cette équation doit habituellement être résolue avec un schéma numérique. Le schéma numérique que l'on utilise est la méthode des volumes finis dirigés. Il s'agit d'un nouveau schéma numérique de résolution d'équations aux dérivées partielles. Ce schéma numérique est une méthode de volumes finis espace-temps qui permet le déplacement des noeuds du maillage. Lors de la résolution des équations de discré-tisation, la position de certains noeuds du maillage est inconnue. De plus, puisque le schéma permet la rencontre de noeuds, le pas de temps est parfois inconnu.

Dans ce travail, on définit les volumes de contrôle, les fonctions interpolantes et la base d'approximation pour des problèmes 1D et 2D. De plus, on présente les équations discrètes utilisées pour la résolution de problèmes 1D. Pour les problèmes en 2D, seul le développement des équations discrètes est présenté.

Des résultats numériques en 1D et 2D sont présentés. En premier lieu, des résultats numériques sont comparés avec des solutions analytiques. Ensuite, des tests originaux sont présentés. Ces tests montrent que la méthode permet de gérer naturellement la présence de plusieurs interfaces. De plus, les solutions sont très précises et ne comportent aucune oscillation.

## **Avant-propos**

Je tiens à remercier M. Pierre Joyal, mon directeur, pour m'avoir permis de réaliser ce travail de recherche. Il a su très bien me guider dans mon apprentissage et il m'a permis de développer au maximum mes habilités.

# Table des matières

## Avant-propos

## Table des matières

### Liste des figures

### Liste des tableaux

### Nomenclature

### Introduction

1

## 1 Caractérisation du problème

4

1.1	Introduction . . . . .	4
1.2	Modèle mathématique . . . . .	5
1.3	Variables adimensionnées . . . . .	11

## 2 Méthodes de résolution du problème

13

2.1	Méthodes numériques . . . . .	13
2.2	Solutions analytiques en 1D . . . . .	17
2.2.1	Condition de type Dirichlet . . . . .	17
2.2.2	Condition de type Neumann . . . . .	18
2.3	Solution approximative en 2D, condition de Dirichlet . . . . .	19

## 3 Présentation du schéma numérique en 1D

21

3.1	Cadre général . . . . .	21
3.2	Volumes de contrôle espace-temps en 1D . . . . .	22

3.3	Discrétisation du problème en 1D . . . . .	24
3.3.1	Fonctions interpolantes en 1D . . . . .	25
3.3.2	Fonctions de la base de l'espace d'interpolation en 1D . . . . .	26
3.4	Équations discrètes . . . . .	30
3.4.1	Noeud intérieur . . . . .	30
3.4.2	Noeud sur une frontière . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Mise en oeuvre du schéma numérique en 1D</b>	<b>36</b>
4.1	Introduction . . . . .	36
4.2	Déplacement des noeuds . . . . .	36
4.3	Rencontre de noeuds . . . . .	37
4.3.1	Rencontre à l'intérieur du domaine . . . . .	37
4.3.2	Rencontre sur le bord du domaine . . . . .	38
4.4	Entrée dans le domaine de l'interface . . . . .	38
4.4.1	Condition au bord de type Neumann . . . . .	38
4.4.2	Condition au bord de type Dirichlet . . . . .	39
<b>5</b>	<b>Résultats numériques en 1D</b>	<b>42</b>
5.1	Condition au bord de type Dirichlet . . . . .	42
5.1.1	Test 1, fusion de la glace . . . . .	43
5.1.2	Test 2, solidification de l'aluminium . . . . .	45
5.2	Condition au bord de type Neumann . . . . .	47
5.2.1	Test 3, solidification de l'aluminium pour une condition de flux .	47
5.3	Test 4, expérimentation numérique . . . . .	49
<b>6</b>	<b>Présentation du schéma numérique en 2D</b>	<b>51</b>
6.1	Cadre général . . . . .	51
6.2	Volumes de contrôle espace-temps en 2D . . . . .	52
6.3	Déplacement, éclatement et rencontre de noeuds en 2D . . . . .	54
6.3.1	Déplacement des noeuds . . . . .	55
6.3.2	Éclatement d'un noeud en 2D . . . . .	55
6.3.3	Rencontre de noeuds en 2D . . . . .	55
6.4	Discrétisation du problème en 2D . . . . .	57

6.4.1	Fonctions interpolantes en 2D . . . . .	59
6.4.2	Fonctions de la base de l'espace d'interpolation en 2D . . . . .	60
6.5	Équations discrètes . . . . .	61
6.5.1	Intégration en espace . . . . .	63
6.5.2	Intégration en espace-temps . . . . .	64
6.5.3	Équations discrètes . . . . .	65
6.5.4	Traitemet des frontières . . . . .	66
<b>7</b>	<b>Mise en oeuvre du schéma numérique en 2D</b>	<b>68</b>
7.1	Introduction . . . . .	68
7.2	Déplacement des noeuds . . . . .	68
7.3	Rencontre de noeuds . . . . .	69
7.4	Éclatement des noeuds . . . . .	70
7.5	Entrée dans le domaine de l'interface . . . . .	71
7.5.1	Condition au bord de type Neumann . . . . .	71
7.5.2	Condition au bord de type Dirichlet . . . . .	72
7.6	Nettoyage des noeuds . . . . .	75
<b>8</b>	<b>Résultats numériques en 2D</b>	<b>77</b>
8.1	Condition au bord de type Dirichlet . . . . .	77
8.1.1	Problème 1, front de solidification (test à une phase) . . . . .	77
8.1.2	Problème 2, front de solidification (test à deux phases) . . . . .	79
8.1.3	Problème 3, solidification dans un coin infini (test à une phase)	82
8.1.4	Problème 4, solidification dans un coin infini (test à deux phases)	84
8.1.5	Problème 5, gestion de plusieurs interfaces diphasiques . . . . .	87
8.2	Condition au bord de type Neumann . . . . .	91
8.2.1	Problème 6, test à une phase de solidification avec condition de flux . . . . .	91
8.2.2	Problème 7, expérimentation numérique avec condition de flux .	92
<b>9</b>	<b>Algorithme de résolution</b>	<b>96</b>
9.1	Algorithme de résolution . . . . .	96
9.2	Résoluteur . . . . .	96

9.3	Prédicteur . . . . .	97
9.4	Détection de l'entrée dans le domaine de l'interface . . . . .	98
9.5	Préconditionnement . . . . .	98
9.6	Validation des résultats . . . . .	100
	<b>Conclusion</b>	<b>102</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>104</b>

## Liste des figures

1.1	Graphique de l'enthalpie en fonction de la température . . . . .	8
1.2	Volume de contrôle matériel à l'interface . . . . .	9
2.1	Solidification sur un coin infini . . . . .	20
3.1	Discretisation possible du domaine avec volumes de contrôle en 1D . . . . .	23
3.2	Maillage pour une rencontre et un éclatement . . . . .	23
3.3	Fonction de la base à un noeud intérieur . . . . .	28
3.4	Fonction de la base lors d'une rencontre . . . . .	28
3.5	Fonction de la base lors d'un éclatement en deux noeuds . . . . .	28
3.6	Disparition d'une discontinuité en 1D au temps $t = 0$ . . . . .	29
3.7	Fonctions de la base pour la disparition d'une discontinuité en 1D . . . . .	29
3.8	Volume de contrôle et sa frontière en 1D . . . . .	30
3.9	Volumes de contrôle pour les noeuds au bord . . . . .	34
4.1	Volume d'intégration pour une rencontre en 1D . . . . .	37
4.2	Volumes d'intégration pour l'entrée de l'interface en 1D . . . . .	38
4.3	Évolution de l'enthalpie lors de l'entrée de l'interface . . . . .	39
4.4	Éclatement lors du traitement d'une discontinuité en 1D . . . . .	41
4.5	Volumes de contrôle lors du traitement d'une discontinuité en 1D . . . . .	41
5.1	Historique du déplacement de l'interface pour le test 1 . . . . .	44
5.2	Profil de température au temps final pour le test 1 . . . . .	44
5.3	Historique du déplacement de l'interface pour le test 2 . . . . .	46
5.4	Profil de température au temps final pour le test 2 . . . . .	46
5.5	Historique de déplacement de l'interface pour le test 3 . . . . .	48
5.6	Profil de température au temps final pour le test 3 . . . . .	48

5.7	Évolution du profil de température pour le test 4 . . . . .	50
5.8	Profil de température au temps final pour le test 4 . . . . .	50
6.1	Élément prismatique triangulaire . . . . .	52
6.2	Cellule et volume de contrôle espace-temps en 2D . . . . .	53
6.3	Surfaces d'un volume de contrôle pour deux prismes triangulaires voisins . . . . .	54
6.4	Déplacement des noeuds en 2D . . . . .	55
6.5	Éclatement d'un noeud en un triangle . . . . .	56
6.6	Évolution possible du maillage lors d'un éclatement en 2D . . . . .	56
6.7	Élément prismatique triangulaire lors d'une rencontre en 2D . . . . .	57
6.8	Évolution possible du maillage lors d'une rencontre en 2D . . . . .	57
6.9	Surface d'intégration sur deux prismes triangulaires voisins . . . . .	62
6.10	Surfaces d'intégration pour un noeud sur une frontière . . . . .	66
7.1	Déplacement d'un noeud sur une arête . . . . .	69
7.2	Surface d'intégration au temps $t_0$ lors d'une rencontre . . . . .	70
7.3	Éclatement lors de l'entrée de l'interface dans le domaine . . . . .	71
7.4	Structure du maillage pour le traitement d'une discontinuité . . . . .	72
7.5	Modification d'un quadrangle . . . . .	73
7.6	Nettoyage des noeuds en 2D . . . . .	75
8.1	Évolution du front de solidification pour le problème 1 . . . . .	79
8.2	Évolution du front de solidification pour le problème 2 . . . . .	80
8.3	Évolution de la température pour un noeud adjacent à la frontière . . . . .	81
8.4	Évolution du front de solidification pour le problème 3 . . . . .	83
8.5	Maillage de base pour le problème 4 . . . . .	84
8.6	Évolution du front de solidification pour le problème 4 . . . . .	85
8.7	Maillage du problème 4 au temps $t = 495.81s$ . . . . .	86
8.8	Courbes de niveau après 20 pas de temps. . . . .	87
8.9	Géométrie et condition au bord pour le problème 5 . . . . .	88
8.10	Fronts de solidification à $t = 66.06s$ . . . . .	89
8.11	Fronts de solidification à $t = 123.092s$ . . . . .	89
8.12	Fronts de solidification à $t = 141.259s$ . . . . .	90

8.13 Profil de température à $t = 485.453s$ . . . . .	90
8.14 Évolution du front de solidification pour le problème 6 . . . . .	92
8.15 Géométrie et condition aux bord pour le problème 7 . . . . .	92
8.16 Profil de température à $t = 18372s$ . . . . .	93
8.17 Profil de température à $t = 21580s$ . . . . .	93
8.18 Profil de température à $t = 39769s$ . . . . .	94
8.19 Profil de température à $t = 46117s$ . . . . .	94

## **NOTE TO USERS**

**Page(s) not included in the original manuscript and are unavailable from the author or university. The manuscript was microfilmed as received.**

### **Liste Des Tableaux (List of Tables)**

**This reproduction is the best copy available.**

**UMI**

# Nomenclature

## Caractères usuels

$dA$	Élément de surface	$m^2.$
$dA_i$	Élément de surface orientée	$m^2.$
$b_{ref}$	Longueur de référence	$m.$
$c_p$	Chaleur massique à pression constante, la phase n'est pas précisée	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}.$
$c_{pl}, c_{ps}$	Chaleur massique à pression constante des phases liquide et solide	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}.$
$e$	Énergie interne par unité de masse	$J \cdot kg^{-1}.$
$F_o$	Nombre de Fourier.	
$H$	Enthalpie volumique	$J \cdot m^{-3}.$
$h$	Enthalpie massique	$J \cdot kg^{-1}.$
$k$	Conductivité thermique, la phase n'est pas précisée	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}.$
$k_l, k_s$	Conductivité thermique des phases liquide et solide	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}.$
$L$	Chaleur latente de fusion	$J \cdot kg^{-1}.$
$q$	Flux de chaleur total	$W.$
$q''$	Flux de chaleur par unité de surface	$W \cdot m^{-2}.$
$q'''$	Génération d'énergie interne	$J \cdot m^{-3}.$
$r$	Paramètre d'interpolation.	
$Ste$	Nombre de Stefan.	
$t$	Coordonnée de temps	$s.$
$T$	Température, la phase n'est pas précisée	$K.$
$T_l, T_s$	Température des phases liquide et solide	$K.$
$T_{ref}$	Température de référence	$K.$
$T_f$	Température de fusion ou de solidification	$K.$
$T_i$	Température initiale de tout le domaine	$K.$
$u$	Norme du vecteur vitesse	$m \cdot s^{-1}.$
$u_i$	Composantes du vecteur vitesse	$m \cdot s^{-1}.$
$v$	Volume de contrôle matériel arbitraire	$m^3.$
$dv$	Élément de volume	$m^3.$
$\partial v$	Surface d'un volume de contrôle matériel arbitraire	$m^2.$
$V$	Volume de contrôle arbitraire espace-temps	$m^3 \cdot s.$
$dV$	Élément de volume espace-temps	$m^3 \cdot s.$
$\partial V$	Surface d'un volume espace-temps	$m^2 \cdot s.$
$x, y, z$	Coordonnées spatiales	$m.$
$\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$	Coordonnées spatiales (sans dimension).	
$\mathbf{X}$	Position d'un point de l'interface	$m.$
$\tilde{\mathbf{X}}$	Position d'un point de l'interface (sans dimension).	

## Caractères grecs

$\alpha$	: Diffusité thermique, la phase n'est pas précisée	$m^2 \cdot s^{-1}$ .
$\alpha_l, \alpha_s$	: Diffusité thermique des phases liquide et solide	$m^2 \cdot s^{-1}$ .
$\theta$	: Température (sans dimension).	
$\rho$	: Masse volumique, la phase n'est pas précisée	$kg \cdot m^{-3}$ .
$\rho_l, \rho_s$	: Masse volumique des phases liquide et solide	$kg \cdot m^{-3}$ .
$\sigma$	: Paramètre d'interpolation.	
$\sigma_{ij}$	: Composantes du tenseur cartésien des contraintes	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$ .
$\tau$	: Coordonnée de temps (sans dimension).	

# Introduction

Ce mémoire porte sur la résolution numérique de problèmes de changement de phase de type Stefan. Le seul mode de transfert de chaleur considéré est la conduction. Les propriétés physiques qui caractérisent le solide et le liquide, tels la chaleur spécifique et la conductivité, sont constantes pour une phase donnée.

Ce type de problèmes est caractérisé par la résolution de l'équation aux dérivées partielles

$$\frac{\partial H(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T(\mathbf{x}, t)) = 0,$$

où la fonction

$$H = \begin{cases} \rho c_{ps} T, & T \leq T_f \text{ (solide)} \\ \rho c_{ps} T_f + \rho c_{pl} (T - T_f) + \rho L, & T \geq T_f \text{ (liquide)} \end{cases}$$

présente une discontinuité à la température de fusion ( $T_f$ ). Cette discontinuité est causée par la chaleur latente ( $L$ ) qui doit être absorbée ou libérée lors de la solidification ou la fusion. De plus, la chaleur massique ( $c_p$ ) et la conductivité thermique ( $k$ ) peuvent être différentes d'une phase à l'autre.

Comme il n'existe des solutions analytiques à cette équation que pour quelques cas en 1D et 2D, divers schémas numériques sont utilisés pour résoudre cette équation. On regroupe souvent ces schémas numériques en deux catégories :

- les schémas numériques avec maillage fixe ;
- les schémas numériques avec maillage mobile ("front tracking methods").

En ce qui concerne les schémas avec maillage fixe, la position de l'interface ne correspond pas nécessairement à un noeud en 1D ou à un ensemble d'arêtes en 2D. Le problème majeur avec ces schémas est la présence d'oscillations dans la solution. De plus, ces schémas demandent souvent d'utiliser des algorithmes de correction de la solution afin de ne pas manquer l'absorption ou la libération de la chaleur latente. L'avantage majeur de ces méthodes est qu'elles sont facilement applicables à des problèmes de changement de phase complexes de type industriel.

Dans les schémas avec maillage mobile, la position de l'interface doit toujours correspondre à un noeud ou à des arêtes du maillage. L'utilisation de ces schémas

numériques permet habituellement d'éliminer les oscillations dans la solution et ainsi d'obtenir une plus grande précision. Ces schémas numériques sont habituellement plus complexes à mettre en oeuvre que ceux avec maillage fixe. De plus, ils sont mal adaptés aux problèmes où plus d'un front de solidification ou de fusion sont présents et à ceux où le changement de phase se produit sur un intervalle de température. En fait, ils sont difficilement applicables à des problèmes très complexes.

Le schéma numérique utilisé dans ce mémoire est une nouvelle méthode de volumes finis espace-temps appelée **méthode des volumes finis dirigés (MVFD)**. La forme de base du schéma numérique a été imaginée par Joyal[10, 11]. Le travail de ce mémoire consiste à mettre en oeuvre la méthode en 1D et 2D pour la résolution du problème considéré. Cette mise-en-oeuvre de la méthode est principalement caractérisée par :

- une librairie informatique qui permet des manipulations simples sur un maillage non-structuré triangulaire en 2D ;
- la conception d'algorithmes pour bien gérer certaines situations typiques aux problèmes de changement de phase ;
- la conception d'un algorithme de préconditionnement de systèmes d'équations non-linéaires ;
- la gestion du déplacement des noeuds du maillage pour des problèmes 2D.

L'idée principale de la MVFD est de considérer le maillage futur ainsi que la solution portée par ce maillage comme pouvant être inconnus. La MVFD permet donc le déplacement des noeuds du maillage. Le déplacement de l'interface séparant le solide et le liquide (interface diphasique) est modélisé avec un noeud mobile en 1D ou par un ensemble d'arêtes et de noeuds en 2D. Le déplacement d'un noeud du maillage doit satisfaire la loi de conservation de l'énergie pour un volume de contrôle matériel attaché à ce noeud.

Ce schéma numérique permet de gérer le déplacement de plus d'une interface diphasique. De plus, l'apparition et la disparition de l'interface sont naturellement modélisées sans avoir recours à des algorithmes de correction de la solution.

Le chapitre 1 porte sur la caractérisation mathématique et physique du problème résolu.

Le chapitre 2 présente un rappel des principaux schémas numériques utilisés pour la résolution de problèmes de changement de phase. Quelques solutions analytiques pour des problèmes en 1D et 2D sont discutées.

Les chapitres 3 et 6 présentent une description de la MVFD. On y définit, pour des problèmes 1D et 2D, les volumes de contrôle, les fonctions interpolantes et les fonctions de la base d'approximation. Les équations discrètes utilisées pour la résolution de problèmes 1D sont présentées dans le chapitre 3. En ce qui concerne les équations discrètes en 2D, seul leur développement est présenté dans le chapitre 6.

Les chapitres 4 et 7 portent sur la mise-en-œuvre en 1D et 2D de la MVFD. Il y est question de la gestion du déplacement des noeuds, de la rencontre de noeuds, de l'adaptation automatique du maillage, de la gestion d'une discontinuité au temps initial et de l'entrée dans le domaine de l'interface au cours d'une simulation.

Dans les chapitres 5 et 8 on présente des résultats numériques. On illustre la précision des solutions obtenues ainsi que de la possibilité de gérer diverses situations.

Le dernier chapitre porte sur la description de l'algorithme de résolution utilisé.

# Chapitre 1

## Caractérisation du problème

### 1.1 Introduction

La classe de problèmes de transfert de chaleur qui sera considérée est celle des problèmes de changement de phase, plus particulièrement les changements de phase liquide-solide (solidification) et solide-liquide (fusion). On ne considérera que les substances pures et on supposera également qu'il n'y a pas de rayonnement thermique, ni de génération d'énergie interne (effet joule), ni de convection.

Lors de la solidification ou la fusion, la substance est présente dans les phases liquide et solide et son comportement dans chacune des phases est différent. D'une phase à l'autre, il y a un changement abrupt des caractéristiques physiques de la substance. De plus, pour des problèmes plus généraux, les modes de transmission de la chaleur sont différents, la chaleur étant transmise non seulement par conduction, mais également, par convection dans la phase liquide. Pour bien étudier la transmission de la chaleur lorsqu'une substance est présente dans les phases liquide et solide, il est essentiel de bien connaître la position de la frontière séparant les deux phases, aussi appelée **interface diphasique**.

Lorsque la substance est pure, la température de fusion  $T_f$  est généralement connue et est égale à la température de solidification. Cette condition est exprimée par :

$$T_s(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)) = T_f = T_l(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)), \quad (1.1)$$

où  $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$  est un paramétrage espace-temps  $(x, y, z, t)$  de l'interface diphasique. Les fonctions  $T_s$  et  $T_l$  désignent la température du solide et du liquide respectivement. Cependant, pour certaines substances, telles les alliages et les roches, la fusion et la

solidification ne surviennent pas à une température donnée mais plutôt sur un intervalle  $[T_1, T_2]$ ; ces cas ne seront pas étudiés.

Dans un procédé de solidification ou de fusion, la température évolue dans chacune des phases et les interfaces diphasiques se déplacent. On parle ici de plusieurs interfaces diphasiques, car on peut imaginer qu'il y ait plusieurs fronts de solidification et/ou de fusion. Par la suite, *on ne fera référence qu'à la présence d'un seul front, bien que plusieurs fronts puissent être présents*. On ne peut pas suivre le déplacement de l'interface diphasique en ne considérant que l'évolution de la température pour certains points du domaine, la transmission de la chaleur étant dépendante du déplacement de l'interface et inversement.

## 1.2 Modèle mathématique

L'évolution de la température pour une phase donnée doit satisfaire la loi générale de conservation de l'énergie. En un temps donné, considérons un volume de contrôle matériel arbitraire  $v$  de bord  $\partial v$ . Dans un repère cartésien, la loi générale de conservation de l'énergie pour une seule phase à l'intérieur de  $v$  est exprimée par l'équation [6] <sup>1</sup>

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho \left( e + \frac{u^2}{2} \right) dv = - \int_{\partial v} q_i'' dA_i + \int_{\partial v} u_i \sigma_{ij} dA_j + \int_v q''' dv, \quad (1.2)$$

où :

- $\frac{d}{dt} \int_v \rho e dv$  est la variation d'énergie interne par unité de temps;  $e$  est **l'énergie interne par unité de masse** et  $\rho$  la **masse volumique**;
- $\frac{d}{dt} \int_v \rho \frac{u^2}{2} dv$  est la variation d'énergie cinétique par unité de temps;  $u$  est la norme du vecteur vitesse;
- $-\int_{\partial v} q_i'' dA_i$  est la quantité de chaleur traversant le bord de  $v$  par unité de surface, incluant la conduction et le rayonnement;
- $\int_{\partial v} u_i \sigma_{ij} dA_j$  est le travail fait par l'environnement sur le bord de  $v$ ;  $\sigma_{ij}$  est le tenseur cartésien des contraintes;

---

<sup>1</sup>On utilise ici la notation d'Einstein pour la sommation, l'expression  $u_i dA_i$  correspond à  $\Sigma_i u_i dA_i$ .

- $\int_v q''' dv$  représente la génération d'énergie interne.

*Il est important de remarquer que la valeur du flux est positive lorsque la chaleur passe de l'intérieur du volume de contrôle à l'extérieur de celui-ci.*

Nous émettons ensuite les hypothèses suivantes :

- il n'y a pas de génération d'énergie interne ;
- il n'y a pas de rayonnement thermique ;
- on néglige la convection et les tensions de surface ;
- il n'y a pas de variation d'énergie cinétique ;
- pour des fluides incompressibles,  $\rho e = c_p \rho T$ , où  $c_p$  est la **chaleur massique à pression constante**,  $T$  la température ;
- les propriétés  $c_p$  et  $\rho$  sont constantes ;
- la substance doit être homogène et la conduction isotropique ;
- la conduction thermique suit la loi de Fourier soit :  $q_i'' = -k \frac{\partial T}{\partial x_i}$ , où  $k$  est la **conductivité thermique**.

En appliquant le théorème de transport au terme

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho c_p T dv$$

on a :

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho c_p T dv = \int_v \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} dv + \int_{\partial v} \rho c_p T u_i dA_i = \int_v \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} dv \quad (u_i = 0).$$

En appliquant ensuite le théorème de divergence au terme

$$\int_{\partial v} -k \frac{\partial T}{\partial x_i} dA_i,$$

l'équation (1.2) peut alors être exprimée à l'aide d'une intégrale de volume seulement.

Pour une phase donnée, on obtient l'équation

$$\int_v \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) dv = 0. \quad (1.3)$$

Cette équation est valide en tout temps  $t$ , l'intégration en temps de celle-ci nous donne l'équation :

$$\int_{t_0}^{t_1} \left\{ \int_v \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) dv \right\} dt = 0. \quad (1.4)$$

En notant par  $V$  un **volume de contrôle espace-temps**, on a l'équation

$$\int_V \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) dV = 0. \quad (1.5)$$

Elle représente la conservation d'énergie pour un volume de contrôle matériel arbitraire espace-temps lorsque *le seul mode de transfert de chaleur considéré est la conduction*. Lorsque l'on voudra préciser la phase, l'indice  $l$  (liquide) ou  $s$  (solide) sera ajouté.

Pour les problèmes de fusion ou de solidification, on doit considérer la différence **d'énergie (ou chaleur) latente** entre les phases, cette différence étant notée par la lettre  $L$ . Dans ce cas, il est préférable d'écrire (1.5) en fonction de l'enthalpie qui sera notée avec la lettre  $H$ . La fonction d'enthalpie  $H$  est définie par :

$$H(T) = \int_{T_{ref}}^T c_p(T) \rho(T) dT, \quad (1.6)$$

où  $T_{ref}$  est une valeur de référence arbitraire. Pour des problèmes de solidification et de fusion,  $H$  est définie par :

$$H(T) = \begin{cases} \int_{T_{ref}}^T \rho_s(T) c_{ps}(T) dT & T \leq T_f \\ \int_{T_{ref}}^{T_f} \rho_s(T) c_{ps}(T) dT + \int_{T_f}^T \rho_l(T) c_{pl}(T) dT + \rho_l L & T \geq T_f. \end{cases} \quad (1.7)$$

Les paramètres  $c_{ps}$  et  $c_{pl}$  représentent la chaleur massique pour les phases liquide et solide,  $\rho_l$  et  $\rho_s$  désignent la masse volumique pour les phases liquide et solide. Lorsque  $c_{ps}$ ,  $c_{pl}$ ,  $\rho_l$  et  $\rho_s$  sont constants pour une phase donnée et que 0K est choisi comme température de référence, cette fonction peut être réduite à :

$$H(T) = \begin{cases} \rho_s c_{ps} T & T \leq T_f \\ \rho_l c_{pl}(T - T_f) + \rho_s c_{ps} T_f + \rho_l L & T \geq T_f. \end{cases} \quad (1.8)$$

La fonction  $H$  peut alors être représentée par une fonction du même type que celle de la figure 1.1 (page 8).

Lorsque l'on introduit la définition de l'enthalpie dans l'équation (1.5), elle se résume alors à :

$$\int_V \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) dV = 0, \quad (1.9)$$

la conductivité  $k$  n'étant pas nécessairement la même pour les deux phases.

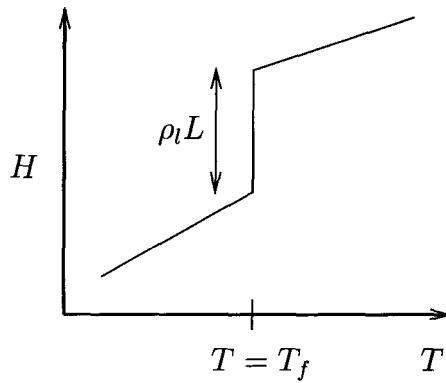


Figure 1.1: Graphique de l'enthalpie en fonction de la température

Il est important de préciser que lorsque la densité n'est pas la même dans les phases liquide et solide, il faut ajouter l'équation de continuité (conservation de la masse)

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho dv = 0 \quad (1.10)$$

à l'équation (1.9).

*Pour tous les problèmes abordés dans ce mémoire, la densité du liquide sera égale à la densité du solide et il ne sera donc pas nécessaire de considérer l'équation de continuité<sup>2</sup>.*

Comme le volume matériel espace-temps  $V$  est arbitraire, la quantité intégrée dans le membre de gauche de (1.9) doit être zéro, la conservation de l'énergie est alors exprimée par l'équation différentielle

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = 0. \quad (1.11)$$

---

<sup>2</sup>Ce mémoire porte principalement sur la résolution numérique de l'équation aux dérivées partielles considérée et non pas sur la modélisation physique des problèmes de changement de phase. L'auteur de ce mémoire est conscient qu'une approche réaliste du problème physique doit tenir compte du changement de densité d'une phase à l'autre.

À l'interface cette équation différentielle ne peut être utilisée, car la fonction  $H$  est discontinue. Lorsque la densité du liquide égale la densité du solide, l'équation différentielle

$$k_l \frac{\partial T_l(\mathbf{X})}{\partial n} - k_s \frac{\partial T_s(\mathbf{X})}{\partial n} = -\rho L v_n \quad (\rho = \rho_s = \rho_l) \quad (1.12)$$

établit le bilan énergétique à l'interface. Cette équation est souvent appelée **condition de Stefan**<sup>3</sup> et est démontrée ci-après. La dérivée  $\frac{\partial}{\partial n}$  est prise dans la direction normale à l'interface et  $v_n$  la vitesse normale de cette interface en un temps donné au point  $P$ .

### Démonstration de la condition de Stefan

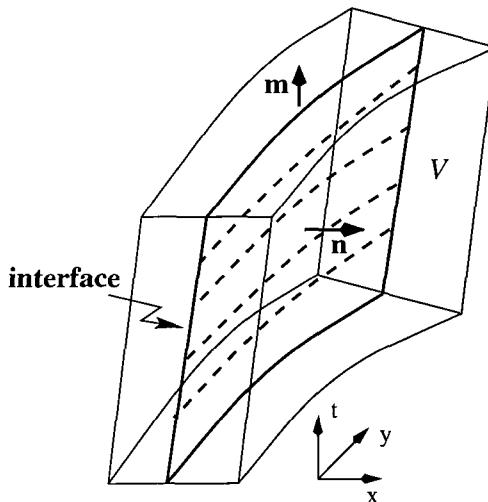


Figure 1.2: Volume de contrôle matériel à l'interface

Considérons la figure 1.2. Dans un sous-domaine de  $\mathbb{R}^2$ , l'interface peut être représentée en tout temps  $t$  par un paramétrage de la forme

$$\mathbf{x}(s, t) = (x(s, t), y(s, t)).$$

Le déplacement de cette interface du temps  $t_0$  au temps  $t_1$  engendre la surface espace-temps

$$\mathbf{X}(s, t) = (x(s, t), y(s, t), t), \quad t_0 \leq t \leq t_1.$$

---

<sup>3</sup>Dans ce mémoire, on utilise une méthode enthalpique basée sur l'équation intégrale (1.9) page 7. On n'a donc pas à imposer la condition de Stefan à l'interface.

Un vecteur normal  $\mathbf{M}$  à cette surface peut alors être obtenu en calculant le produit vectoriel

$$\mathbf{M} = \frac{d\mathbf{X}}{ds} \times \frac{d\mathbf{X}}{dt} = \left( \frac{\partial y}{\partial s}, -\frac{\partial x}{\partial s}, \frac{\partial x}{\partial s} \frac{\partial y}{\partial t} - \frac{\partial y}{\partial s} \frac{\partial x}{\partial t} \right),$$

$\mathbf{M}$  pointe vers le solide. En un temps donné, un vecteur normal (non-unitaire) à l'interface est donc donné par l'expression

$$\mathbf{m} = \left( \frac{\partial y}{\partial s}, -\frac{\partial x}{\partial s} \right).$$

De plus, la troisième composante du vecteur  $\mathbf{M}$  est égale à

$$-\mathbf{m} \cdot \mathbf{v} = - \left( \frac{\partial y}{\partial s}, \frac{dx}{ds} \right) \cdot \left( \frac{\partial x}{\partial t}, \frac{\partial y}{\partial t} \right).$$

Pour obtenir l'équation de Stefan, on n'a qu'à transformer l'intégrale de volume espace-temps

$$\int_V \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -k \frac{\partial T}{\partial y} \right) dV$$

en une intégrale de surface. Par le théorème de la divergence l'équation

$$\int_V \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial t} \right) \cdot \left( -k \frac{\partial T}{\partial x}, -k \frac{\partial T}{\partial y}, H \right) dV = 0$$

peut être exprimée par l'équation

$$\int_{\partial V} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x}, -k \frac{\partial T}{\partial y}, H \right) \cdot \mathbf{M} ds dt = 0.$$

Lorsque l'on fait tendre le volume d'intégration vers zéro, la surface d'intégration tend alors vers la surface décrivant l'interface. Ainsi, on obtient l'intégrale suivante :

$$\int_S (k_l \nabla T - k_s \nabla T, -\rho L) \cdot \mathbf{M} ds dt = 0,$$

où  $S$  est l'interface en espace-temps.

Cette intégrale étant valide en tout point de l'espace, l'intégrand doit alors nécessairement être nul. On a donc l'équation différentielle suivante :

$$k_l \nabla T \cdot \mathbf{m} - k_s \nabla T \cdot \mathbf{m} = -\rho L (\mathbf{m} \cdot \mathbf{v}).$$

En divisant cette dernière équation par la norme du vecteur  $\mathbf{m}$  on obtient la condition de Stefan

$$k_l \frac{\partial T_l(\mathbf{X})}{\partial n} - k_s \frac{\partial T_s(\mathbf{X})}{\partial n} = -\rho L v_n \quad (\rho = \rho_s = \rho_l), \quad (1.13)$$

où  $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{m}}{|\mathbf{m}|}$  est le vecteur normal unitaire.

### 1.3 Variables adimensionnées

En 3D, dans le système de coordonnées cartésiennes  $(x, y, z)$ , les équations (1.11) et (1.12) des pages 8 et 9 sont données par

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( -k \frac{\partial T}{\partial z} \right) = 0 \quad (1.14)$$

et

$$k_l \frac{\partial T_l}{\partial n} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial n} = -\rho L v_n. \quad (1.15)$$

Effectuons le changement de variable suivant :

$$\begin{aligned} \theta(\tilde{\mathbf{x}}, \tau) &= \frac{T(\mathbf{x}, t) - T_f}{T_f - T_{ref}} \\ \tilde{x} &= \frac{x}{b_{ref}}; \quad \tilde{y} = \frac{y}{b_{ref}}; \quad \tilde{z} = \frac{z}{b_{ref}}; \\ \tilde{\mathbf{X}}(\tau) &= \frac{1}{b_{ref}} \mathbf{X}(t); \quad \tau = \frac{(k_s / \rho_s c_{ps}) t}{b_{ref}^2}; \\ Ste &= \frac{c_{ps}(T_f - T_{ref})}{L}; \\ \tilde{H} &= \frac{(H / \rho_s c_{ps}) - T_f}{T_f - T_{ref}}. \end{aligned}$$

- La constante  $b_{ref}$  est une longueur caractéristique qui est souvent le diamètre du domaine de calcul.
- $T_{ref}$  est une température de référence. Pour un problème de solidification (ou de fusion) sur un demi-espace en 1D, cette température est la même que celle imposée sur la frontière gauche.
- La variable adimensionnée  $\tau$  est le **nombre de Fourier** (notée également  $F_o$ ), qui caractérise le rapport entre le taux de transfert de chaleur par conduction et l'emmagasinage d'énergie thermique dans le solide.

Les équations (1.11) et (1.12) (pages 8 et 9) s'écrivent alors :

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tau} - \frac{k}{k_s} \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tilde{y}^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tilde{z}^2} \right) = 0 \quad (1.16)$$

et

$$\frac{k_l}{k_s} \frac{\partial \theta_l}{\partial n} - \frac{\partial \theta_s}{\partial n} = -\frac{1}{Ste} \tilde{v}_n, \quad (1.17)$$

$$\tilde{H} = \begin{cases} \theta, & \theta \leq 0 \\ \frac{\rho_l c_{pl}}{\rho_s c_{ps}} \theta + \frac{\rho_l}{\rho_s} \frac{1}{Ste}, & \theta \geq 0. \end{cases}$$

$\frac{\partial}{\partial n}$  et  $\tilde{v}_n$  sont respectivement la dérivée à l'interface le long du vecteur normal  $\mathbf{n}$  et la vitesse de l'interface dans la direction de  $\mathbf{n}$ .

Le nombre sans dimension  $Ste$  introduit ici est appelé **nombre de Stefan**. Il est associé au processus du changement de phase. Pour les problèmes de solidification, il représente l'importance de la **chaleur sensible** ( $c_{ps}(T_f - T_{ref})$ ) du solide comparativement à la chaleur latente ( $L$ ). Pour des procédés de solidification impliquant des métaux, tels l'aluminium ou le cuivre, le nombre de Stefan est de l'ordre de l'unité et varie entre 1 et 3 ([17]). Pour un problème de solidification, les propriétés  $\rho$ ,  $c_p$  et  $k$  ont été exprimées en fonction des propriétés physiques du solide. Pour un problème de fusion, on exprime généralement ces propriétés en fonction de celles caractérisant le liquide. Le nombre de Fourier est alors donné par  $\tau = \frac{(\kappa_l / \rho_l c_{pl}) t}{b_{ref}^2}$  et le nombre de Stefan par  $Ste = \frac{c_{pl}(T_{ref} - T_f)}{L}$ .

# Chapitre 2

## Méthodes de résolution du problème

Dans ce chapitre, on discute des principaux schémas numériques qui sont utilisés pour la résolution de problèmes de changement de phase. De plus, on présente des solutions analytiques pour des problèmes 1D et 2D.

### 2.1 Méthodes numériques

Comme il n'existe des solutions analytiques à l'équation (1.9) (page 7) que pour quelques cas en 1D et 2D, divers schémas numériques ont été utilisés pour résoudre cette équation. On peut regrouper ces schémas numériques en deux catégories principales [21, 15, 12] :

- les schémas numériques avec maillage fixe ;
- les schémas numériques avec maillage mobile ("front tracking methods").

En ce qui concerne les schémas avec maillage fixe, la position de l'interface ne correspond pas nécessairement à un noeud en 1D ou à un ensemble d'arêtes en 2D. Dans ces schémas, on tient compte de la chaleur latente

- en définissant une variable d'enthalpie totale  $H$  (enthalpie volumique [ $J \cdot m^{-3}$ ]) ou une variable d'enthalpie  $h$  (enthalpie massique) [ $J \cdot kg^{-1}$ ]) pour ensuite déterminer la température à partir de celle-ci,
- ou bien en remplaçant le coefficient de chaleur massique constant par un coefficient de chaleur massique qui est fonction de la température (méthode de capacité thermique) et qui prend une valeur très élevée à la frontière liquide/solide,

- ou bien en introduisant un terme source.

Une description exhaustive de ces schémas numériques est faite par Voller[24]. Le désavantage majeur de ces schémas est la limitation de la précision lorsque l'interface est présente sous la forme d'une discontinuité [3, 23]. Ces schémas numériques peuvent cependant être facilement utilisés lorsque le changement de phase se produit sur un intervalle de température (**région pâteuse**) plutôt qu'à une température donnée. Les schémas avec maillage fixe ont été utilisés efficacement pour des problèmes 1D, 2D et 3D incluant la convection, la gestion de régions pâteuses et l'évolution de micro-structures.

Dans les schémas avec maillage mobile, la position de l'interface doit toujours correspondre à un noeud ou à des arêtes du maillage. Pour obtenir ce résultat, on utilise :

1. des coordonnées curvilignes,
2. l'adaptation du maillage (le remaillage à chacun des pas de temps),
3. ou le déplacement automatique du maillage.

Lacroix et Garon[14] ont utilisé un changement de coordonnées qui immobilise la position de l'interface dans l'espace des nouvelles variables. Ils ont pu ainsi résoudre des problèmes de changement de phase où la convection est le mode dominant de transfert de chaleur.

Pour des problèmes de solidification, Ghosh et Moorthy[12] ont utilisé un maillage fixe dans le liquide et un maillage se déplaçant dans une direction imposée dans le solide. Afin d'éviter de remailler lors de l'introduction de nouveaux noeuds dans le domaine du solide, ils ont utilisé un pseudo-domaine comme banque de noeuds. Ces noeuds pénètrent au besoin dans le domaine du solide sans avoir à changer la connectivité. Dans cet article, les auteurs se sont limités à des problèmes où la température initiale du liquide est la température de solidification (**problèmes à une phase**). Ils n'ont donc pas eu à discréteriser la phase liquide.

Yoo et Rubinsky[25] ont utilisé une méthode de remaillage automatique à la fin de chacun des pas de temps. Pour chacun des pas de temps, la position de tous les noeuds est fixe. Lorsque le champ de température est connu sur tout le domaine, la

position des noeuds de l'interface est calculée pour satisfaire la **condition de Stefan** (équation (1.12) page 9). Tout le domaine est ensuite remaillé en fonction du déplacement de l'interface.

Lynch, O'Neill et Albert[1, 2, 16] ont beaucoup contribué à l'analyse par éléments finis déformables des problèmes de frontière libre. Dans l'article de Lynch et O'Neill[16], qui traite de problèmes de changement de phase en 1D, les auteurs ont introduit un maillage pouvant se déformer au cours d'un pas de temps en fonction du déplacement de l'interface. Le déplacement de celle-ci est traité comme une variable inconnue. Dans deux articles portant sur des problèmes 2D, Albert et O'Neill[1, 2] ont utilisé une technique de génération de coordonnées curvilignes appelée "transfinite mapping". Cette technique permet de modifier le maillage en fonction des frontières des sous-domaines discrétilisés, un sous-domaine par phase. Le problème de changement de phase est alors traité comme un problème de frontière libre délimitant les sous-domaines solide et liquide. En ce qui concerne le déplacement des noeuds formant l'interface, la variable qui détermine ce déplacement est la vitesse des noeuds dans des directions imposées.

Bonnerot et Jamet[4] ont probablement été les premiers à utiliser une méthode d'éléments finis permettant le déplacement des noeuds d'un maillage espace-temps (2D en espace). Ils considèrent l'interface comme une ligne polygonale dont les segments correspondent aux arêtes de leur maillage. À chacun des pas de temps, les noeuds se déplacent en fonction d'une vitesse locale et dans des directions imposées. Leur formulation espace-temps permet le déplacement de tous les noeuds du maillage à chacun des pas de temps. En ce qui concerne les problèmes résolus dans cet article, les seuls noeuds mobiles sont ceux de l'interface. Les autres noeuds peuvent être déplacés après la résolution du système d'équations en fonction du déplacement de l'interface, ou bien on peut effectuer un remaillage complet périodique à l'extérieur de l'interface. Dans cet article, ils ont abordé des problèmes à une phase et n'ont pas résolu de problèmes où la température est inconnue dans les phases liquide et solide (**problèmes à deux phases**).

Les schémas numériques avec maillage mobile jusqu'à maintenant développés sont habituellement plus complexes à mettre-en-œuvre que ceux avec maillage fixe.

De plus, ils sont mal adaptés aux problèmes où plus d'un front de solidification ou de fusion sont présents et à ceux où le changement de phase se produit sur un intervalle de température.

Les avantages et désavantages des schémas numériques qui utilisent une approche avec maillage fixe ou maillage mobile sont discutés dans l'article de Ghosh et Moorthy[12]. Une description de plusieurs de ces schémas numériques est effectuée par Crank[7].

**Il paraît essentiel de développer un schéma numérique qui permet d'obtenir la précision des schémas avec maillage mobile et la flexibilité des schémas avec maillage fixe.** Le schéma numérique utilisé dans ce mémoire est une méthode de volumes finis espace-temps appelée **méthode des volumes finis dirigés (MVFD)**. La forme de base du schéma numérique a été imaginée par Joyal et al. et elle est détaillée dans [9, 10, 11]. L'originalité de la MVFD vient de la liberté de déplacement que l'on donne aux noeuds du maillage. Comme d'autres méthodes qui ont été citées [2, 4], la position des noeuds n'est pas déterminée avant ou après la résolution des équations qui décrivent le phénomène étudié, mais simultanément. En plus de permettre le déplacement des noeuds, le schéma permet également :

- la rencontre de noeuds avec d'autres noeuds (ou des arêtes du maillage en 2D) ;
- l'éclatement d'un noeud en plusieurs noeuds afin de raffiner automatiquement le maillage ;
- la coexistence de plus d'un noeud en une même position, mais ne portant pas tous la même valeur nodale.

Dans sa formulation mathématique, la méthode permet donc une liberté de déplacement des noeuds du maillage. La méthode a été appliquée à la résolution d'équations d'advection-diffusion de type polynomial (telle l'équation de Burger) en 1D[9, 10, 11].

Dans le cadre de ce mémoire, la MVFD est mise en oeuvre pour des problèmes de changement de phase en 1D et 2D. En 2D, on impose certaines restrictions pour le déplacement des noeuds. Les noeuds ne peuvent se déplacer que suivant certaines directions imposées à l'avance. La mise-en-oeuvre en 1D et 2D permet la gestion de

plus d'une interface pour des problèmes à deux phases, ce qui, à la connaissance de l'auteur de ce mémoire, est nouveau pour les schémas numériques avec maillage mobile.

De plus, la formulation de la MVFD permet de l'appliquer à la résolution de problèmes de changement de phase où la convection est présente ainsi qu'à des problèmes où le changement de phase a lieu sur un intervalle de température.

## 2.2 Solutions analytiques en 1D

### 2.2.1 Condition de type Dirichlet

L'existence de solutions analytiques se limite à quelques problèmes simples. Les solutions analytiques pour des problèmes de fusion et de solidification sur un demi-espace de longueur infinie sont ici présentées. Ces solutions vont servir à valider des résultats numériques obtenus avec la méthode mise en oeuvre dans le cadre de ce mémoire.

#### Solidification (ou fusion) sur un demi-espace, condition de type Dirichlet

Considérons un demi-espace de longueur infinie. La température initiale  $T_i$  sur tout le demi-espace est constante et est différente ou égale de la température de fusion  $T_f$  (**problèmes à une phase ou deux phases**). La substance est présente sous forme liquide (ou solide). La température à la frontière gauche est soudainement abaissée (élevée) à une température  $T_w < T_f$  ( $T > T_f$ ) et il y a solidification (fusion) à partir de la position  $x = 0$ . La formulation mathématique pour un problème de solidification est la suivante :

$$\frac{\partial^2 T_s(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial t}, \quad 0 < x < X(t); \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial^2 T_l(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t}, \quad x > X(t); \quad (2.2)$$

$$T(0, t) = T_w, \quad x = 0, \quad t > 0;$$

$$T(x, 0) = T_i, \quad x \geq 0, \quad t = 0;$$

$$T(X(t), t) = T_f, \quad x = X(t), \quad t > 0;$$

$$k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = -\rho L \frac{dX(t)}{dt}, \quad x = X(t), \quad (2.3)$$

où  $\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$  est la **diffusivité thermique**. Le développement de la solution à ce problème est détaillé dans [17]. Les profils de température sont donnés par

$$T_s(x, t) = T_w + A \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2(\alpha_s t)^{1/2}} \right) \quad (2.4)$$

qui donne la température du solide et

$$T_l(x, t) = T_i + B \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2(\alpha_l t)^{1/2}} \right) \quad (2.5)$$

qui donne la température du liquide. Les constantes  $A$  et  $B$  sont déterminées par les équations<sup>1</sup>

$$A = \frac{T_f - T_w}{\operatorname{erf}(\lambda/2\alpha_s)} \quad \text{et} \quad B = \frac{T_f - T_i}{\operatorname{erfc}(\lambda/2\alpha_l)}.$$

La position de l'interface est donnée par

$$X(t) = \lambda t^{1/2}. \quad (2.6)$$

Le paramètre  $\lambda$  apparaissant dans les trois dernières équations est une racine de l'équation

$$\frac{(T_w - T_f) k_s e^{-\lambda^2/4\alpha_s}}{(\alpha_s)^{1/2} \operatorname{erf}(\lambda/2\alpha_s^{1/2})} + \frac{(T_i - T_f) k_l e^{-\lambda^2/4\alpha_l}}{(\alpha_l)^{1/2} \operatorname{erfc}(\lambda/2\alpha_l^{1/2})} + \frac{\rho L \lambda \sqrt{\pi}}{2} = 0, \quad (2.7)$$

pour un problème de solidification, ou de l'équation

$$\frac{(T_w - T_f) k_l e^{-\lambda^2/4\alpha_l}}{(\alpha_l)^{1/2} \operatorname{erf}(\lambda/2\alpha_l^{1/2})} + \frac{(T_i - T_f) k_s e^{-\lambda^2/4\alpha_s}}{(\alpha_s)^{1/2} \operatorname{erfc}(\lambda/2\alpha_s^{1/2})} - \frac{\rho L \lambda \sqrt{\pi}}{2} = 0 \quad (2.8)$$

pour un problème de fusion. Ces deux dernières équations peuvent être résolues numériquement avec une méthode de Newton.

### 2.2.2 Condition de type Neumann

Dans la section précédente, on a présenté la solution analytique pour un problème de fusion ou de solidification présentant une condition au bord de type Dirichlet. Il existe une solution analytique sous la forme de série de puissances pour un problème du même type ayant une condition au bord de type Neumann. Le développement de cette solution est détaillé dans [8].

---

<sup>1</sup>Les fonctions erf et erfc sont définies par  $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$  et  $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$ .

### Solidification (ou fusion) sur un demi-espace, condition de type Neumann.

Considérons un demi-espace de longueur infinie. Initialement la température sur tout le demi-espace est constante et est égale à  $T_f$ . Il s'agit d'un problème à une phase et la température du liquide (solide) reste égale à la température de fusion. On impose alors une condition de flux sur la frontière gauche du domaine et il y a solidification (ou fusion) à partir de la position  $x = 0$ . La formulation mathématique pour un problème de solidification ou de fusion<sup>2</sup> est la suivante :

$$\frac{\partial^2 T_s(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial t}, \quad 0 < x < X(t); \quad (2.9)$$

$$T_l(x, t) = T_f, \quad x > X(t);$$

$$T(x, 0) = T_f, \quad x \in \mathbb{R}^+, \quad t = 0;$$

$$-k_s \frac{\partial T_s(0, t)}{\partial x} = q_w'' \quad (q_w'' \text{ est une constante});$$

$$T(X(t), t) = T_f, \quad x = X(t), \quad t > 0; \quad (2.10)$$

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = \rho L \frac{dX(t)}{dt}, \quad x = X(t). \quad (2.11)$$

Pour ce problème, le profil de température du solide (liquide) est donné par

$$T_s(x, t) \approx T_f + \frac{-q_w'' x - (q_w'')^2 (x^2 + 2\alpha_s t)}{2k_s \alpha_s L \rho_l} + \frac{(q_w'')^4 (x^4 + 12\alpha_s^2 t + 12\alpha_s^2 t^2)}{12k_s \alpha_s^3 L^3 \rho_l^3} + \dots \quad (2.12)$$

et la position de l'interface est donnée par

$$X(t) \approx \frac{|q_w''| t}{L \rho} - \frac{|q_w''|^3 t^2}{2\alpha_s L^3 \rho^3} + \frac{5|q_w''|^5 t^3}{6\alpha_s^2 L^5 \rho^5} - \frac{51|q_w''|^7 t^4}{24\alpha_s^3 L^7 \rho^7} + \frac{827|q_w''|^9 t^5}{120\alpha_s^4 L^9 \rho^9} + \dots \quad (2.13)$$

### 2.3 Solution approximative en 2D, condition de Dirichlet

Considérons le sous-espace de  $\mathbb{R}^2$ ,  $\Omega = \{(x, y) \mid x, y \in \mathbb{R}^+\}$ . Ce sous-espace est un coin de grandeur infini. La température du sous-espace est initialement à une température constante  $T_i \geq T_f$ . Au temps  $t > 0$ , la température des parois  $x = 0, y = 0$  est abaissée à une température  $T_w < T_f$  et le changement de phase débute à partir de ces parois. Le problème est illustré sur la figure 2.1 de la page 20.

<sup>2</sup>Pour un problème de fusion, on doit utiliser les propriétés qui caractérisent le liquide.

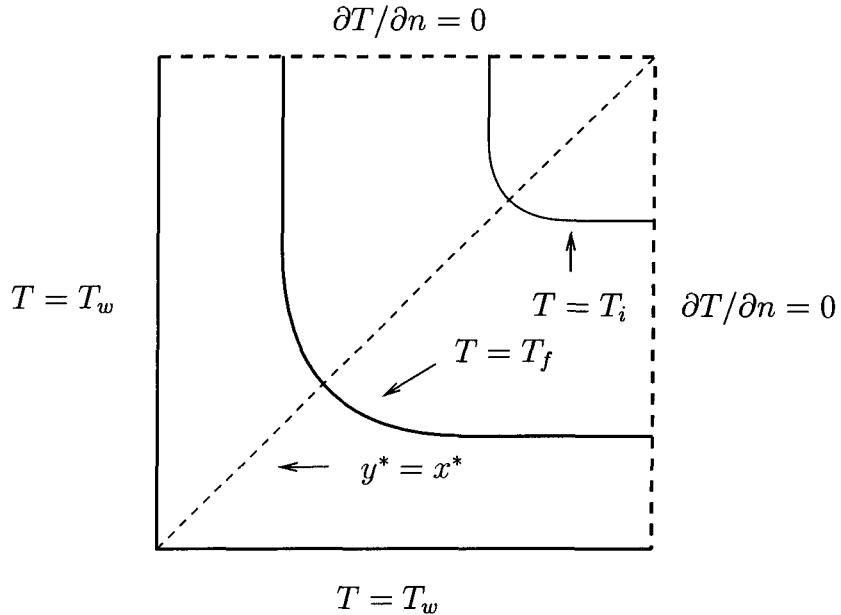


Figure 2.1: Solidification sur un coin infini

Pour ce problème, des solutions analytiques approximatives sont présentées dans [19] pour des problèmes à une phase, et pour des problèmes à deux phases dans [20, 5].

Le développement de la solution est ici omis, il est présenté en détail dans [20]. La solution approximative assume que la forme de l'interface est donnée par la fonction

$$f(x^*) = \left[ \lambda^m + \frac{C}{x^{*m} - \lambda^m} \right]^{1/m}, \quad (2.14)$$

où  $x^* = \frac{x}{\sqrt{4\alpha t}}$  est la coordonnée en  $x$  sous forme adimensionnée. Les paramètres  $m$  et  $C$  sont déterminés en imposant les conditions :

$$f(x_0^*) = x_0^*, \quad \text{et} \quad f(x_1^*) = (x_0^* + \lambda)/2.$$

Le paramètre  $\lambda$  est déterminé en résolvant l'équation (2.7) de la page 18. Les nombres sans dimensions  $x_0^*$  et  $x_1^*$  sont trouvés en résolvant un système d'équations intégralo-différentielles.

# Chapitre 3

## Présentation du schéma numérique en 1D

Ce chapitre porte sur la description en 1D d'un nouveau schéma numérique de résolution d'équations aux dérivées partielles, **la méthode des volumes finis dirigés (MVFD)**. Cette description est grandement inspirée du mémoire de maîtrise de Frigon[9] où le schéma numérique est présenté en détail pour le traitement de discontinuités en 1D. La méthode est ici présentée pour le problème particulier de la résolution de l'équation de la chaleur pour des problèmes de changement de phase.

### 3.1 Cadre général

Pour une seule dimension d'espace, l'équation (1.9) page 7 se résume à

$$\int_V \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dV = 0, \quad (3.1)$$

où  $V$  est un volume de contrôle en espace-temps.

On veut résoudre l'équation (3.1). La solution est cherchée sur un intervalle de temps  $I = [0, t_{fin}]$  et un domaine  $D = [x_0, x_1]$  de l'espace. On cherche une fonction

$$T : (x, t) \in D \times I \mapsto T(x, t)$$

qui est solution de (3.1) et satisfait la condition initiale

$$T(x, 0) = T^0(x),$$

où  $T^0 : D \rightarrow \mathbb{R}$ . On suppose la solution connue au temps initial. Le problème comporte des conditions au bord de type **Dirichlet**

$$T|_{w_0} = T^0_{w_0}, \quad T|_{w_1} = T^0_{w_1},$$

ou/et de type **Neumann**

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{w_0} = q_{w_0} \text{''}, \quad -k \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{w_1} = q_{w_1} \text{''},$$

où  $\frac{\partial}{\partial n}$  est la dérivée dans la direction normale à la frontière,  $w_0$  et  $w_1$  sont les frontières gauche et droite de  $D$ ,  $q_{w_0} \text{''}$  et  $q_{w_1} \text{''}$  sont les conditions de flux imposées aux frontières de  $D$ . Les conditions sur les deux frontières du domaine ne sont pas nécessairement du même type.

L'équation (3.1) est équivalente à

$$\int_V \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial t} \right) \cdot \left( -k \frac{\partial T}{\partial x}, H \right) dV = \int_V \operatorname{Div} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x}, H \right) dV = 0, \quad (3.2)$$

où  $\operatorname{Div}()$  est l'opérateur espace-temps de la divergence. Par le théorème de la divergence, on a

$$\int_{\partial V} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x}, H \right) \cdot \mathbf{n} dl = 0, \quad (3.3)$$

où  $\mathbf{n}$  est le vecteur normal unitaire extérieur à la frontière  $\partial V$ ,  $dl$  l'élément de longueur sur  $\partial V$ . La conservation de l'énergie pour un volume de contrôle arbitraire peut alors être calculée à partir d'une intégrale curviligne sur la frontière du volume. Soulignons-le, les volumes de contrôle considérés sont des volumes espace-temps.

### 3.2 Volumes de contrôle espace-temps en 1D

Considérons le domaine espace-temps

$$\{(x, t) \mid x_0 \leq x \leq x_1, t_0 \leq t \leq t_1\},$$

où  $t_0$  n'est pas nécessairement le temps initial, mais le temps courant de résolution. La solution étant connue sur  $[x_0, x_1]$  au temps  $t_0$ , on cherche la solution pour le temps  $t_1$ . On peut procéder à une discrétisation spatiale au temps  $t_0$ . À chaque noeud au temps  $t_0$  correspond un noeud au temps  $t_1$  qui n'est pas nécessairement à la même position. On a alors des bandes espace-temps que l'on appellera **prismes** ou (**trapèzes** dans le cas 1D). On appellera **volume de contrôle** une partie d'un prisme ou la réunion de parties de plusieurs prismes. Il n'est pas nécessaire qu'un volume de contrôle s'étende sur toute une bande temporelle  $t_0 \leq t \leq t_1$ .

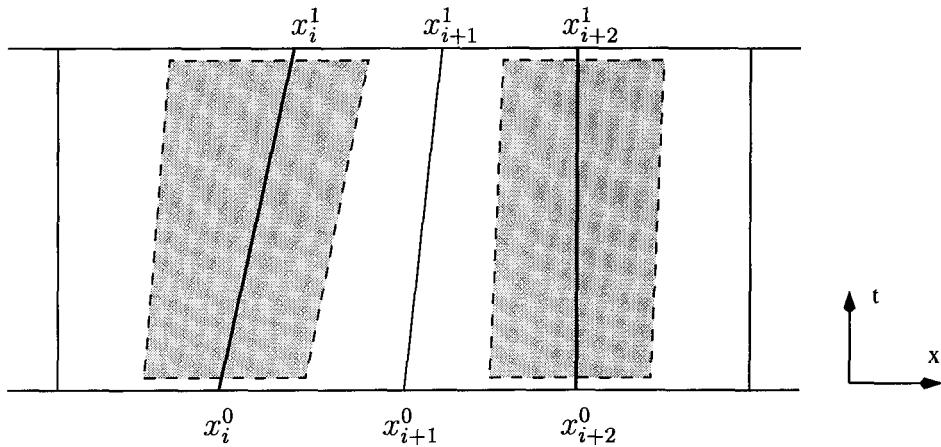


Figure 3.1: Discréétisation possible du domaine avec volumes de contrôle en 1D

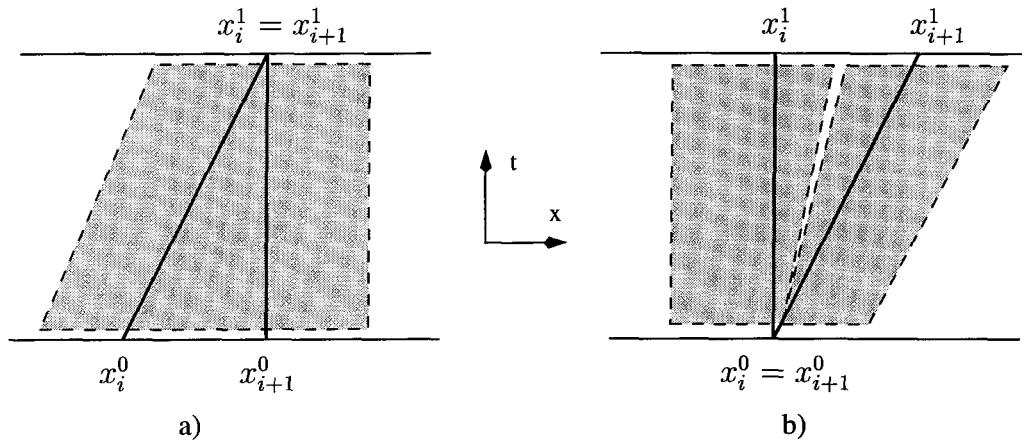


Figure 3.2: Maillage pour une rencontre et un éclatement

La figure 3.1 présente une discréétisation possible du domaine<sup>1</sup>, la position d'un noeud  $i$  est donnée par  $x_i^t$ , où le sous-indice  $i$  désigne le rang du noeud, et le sur-indice  $t$  le temps. Les noeuds sont numérotés de gauche à droite de 0 à  $n - 1$ . Les prismes sont délimités par des lignes pleines et les volumes de contrôle par des lignes pointillées. Comme certains noeuds sont mobiles, il peut y avoir des rencontres entre des noeuds (figure 3.2a). On peut aussi imaginer qu'un noeud puisse être "éclaté" en plusieurs noeuds (figure 3.2b). Lors de rencontres ou d'éclatements, les prismes sont dégénérés en triangles. La figure 3.2 représente des prismes et des volumes de contrôle dans de tels cas.

<sup>1</sup>Dans les figures qui suivent, les volumes de contrôle sont représentés par des parties ombragées.

### 3.3 Discrétisation du problème en 1D

Considérons une bande espace-temps  $\{(x, t) \mid x \in [a, b], t \in [t_0, t_1]\}$ . On voudrait décrire la position d'un point de cette bande à l'aide de coordonnées adaptées à la solution du problème. Posons  $\mathbf{r} = (x(x_0, t), t)$ . Pour chaque point  $x_0$  fixe, on obtient une courbe  $\mathbf{r}(t)$  qui est orientée vers le temps positif, à savoir

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot (0, 1) = \left(\frac{dx}{dt}, 1\right) \cdot (0, 1) = 1 \neq 0.$$

On admettra, à la limite, que plus d'une courbe puissent avoir la même origine ou le même point d'arrivée. On considéra deux types de courbes :

1. des courbes fixes  $(x_0, t) = x_0$  ;
2. des courbes de niveau de la solution approximée  $\tilde{T}$ .

Le domaine de résolution sera discrétisé en  $m$  bandes espace-temps. Sur chacune de ces bandes espace-temps, on cherchera à trouver une fonction  $\tilde{T}(x, t)$  ainsi qu'un ensemble fini de courbes afin qu'elle soit décrite de la meilleure façon possible.

À chaque courbe à l'intérieur d'une bande correspond un seul noeud, et possiblement plusieurs aux extrémités. On appellera **trajectoire** la courbe associée à un noeud. La position d'un noeud arbitraire au temps  $t_j$  est notée  $x(x_i, t_j) = x_i^j$ , sa valeur nodale  $T(x_i, t_j) = T_i^j$ . Les voisins de gauche et de droite comportent les indices  $i - 1$  et  $i + 1$  respectivement. Pour un temps donné, les noeuds sont indiqués de 0 à  $n - 1$ . Pour un temps subséquent, bien que la position de certains noeuds puisse changer, il y a correspondance des indices.

En un noeud, on pourra donc avoir deux types d'inconnues :

1. la température au noeud dans le cas d'un noeud fixe (la trajectoire est connue),
2. la position du noeud dans le cas où le noeud est sur une isotherme dont on veut suivre le déplacement (la trajectoire est inconnue).

Comme les positions et les valeurs nodales peuvent être inconnues, on doit donc avoir des fonctions d'approximation pour les deux.

Puisque certains noeuds sont mobiles, on pourra avoir des rencontres entre les noeuds. S'il y a une rencontre de noeuds, il y aura deux noeuds à la même position

au temps  $t_{j+1}$ . Bien qu'il y aura deux noeuds à la même position, il n'y a qu'une valeur limite de la solution cherchée pour une position. *Il ne pourra donc pas y avoir de discontinuité de la température au temps  $t_{j+1}$  ( $t > 0$ ).*

Afin de pouvoir adapter le maillage à la solution au temps  $t_{j+1}$ , on pourra éclater (figure 3.2b, page 23) un noeud en plusieurs noeuds. Cela correspond à démarrer plusieurs trajectoires d'une même position. S'il y a éclatement d'un noeud, on aura plusieurs noeuds à la même position au temps  $t_j$ . *Lors d'un éclatement, seul au temps initial ( $t = 0$ ) on admettra plus d'une valeur nodale pour une position nodale.* À  $t > 0$ , il n'y aura qu'une valeur nodale pour une position nodale.

Dans ce travail, pour chaque noeud au temps  $t > 0$ , il ne peut y avoir qu'une seule valeur inconnue, bien que la MVFD permette plus d'une inconnue par noeud.

### 3.3.1 Fonctions interpolantes en 1D

Pour chaque position le long d'une trajectoire, il existe une et une seule valeur de la fonction  $T$ . Pour un ensemble de trajectoires fixées, la fonction  $T$  peut être approximée par

$$\tilde{T}(x, t) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n(j)-1} c_i^j \phi_i^j(x_i^j), \quad (3.4)$$

où  $\{\sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n(j)-1} c_i^j \phi_i^j(x_i^j) \mid c_i^j \in \mathbb{R}\}$  est l'**espace des fonctions interpolantes**. Les  $c_i^j$  sont les coefficients et les  $\phi_i^j$  les **fonctions d'une base d'approximation** (elles seront définies dans la section suivante). Sauf dans le cas où il y a une discontinuité au temps initial, la fonction  $\tilde{T}$  est continue partout.

Le changement de coordonnées  $x = x(x_0, t)$  peut être approximé par une fonction de la même forme :

$$\tilde{x}(x_0, t) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n(j)-1} d_i^j \phi_i^j(x_i^j). \quad (3.5)$$

La fonction  $\tilde{x}$  est continue partout.

Pour un ensemble de positions fixées, les fonctions de la base de l'espace d'approximation sont connues. Lorsque certaines trajectoires sont inconnues, certaines fonctions de la base sont alors dépendantes de la solution, elles sont donc inconnues. Afin que la base d'approximation soit connue, on associera une équation discrète à chacune des trajectoires inconnues. On aura donc autant d'équations que d'inconnues. La base

d'approximation sera fixée lors de la résolution du système d'équations discrètes. Ce système d'équations comprendra les équations discrètes pour :

- les températures nodales inconnues ;
- les valeurs nodales inconnues.

Lorsque la solution est continue, l'espace des fonctions interpolantes pour les inconnues  $T_i^t$  est le même que celui utilisé par Jamet et Bonnerot[4], quoique ces auteurs ne permettent pas la rencontre de noeuds et l'éclatement d'un noeud.

Chacune des bandes espace-temps est composée de prismes espace-temps. Sur chacun des prismes espace-temps,  $\tilde{T}$  et  $\tilde{x}$  sont des fonctions bilinéaires. Elles sont linéaires par morceau en espace et linéaires le long d'une trajectoire (segment). Lorsque le prisme est dégénéré, on a un triangle et  $\tilde{T}$  et  $\tilde{x}$  sont linéaires. Pour un trapèze ayant les sommets  $x_i^0$ ,  $x_{i+1}^0$ ,  $x_i^1$ ,  $x_{i+1}^1$ , les fonctions interpolantes pour la température et les trajectoires sont données par les paramétrages suivants :

$$\tilde{T}(\sigma, \tau) = (1 - \tau)[(1 - \sigma)T_i^0 + \sigma T_{i+1}^0] + \tau[(1 - \sigma)T_i^1 + \sigma T_{i+1}^1], \quad (3.6)$$

$$\tilde{x}(\sigma, \tau) = (1 - \tau)[(1 - \sigma)x_i^0 + \sigma x_{i+1}^0] + \tau[(1 - \sigma)x_i^1 + \sigma x_{i+1}^1], \quad (3.7)$$

$$0 \leq \sigma, \tau \leq 1,$$

où on fait le changement de variable suivant sur le temps :

$$t(\tau) = (1 - \tau)t_0 + \tau t_1.$$

### 3.3.2 Fonctions de la base de l'espace d'interpolation en 1D

Dans la section précédente, les fonctions d'approximation pour la température et les trajectoires ont été définies comme étant :

$$\tilde{T}(x, t) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n(j)-1} c_i^j \phi_i^j(x_i^j) \quad \text{et} \quad \tilde{x}(x_0, t) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n(j)-1} d_i^j \phi_i^j(x_i^j),$$

où les  $\phi_i^j$  sont les fonctions de la base de l'espace d'approximation.

Afin de correctement décrire l'espace des fonctions interpolantes, les fonctions de la base ont les caractéristiques suivantes :

- une seule fonction de la base  $\phi_i^t$  est attachée à chacun des noeuds ;
- si plusieurs noeuds sont à la même position, on aura autant de fonctions de base qu'il y a de valeurs nodales à cette position ;
- une fonction  $\phi_i^t$  est bilinéaire au-dessus de tous les trapèzes et est linéaire au-dessus des triangles : linéaire le long d'une arête espace, et linéaire le long d'une trajectoire ;
- dans le cas d'une fonction continue, la fonction  $\phi_i^j$  n'est non nulle que sur les prismes voisins à  $x_i^j$  ;
- lorsque la température présente une discontinuité au temps initial, la fonction  $\phi_i^0$  n'est non nulle que sur certains des prismes voisins à  $x_i^0$  (ces prismes seront précisés plus-tard) ;
- sur les noeuds des prismes où la fonction  $\phi_i^j$  est non nulle, elle peut prendre les valeurs suivantes :

$$\phi_i^t(x_k^t) = \begin{cases} 1, & k = i \text{ et } t = j \\ 0, & \text{autrement.} \end{cases}$$

### Fonctions de la base lorsque la fonction est continue

Lorsque la solution est continue, trois cas sont possibles. Ces cas sont illustrés sur les figures 3.3, 3.4 et 3.5 de la page suivante.

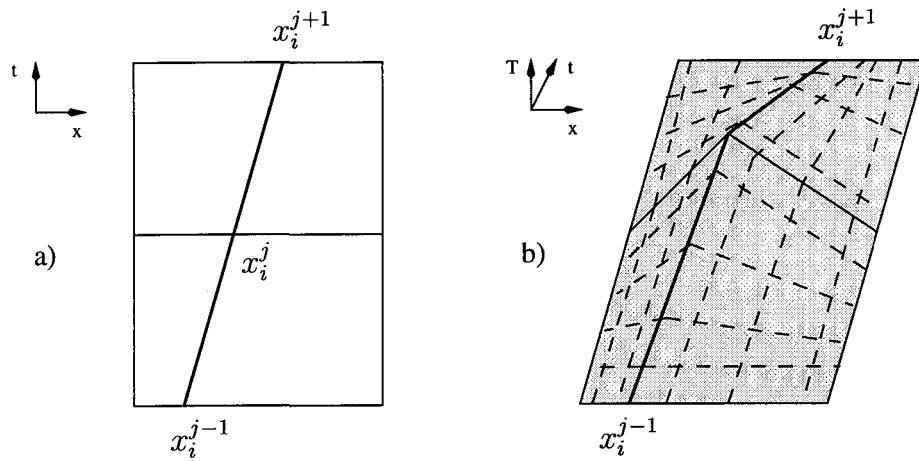


Figure 3.3: Fonction de la base à un noeud intérieur

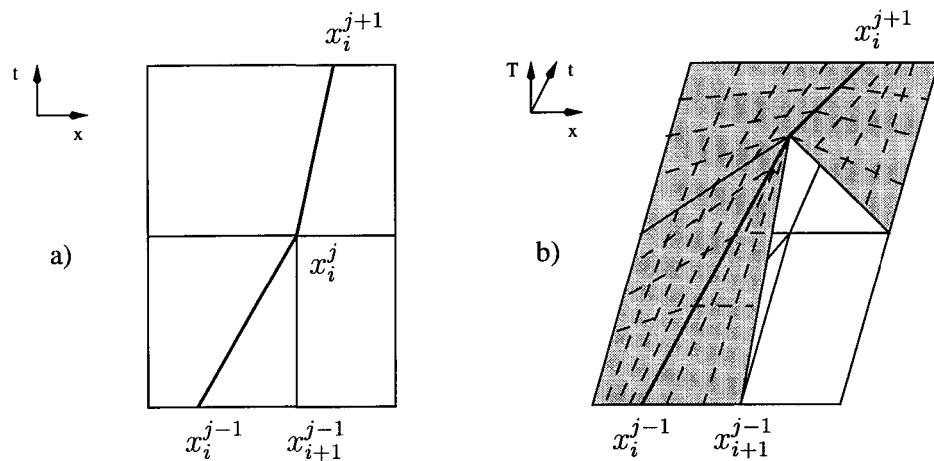


Figure 3.4: Fonction de la base lors d'une rencontre

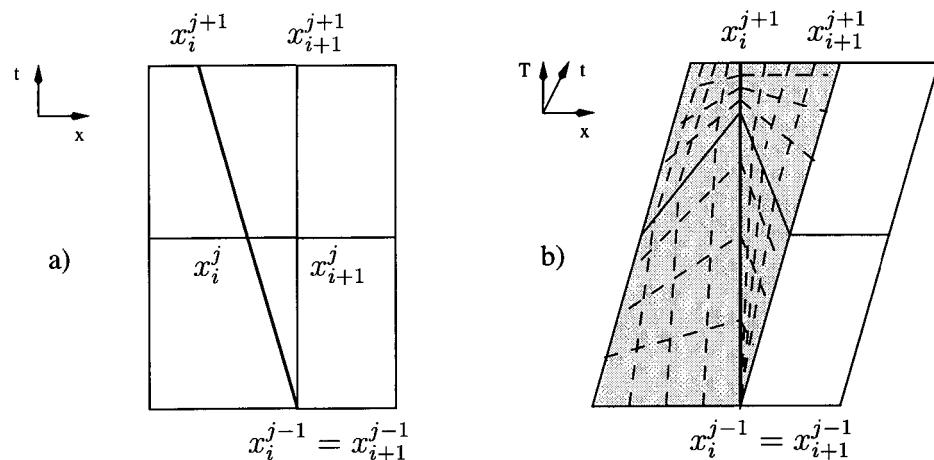


Figure 3.5: Fonction de la base lors d'un éclatement en deux noeuds

### Fonctions de la base lorsque la solution n'est pas continue

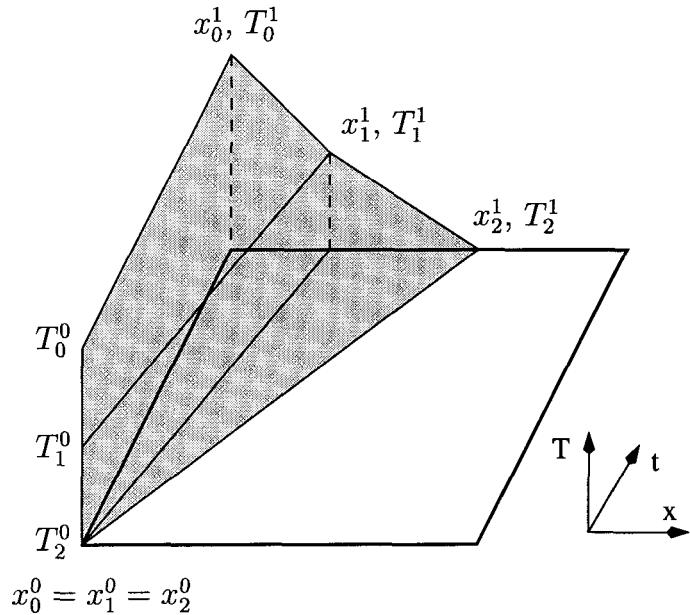


Figure 3.6: Disparition d'une discontinuité en 1D au temps  $t = 0$

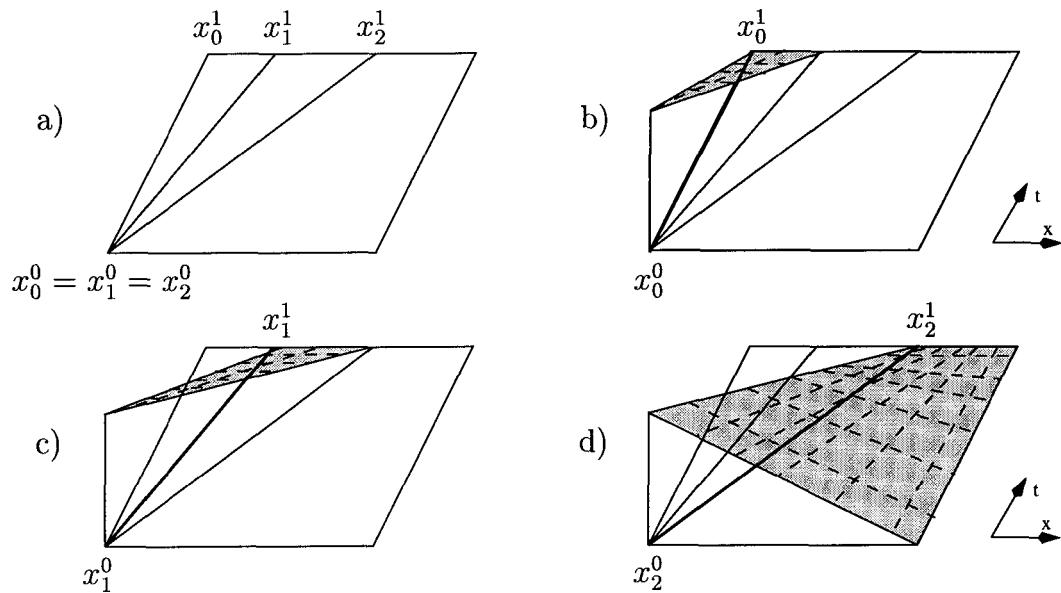


Figure 3.7: Fonctions de la base pour la disparition d'une discontinuité en 1D

Il y a seulement au temps initial et sur le bord du domaine que la fonction  $T$  peut être discontinue. Mais pour tout temps  $t > 0$ , la fonction  $T$  est continue. La

29) illustre l'évolution de la température lors de la disparition d'une discontinuité au premier pas de temps. Les figures 3.7b, 3.7c et 3.7d illustrent les fonctions  $\phi_0^0$ ,  $\phi_1^0$  et  $\phi_2^0$  pour le cas où trois valeurs nodales doivent être décrites pour une seule position nodale. La figure 3.7a montre l'évolution du maillage.

## 3.4 Équations discrètes

### 3.4.1 Noeud intérieur

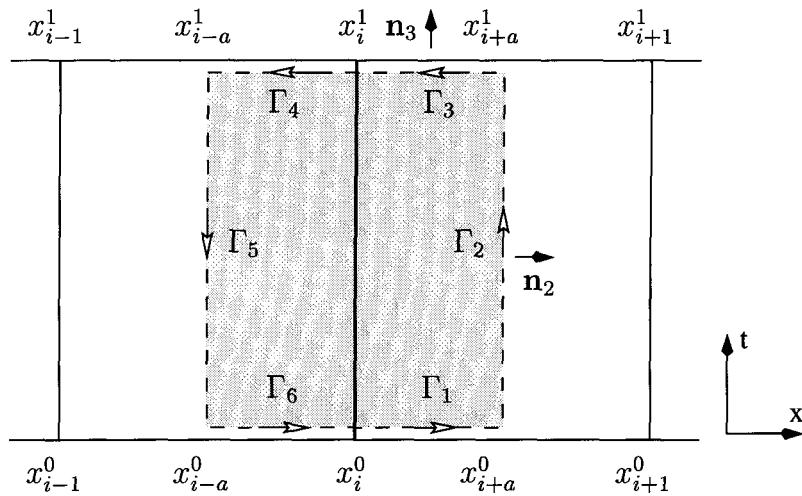


Figure 3.8: Volume de contrôle et sa frontière en 1D

Considérons le volume de contrôle  $V$  présenté sur la figure 3.8. Les points  $x_{i+a}^t$  et  $x_{i-a}^t$  sont définis par

$$x_{i+a}^t = (1-a)x_i^t + ax_{i+1}^t, \quad x_{i-a}^t = (1-a)x_i^t + ax_{i-1}^t,$$

où  $a$  est la proportion

$$a = \frac{x_{i+a}^t - x_i^t}{x_{i+1}^t - x_i^t} = \frac{x_i^t - x_{i-a}^t}{x_i^t - x_{i-1}^t}.$$

Pour simplifier les équations, on emploiera la notation

$$\begin{aligned}\Delta x_{i+1}^t &= x_{i+1}^t - x_i^t, & \Delta x_i^t &= x_i^t - x_{i-1}^t, \\ \Delta T_{i+1}^t &= T_{i+1}^t - T_i^t, & \Delta T_i^t &= T_i^t - T_{i-1}^t, \\ \Delta_i w_0^1 &= \Delta w_i^1 - \Delta w_i^0, & \Delta_{i+1} w_0^1 &= \Delta w_{i+1}^1 - \Delta w_{i+1}^0,\end{aligned}$$

où  $w$  désigne  $T$  ou  $x$  au besoin. Pour déterminer les propriétés sur un élément, on utilise la température au barycentre de l'élément. Cette température sera notée  $\bar{T} = \tilde{T}(1/2, 1/2)$ . On notera par  $Q_i$  et  $H_i$  les termes de l'intégration de

$$\int_{\partial V} \left( -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x}, \tilde{H} \right) \cdot \mathbf{n} \, dl$$

sur les segments de la figure 3.8.  $\tilde{T}$  et  $\tilde{H}$  sont les fonctions approximées de  $T$  et  $H$ . La fonction d'approximation  $\tilde{H}$  est définie comme suit :

$$\tilde{H}(r, \tau) = \begin{cases} \rho_s c_{ps} \tilde{T} & \bar{T} \leq T_f \\ \rho_l c_{pl} (\tilde{T} - T_f) + \rho_s c_{ps} T_f + \rho_l L & \bar{T} \geq T_f \end{cases}$$

Les  $Q_i$  représenteront l'intégrale des flux et les  $H_i$  les intégrales du terme d'enthalpie.

Les différents termes d'intégration sont donnés par :

- terme de flux<sup>2</sup>  $-k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x}$  :

$$\Gamma_1 : Q_1 = 0; \quad \Gamma_3 : Q_3 = 0;$$

$$\begin{aligned}\Gamma_2 : Q_2 &= \left\{ (\Delta T_{i+1}^0 \Delta x_{i+1}^1 - \Delta T_{i+1}^1 \Delta x_{i+1}^0) \cdot \ln \left( \frac{\Delta x_{i+1}^1}{\Delta x_{i+1}^0} \right) + \Delta_{i+1} T_0^1 \cdot \Delta_{i+1} x_0^1 \right\} \\ &\quad \cdot \frac{-k \, dt}{(\Delta_{i+1} x_0^1)^2};\end{aligned}$$

$$k = \begin{cases} k_s, & \bar{T} < T_f \\ k_l, & \bar{T} > T_f \end{cases};$$

$$\Gamma_4 : Q_4 = 0; \quad \Gamma_6 : Q_6 = 0;$$

<sup>2</sup>Seuls les termes généraux sont ici présentés. Lorsqu'il y a rencontre, éclatement ou que les noeuds se déplacent parallèlement, on doit utiliser des formules limites.

$$\Gamma_5 : Q_5 = (\Delta T_i^0 \Delta x_i^1 - \Delta T_i^1 \Delta x_i^0) \cdot \left\{ \ln \left( \frac{\Delta x_i^1}{\Delta x_i^0} \right) + \Delta_i T_0^1 \cdot \Delta_i x_0^1 \right\} \\ \cdot \frac{k dt}{(\Delta_i x_0^1)^2},$$

$$k = \begin{cases} k_s, & \bar{T} < T_f \\ k_l, & \bar{T} > T_f \end{cases};$$

- terme d'enthalpie  $\tilde{H}$ ,  $\bar{T} < T_f$  :

$$\Gamma_1 : Hs_1 = -\frac{1}{2} \rho_s c_s \Delta x_{i+1}^0 \left\{ (2a - a^2) T_i^0 + a^2 T_{i+1}^0 \right\};$$

$$\Gamma_2 : Hs_2 = \left\{ a(\Delta x_{i+1}^0 - \Delta x_{i+1}^1) + x_i^0 - x_i^1 \right\} \\ \cdot \frac{\rho_s c_s}{2} \left[ a(\Delta T_{i+1}^1 + \Delta T_{i+1}^0) + T_i^1 + T_i^0 \right];$$

$$\Gamma_3 : Hs_3 = \frac{1}{2} \rho_s c_s \Delta x_{i+1}^1 \left\{ (2a - a^2) T_i^1 + a^2 T_{i+1}^1 \right\};$$

$$\Gamma_4 : Hs_4 = \frac{1}{2} \rho_s c_s \Delta x_i^1 \left\{ (2a - a^2) T_i^1 + a^2 T_{i-1}^1 \right\};$$

$$\Gamma_5 : Hs_5 = \left\{ a(\Delta x_i^0 - \Delta x_i^1) + x_i^1 - x_i^0 \right\} \\ \cdot \frac{\rho_s c_s}{2} \left[ a(-\Delta T_i^0 - \Delta T_i^1) + T_i^1 + T_i^0 \right];$$

$$\Gamma_6 : Hs_6 = -\frac{1}{2} \rho_s c_s \Delta x_i^0 \left\{ (2a - a^2) T_i^0 + a^2 T_{i-1}^0 \right\};$$

- terme d'enthalpie  $\tilde{H}$ ,  $\bar{T} > Tf$  :

$$\Gamma_1 : Hl_1 = -\frac{1}{2}\rho_l c_l \Delta x_{i+1}^0 \left\{ (2a - a^2)T_i^0 + a^2 T_{i+1}^0 \right\} - a \Delta x_{i+1}^0 \rho_l L ;$$

$$\begin{aligned} \Gamma_2 : Hl_2 &= \left\{ a(\Delta x_{i+1}^0 - \Delta x_{i+1}^1) + x_i^0 - x_i^1 \right\} \\ &\quad \cdot \left\{ \frac{\rho_l c_l}{2} \left[ a(\Delta T_{i+1}^1 - \Delta T_{i+1}^0) + T_i^1 + T_i^0 \right] + \rho_l L \right\} ; \end{aligned}$$

$$\Gamma_3 : Hl_3 = \frac{1}{2}\rho_l c_l \Delta x_{i+1}^1 \left\{ (2a - a^2)T_i^1 + a^2 T_{i+1}^1 \right\} + a \Delta x_{i+1}^1 \rho_l L ;$$

$$\Gamma_4 : Hl_4 = \frac{1}{2}\rho_l c_l \Delta x_i^1 \left\{ (2a - a^2)T_i^1 + a^2 T_{i-1}^1 \right\} + a \Delta x_{i-1}^1 \rho_l L ;$$

$$\begin{aligned} \Gamma_5 : Hl_5 &= \left\{ a(\Delta x_i^0 - \Delta x_i^1) + x_i^1 - x_i^0 \right\} \\ &\quad \cdot \left\{ \frac{\rho_l c_l}{2} \left[ a(-\Delta T_i^0 - \Delta T_i^1) + T_i^1 + T_i^0 \right] + \rho_l L \right\} ; \end{aligned}$$

$$\Gamma_6 : Hl_6 = -\frac{1}{2}\rho_l c_l \Delta x_i^0 \left\{ (2a - a^2)T_i^0 + a^2 T_{i-1}^0 \right\} - a \Delta x_{i-1}^0 \rho_l L .$$

Une équation discrète pour un noeud  $x_i^t$  est donnée par :

$$\text{phase solide: } \sum_{i=1}^6 Q_i + Hs_i = 0 , \quad (3.8)$$

$$\text{phase liquide: } \sum_{i=1}^6 Q_i + Hl_i = 0 . \quad (3.9)$$

Pour un noeud  $x_i^t$  de l'interface il y a deux possibilités :

$$\sum_{i=1}^3 Q_i + Hs_i + \sum_{i=4}^6 Q_i + Hl_i = 0 , \quad (3.10)$$

ou bien

$$\sum_{i=1}^3 Q_i + Hl_i + \sum_{i=4}^6 Q_i + Hs_i = 0 , \quad (3.11)$$

dépendant de l'emplacement relative des phases.

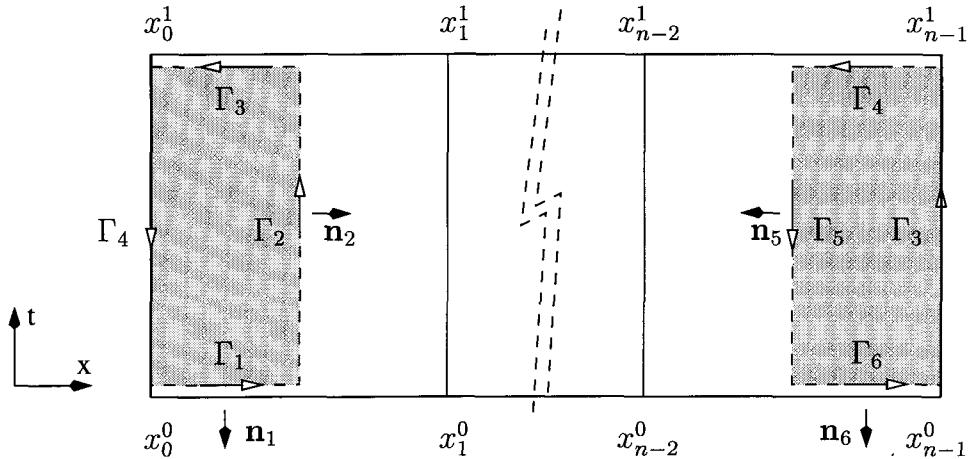


Figure 3.9: Volumes de contrôle pour les noeuds au bord

### 3.4.2 Noeud sur une frontière

Lorsqu'une condition de type Neumann est présente sur une frontière, la valeur nodale au noeud sur cette frontière est inconnue. Le volume de contrôle pour le noeud d'une frontière est différent de celui d'un noeud à l'intérieur du domaine. Les volumes de contrôle, tant pour la frontière gauche que pour la frontière droite, ainsi que les segments d'intégration sont illustrés sur la figure 3.9.

#### Frontière gauche

Les intégrales sur les segments  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_2$  et  $\Gamma_3$  des termes d'enthalpie et de dérivée sont les mêmes que pour un noeud intérieur. Pour le segment  $\Gamma_4$ , la seule composante à intégrer est le terme de flux  $q_{w_0}$ . Pour ce segment l'intégrale est donnée par :

$$\Gamma_4 : Q_4^* = dt q_{w_0}.$$

L'équation discrète pour un noeud sur la frontière gauche est donnée par

$$\text{phase solide: } \sum_{j=1}^3 Q_j + Hs_j + Q_4^* = 0, \quad (3.12)$$

$$\text{phase liquide: } \sum_{j=1}^3 Q_j + Hl_j + Q_4^* = 0. \quad (3.13)$$

### Frontière droite

Pour un noeud sur la frontière droite, l'équation discrète est donnée par :

$$\text{phase solide : } \sum_{j=4}^6 Q_j + Hs_j + Q_2^* = 0, \quad (3.14)$$

$$\text{phase liquide : } \sum_{j=4}^6 Q_j + Hl_j + Q_2^* = 0, \quad (3.15)$$

$$Q_2^* = dt q_{w_1}''.$$

## Chapitre 4

# Mise en oeuvre du schéma numérique en 1D

### 4.1 Introduction

Pour connaître avec la plus grande précision possible la position d'une interface diphasique, celle-ci est toujours représentée par un noeud. On appellera **noeud de fusion** un noeud de la discréétisation marquant la séparation entre le liquide et le solide, indépendamment du type de changement de phase, liquide-solide (solidification) ou solide-liquide (fusion).

La MVFD permet le déplacement des noeuds. Afin de modéliser le déplacement de l'interface, les noeuds de fusion sont mobiles. Au besoin, d'autres noeuds pourront être mobiles. Le déplacement des noeuds ainsi qu'une condition au bord de type Dirichlet ou Neumann demandent le traitement des situations suivantes :

- le déplacement des noeuds ;
- la rencontre de noeuds ;
- la sortie du domaine d'un noeud de fusion ;
- l'entrée dans le domaine d'un noeud de fusion.

### 4.2 Déplacement des noeuds

Pour un noeud mobile au temps  $t_0$ , la valeur cherchée au temps  $t_1$  est sa position. La température d'un noeud mobile est constante. Dans le cas d'un noeud de fusion, elle est égale à la température de fusion. Le déplacement d'un noeud doit satisfaire l'équation de conservation de l'énergie pour un volume de contrôle associé à ce noeud.

L'équation discrète pour la position future du noeud mobile est donnée par :

- (3.10) ou (3.11) (page 33), dépendant de l'emplacement relatif des phases pour un noeud de fusion ;
- (3.8) ou (3.9) (page 33) pour un noeud sur une isotherme.

## 4.3 Rencontre de noeuds

### 4.3.1 Rencontre à l'intérieur du domaine

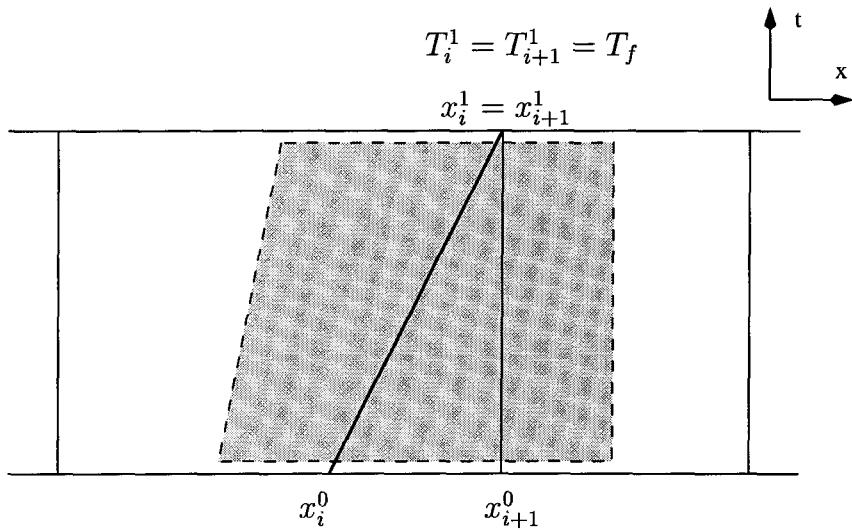


Figure 4.1: Volume d'intégration pour une rencontre en 1D

Avant chacune des résolutions, on approxime le temps nécessaire pour qu'un noeud mobile rencontre ses voisins, si le temps nécessaire est plus petit que le **pas de temps cible**<sup>1</sup>, il y a rencontre.

Considérons la figure 4.1, on prévoit que le noeud de sous-indice  $i$  rencontrera au temps  $t_1$  le noeud  $i+1$ . La position des deux noeuds au temps  $t_1$  est alors connue et est égale à la position du noeud  $i+1$  au temps  $t_0$ . La valeur nodale au temps  $t_1$  pour les deux noeuds est la même et est égale à  $T_i^0$ . L'inconnue est le temps nécessaire pour qu'il y ait rencontre. L'équation discrète correspondante est la somme des équations discrètes pour les noeuds  $x_i^1$  et  $x_{i+1}^1$ . Après la résolution, le noeud  $x_{i+1}^1$  est enlevé.

<sup>1</sup>Le pas de temps cible est le pas de temps par défaut pour chacune des résolutions. Le pas de temps pour une résolution peut être inconnu et peut être différent du pas de temps cible.

### 4.3.2 Rencontre sur le bord du domaine

La gestion de la sortie du domaine de résolution d'un noeud de fusion est identique à la gestion de la rencontre de deux noeuds. Après la résolution cependant, c'est le noeud mobile qui est enlevé, et non pas le noeud sur la frontière du domaine.

## 4.4 Entrée dans le domaine de l'interface

### 4.4.1 Condition au bord de type Neumann

Lorsque la condition au bord est de type Neumann, il est possible qu'un changement de phase débute à partir de la frontière du domaine. Il se déroule alors en deux étapes :

1. la température du noeud sur la frontière devient égale à la température de fusion ;
2. le noeud sur la frontière est éclaté en deux noeuds, la position du noeud entrant est inconnue et la température du noeud sur la frontière commence à subir des changements.

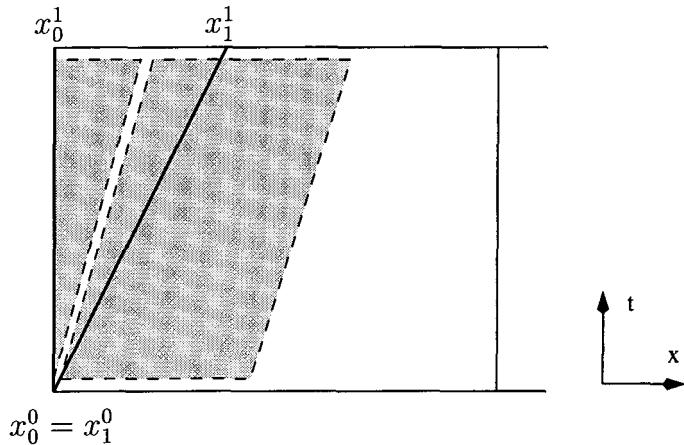


Figure 4.2: Volumes d'intégration pour l'entrée de l'interface en 1D

Le noeud de fusion et le noeud sur la frontière ont chacun une inconnue. On a donc besoin de deux équations discrètes. Les volumes d'intégration correspondant à ces équations sont illustrés sur la figure 4.2. L'évolution de l'enthalpie est représentée sur la figure 4.3 de la page 39.

Il est important de remarquer que ce traitement permet de représenter adéquatement l'évolution de l'enthalpie, contrairement à toutes les autres méthodes. Dans le

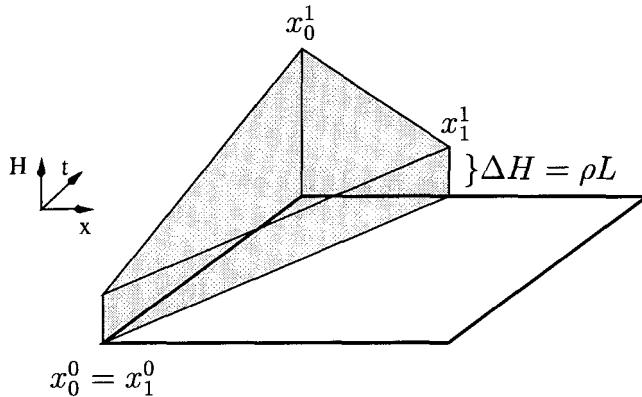


Figure 4.3: Évolution de l'enthalpie lors de l'entrée de l'interface

cas des méthodes avec maillage fixe, on ne fait pas (et ne on peut pas) apparaître la discontinuité. Dans le cas des autres méthodes avec maillage mobile, aucune ne permet l'éclatement de noeuds.

#### 4.4.2 Condition au bord de type Dirichlet

Il est possible que la température au temps initial soit discontinue sur le bord du domaine. Pour le problème particulier d'une discontinuité sur la frontière gauche, la condition initiale ainsi que la condition au bord sont données par :

$$\begin{aligned} T(0, 0) &= T_i, & x = 0, \quad t = 0; \\ T(0, t) &= T_w, & x = 0, \quad t > 0; \\ T(x, 0) &= T_i, & x \in \mathbb{R}^+, \quad t = 0, \end{aligned}$$

où  $T_i$  est la température initiale,  $T_w$  la température imposée sur la frontière.

Pour ce type de condition au bord, la fonction  $T(x, t)$  présente une discontinuité et sa dérivée n'est pas définie au temps initial. Pour la grande majorité des méthodes, lorsqu'une telle condition au bord est présente, on place un noeud très près de la frontière et on élimine ainsi la discontinuité. Cette façon de procéder comporte plusieurs désavantages telle la modification arbitraire de la condition initiale.

Afin de pallier à cet inconvénient, on procède à une intégration partielle en temps au premier pas de temps. Considérons la figure 4.5 (page 41), elle présente un exemple de l'intégration d'une portion de la bande espace-temps. Dans le cadre

habituel, on procède à l'intégration suivante en temps :

$$\int_{\tau=0}^1 \left( -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x}, \tilde{H} \right) \cdot \mathbf{n} d\tau.$$

Lorsqu'il y a une discontinuité au temps initial, la borne inférieure d'intégration est modifiée, car les équations discrètes ne sont pas définies en  $\tau = 0$ . L'intégrale par rapport au temps a alors la forme suivante :

$$\int_{\tau=p}^1 \left( -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x}, \tilde{H} \right) \cdot \mathbf{n} d\tau, \quad (0 < p < 1).$$

De plus, au lieu d'intégrer le terme d'enthalpie au temps  $t_0$  ( $\tau = 0$ ), on intègre au temps  $t_p = (1 - p)t_0 + pt_1$  ( $\tau = p$ )<sup>2</sup>.

Afin de modéliser le changement de phase à partir du premier pas de temps, on ajoute un noeud de fusion sur la frontière. Puisqu'on a plusieurs noeuds à la même position au temps initial, on procède à un éclatement de ces noeuds. On a deux possibilités :

1. pour un problème à une phase, on a deux noeuds sur le bord au temps initial ;
2. pour un problème à deux phases, on a trois noeuds sur le bord au temps initial.

Lors de l'éclatement de ces noeuds, leurs températures sont connues et leurs positions inconnues. Les figures 4.4 et 4.5 de la page 41 illustrent l'éclatement ainsi que les volumes de contrôle pour un problème à deux phases.

Au deuxième pas de temps, on ajoute d'autres noeuds pour mieux épouser la courbure du graphe de la fonction. Pour un certain nombre de pas de temps subséquents, la position de ces noeuds est inconnue et leur température connue.

Cet algorithme permet de contourner la difficulté liée à la discontinuité et *les calculs montrent que les solutions obtenues ne comportent aucune oscillation*.

---

<sup>2</sup>Après des essais numériques, une valeur  $p = 0.2$  a été choisie.

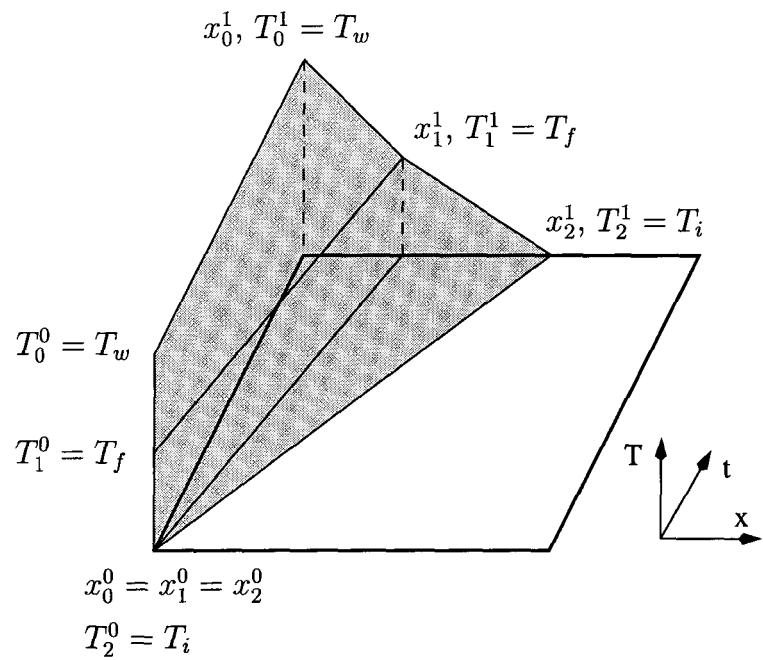


Figure 4.4: Éclatement lors du traitement d'une discontinuité en 1D

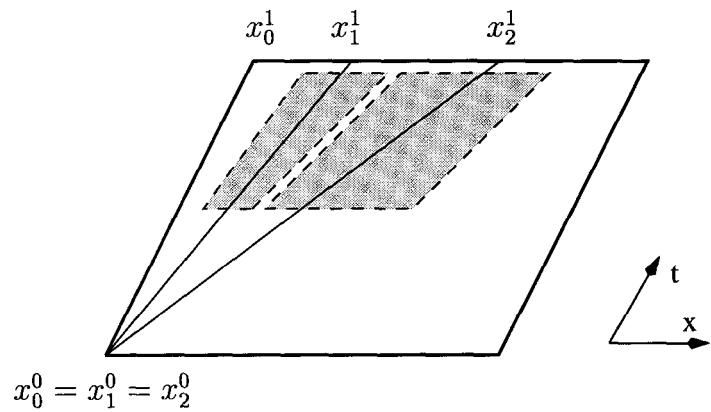


Figure 4.5: Volumes de contrôle lors du traitement d'une discontinuité en 1D

# Chapitre 5

## Résultats numériques en 1D

Ce chapitre présente divers résultats obtenus lors de la résolution numérique de l'équation de la chaleur pour des problèmes diphasiques liquide-solide en 1D.

### 5.1 Condition au bord de type Dirichlet

Dans cette section, deux résultats numériques sont comparés avec des résultats obtenus à partir de la solution analytique de la section 2.2.1 page 17. Les problèmes sont donc du même type que celui présenté dans la section 2.2.1. Il s'agit d'une demi-droite de longueur infinie qui est initialement à une température initiale  $T_i$ . Ensuite, la température sur la frontière gauche est élevée (ou abaissée pour un problème de solidification) à une température  $T_w$  différente de la température de fusion  $T_f$ .

Les propriétés utilisées seront celles caractérisant l'eau et l'aluminium. Il est toutefois important de remarquer que les résultats obtenus, bien que très près de la solution analytique, diffèrent de résultats qui pourraient être obtenus expérimentalement. Le modèle mathématique néglige des phénomènes physiques (tel la convection) qui sont présents lors de tests expérimentaux.

Pour tous les tests de cette section, les paramètres et variables sont physiques. Cependant, l'équation  $\int_V \frac{\partial H}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dV = 0$  est résolue dans l'espace adimensionné. La notation pour les variables adimensionnées est la même que celle utilisée dans la section 1.3 (page 11).

La solution analytique fait référence à un problème sur une demi-droite de longueur infinie, la solution numérique est quant à elle calculée sur un domaine fini. On a choisi un domaine de calcul suffisamment grand éviter que la température sur la frontière droite ne subisse de changements trop prononcés lors de la résolution.

Pour tous les tests de cette section, la longueur du domaine est de  $16m$  ( $\tilde{x} = 1$ ). La discréétisation initiale du domaine est  $\Delta\tilde{x} = 0.025$ , soit un noeud à tous les 0.4 mètres. Ensuite, des noeuds sont ajoutés sur les segments du graphe de  $\theta$  dont la longueur par rapport à l'ordonnée est plus grande que  $\Delta\theta = 0.1$ . Le nombre de noeuds est initialement de 40 pour les deux tests, il passe ensuite à environ 90 lors des pas de temps subséquents. Pour les deux tests, le pas de temps cible adimensionné est  $\Delta\tau = 0.001$ .

### 5.1.1 Test 1, fusion de la glace

Propriétés	Glace	eau
$k$ ( $W/m \cdot K$ )	1.92	0.606
$c_p$ ( $J/kg \cdot K$ )	1960.	4181.
$\rho$ ( $kg/m^3$ )	1000.	1000.
$L$ ( $J/kg$ )	333400	
$T_f$ ( $K$ )	273.15	

Tableau 5.1: Propriétés physiques pour le test 1

Pour ce test, la glace est initialement à une température uniforme de  $268.15K$ . La température du coté gauche du domaine est subitement élevée à  $293.15K$  et la fusion de la glace commence à  $x = 0$ . La température de la frontière droite demeure constante à  $268.15K$ . Les propriétés pour l'eau et la glace sont présentées dans le tableau 5.1. Le nombre de Stefan pour ce test est  $Ste = 0.2508$ .

Les figures 5.1 et 5.2 (page 44) présentent les résultats numériques obtenus avec la MVFD ainsi que la solution analytique correspondante. On peut constater que les résultats concordent très bien avec la solution analytique. De plus, on peut observer que tout au long des calculs, l'erreur sur la position de l'interface demeure très petite et qu'elle ne s'accentue pas. L'erreur relative au temps final est de 0.01% et l'erreur absolue de  $0.0001m$ . La figure 5.2 présente le profil de température de la solution numérique et de la solution analytique pour le temps final qui se situe à  $2.72 \times 10^7$  secondes ( $\tau \approx 0.1$ ).

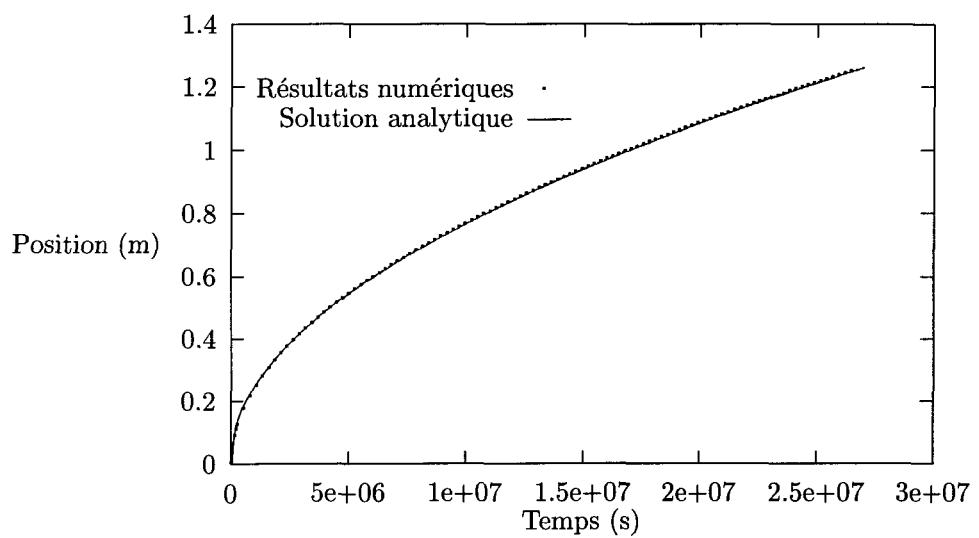


Figure 5.1: Historique du déplacement de l'interface pour le test 1

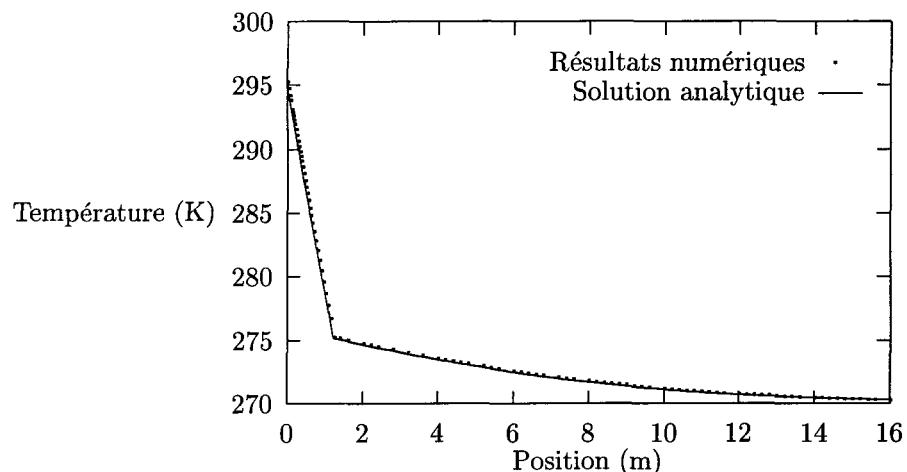


Figure 5.2: Profil de température au temps final pour le test 1

### 5.1.2 Test 2, solidification de l'aluminium

Propriétés	Solide	Liquide
$k$ ( $W/m$ )	237.	218.
$c_p$ ( $J/kg \cdot K$ )	903.	1146.
$\rho$ ( $kg$ )	2702.	2702.
$L$ ( $J/kg$ )	399000.	
$T_f$ ( $K$ )	933.	

Tableau 5.2: Propriétés physiques pour le test 2

Pour ce test, l'aluminium a initialement une température uniforme de  $1000K$ . La température de la frontière gauche est subitement abaissée à  $300K$  et la solidification de l'aluminium débute à  $x = 0$ . Les propriétés utilisées sont présentées dans le tableau 5.2. Le nombre de Stefan pour ce test est  $Ste = 1.5842$ .

Comme on peut le constater en observant les figures 5.3 et 5.4 de la page 46, la solution numérique obtenue avec la MVFD est en accord avec la solution analytique. Tout comme le test précédent, l'erreur relative est très petite, (de l'ordre de 0.01% au temps final à  $2.0 \times 10^5$  secondes ( $\tau \approx 0.1$ )). L'erreur absolue n'a pas tendance à augmenter mais demeure plutôt constante et est de l'ordre de  $0.0005m$ . Ici aussi le profil de température pour le temps final est présenté sur la figure 5.4.

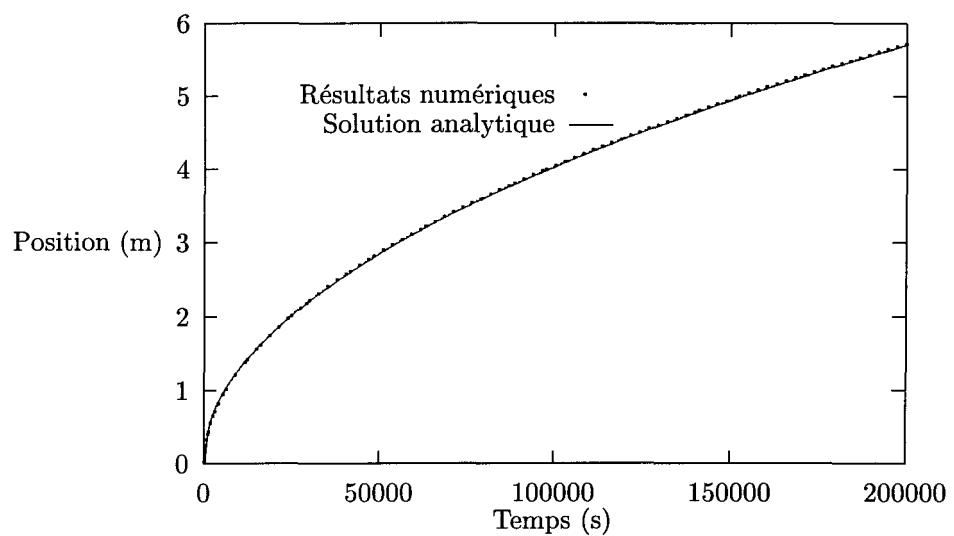


Figure 5.3: Historique du déplacement de l'interface pour le test 2

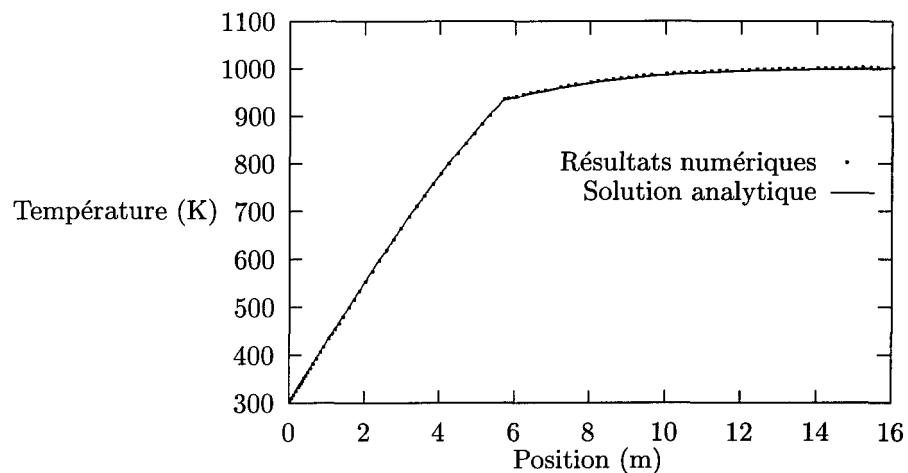


Figure 5.4: Profil de température au temps final pour le test 2

## 5.2 Condition au bord de type Neumann

Dans cette section, des résultats numériques seront comparés avec la solution analytique de la section 2.2.2 page 18. Les propriétés utilisées seront celles caractérisant l'aluminium, elles sont présentées dans le tableau 5.2 à la page 45.

### 5.2.1 Test 3, solidification de l'aluminium pour une condition de flux

Pour ce problème test, la longueur du domaine est de  $1m$  et la discréétisation initiale du domaine est  $\Delta\tilde{x} = 0.025$ , soit un noeud tous les  $0.4$  mètres. Ensuite, des noeuds sont ajoutés sur les segments du graphe de  $\theta$  dont la longueur est plus grande que  $\Delta\theta = 0.1$ . Le nombre de noeuds est initialement d'environ 40, il passe ensuite à 70 lors des pas de temps suivants. Pour ce test, le pas de temps cible adimensionné est  $\Delta\tau = 0.002$  et le temps final est  $\tau = 0.4$ .

Pour ce test, l'aluminium est initialement à sa température de solidification de  $933K$ . La condition de flux

$$q_{w_0}'' = 50 \text{ (kW/m}^2\text{)}$$

est imposée sur la frontière gauche. La chaleur passe de l'intérieur à l'extérieur du domaine et il y a un refroidissement. La température de la frontière droite demeure constante à  $933K$ .

Les figures 5.5 et 5.6 de la page 48 présentent les résultats numériques obtenus avec la MVFD ainsi que la solution analytique correspondante. On peut constater que les résultats concordent très bien avec la solution. De plus, on peut observer que tout au long des calculs, l'erreur sur la position de l'interface demeure inférieure à  $0.0005m$  (.25%) et qu'elle ne s'accentue pas. Cependant, la solution numérique est comparée à une solution exprimée sous forme d'une série de puissances dont on ne connaît que les premiers termes. On peut supposer qu'une partie de l'erreur provient de l'estimation de la solution analytique.

La figure 5.6 présente les profils de température de la solution numérique et de la solution analytique au temps final.

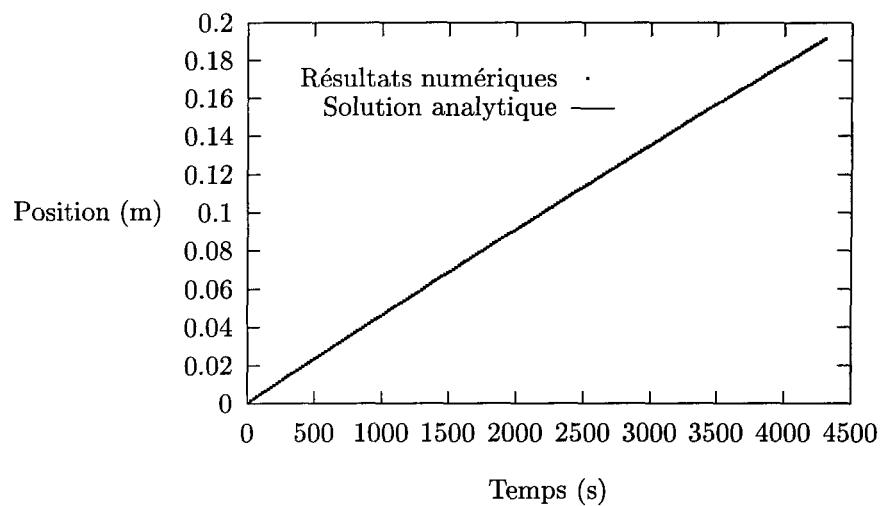


Figure 5.5: Historique de déplacement de l'interface pour le test 3

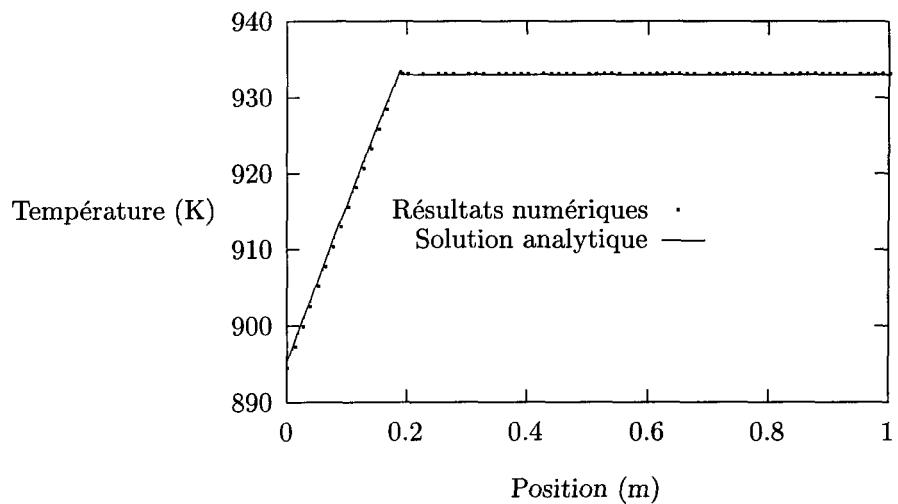


Figure 5.6: Profil de température au temps final pour le test 3

### 5.3 Test 4, expérimentation numérique

Afin d'illustrer la capacité du schéma numérique pour la gestion de plus d'une interface diphasique, un test numérique est ici présenté. Les figures 5.7 et 5.8 (page 50) présentent l'évolution du profil de température pour un problème qui comporte au départ de l'eau et de la glace. Les constantes physiques caractérisant l'eau et la glace sont les mêmes que celles du tableau 5.1 à la page 43. La condition initiale est donnée par la fonction

$$T(x, 0) = 10 * \sin((.25 + x) \cdot \pi) + 273.15,$$

et les conditions aux parois sont les suivantes :

$$q_{w0}'' = 0.1 \text{ kW/m}^2, \quad q_{w1}'' = 0.1 \text{ kW/m}^2,$$

ce qui correspond à un refroidissement aux deux parois.

La discréétisation initiale comporte 50 noeuds répartis uniformément. Le pas de temps cible est  $\Delta\tau = 0.002$ .

Initialement, deux interfaces sont présentes et situées aux positions  $0.75m$  et  $1.75m$ . Lors du refroidissement des parois, une troisième interface apparaît à  $t = 7707s$  sur la paroi droite.

À  $t = 13067s$  la solidification débute sur la frontière gauche. La température du solide entre les deux interfaces du départ a augmenté significativement. Cependant, ces deux interfaces n'ont pratiquement pas bougé, leur positions sont alors  $x = 0.7486m$  et  $x = 1.7514m$ . Quant au front de solidification qui a débuté sur la frontière droite, il est alors localisé à  $1.9994m$ .

Au temps  $t = 772567s$ , le front de solidification qui a débuté sur la frontière droite rejoint l'interface située à  $1.7646m$  et toute l'eau située à  $x > 0.7544m$  est à l'état solide. Il est intéressant de remarquer que bien que la température du solide entre les deux interfaces ait significativement augmentée, les deux interfaces initiales n'ont pratiquement pas bougé.

Finalement, à  $t = 2144567s$  tout le domaine devient solide.

Ce test a permis d'illustrer qu'il est possible avec la MVFD de pouvoir gérer automatiquement l'apparition et la rencontre de plus d'une interface au cours d'une simulation.

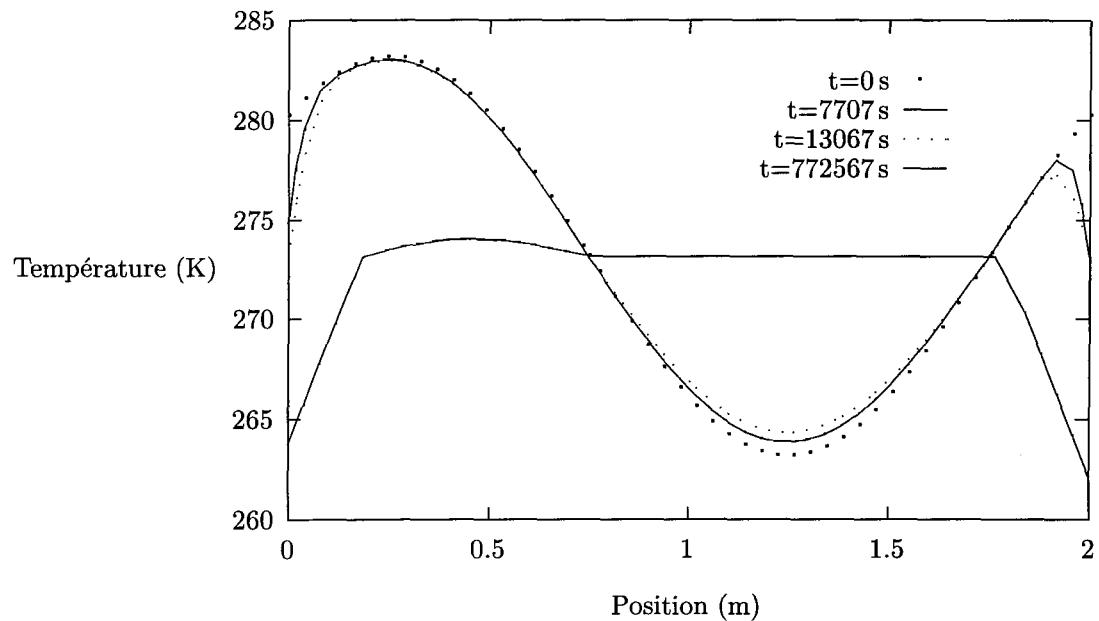


Figure 5.7: Évolution du profil de température pour le test 4

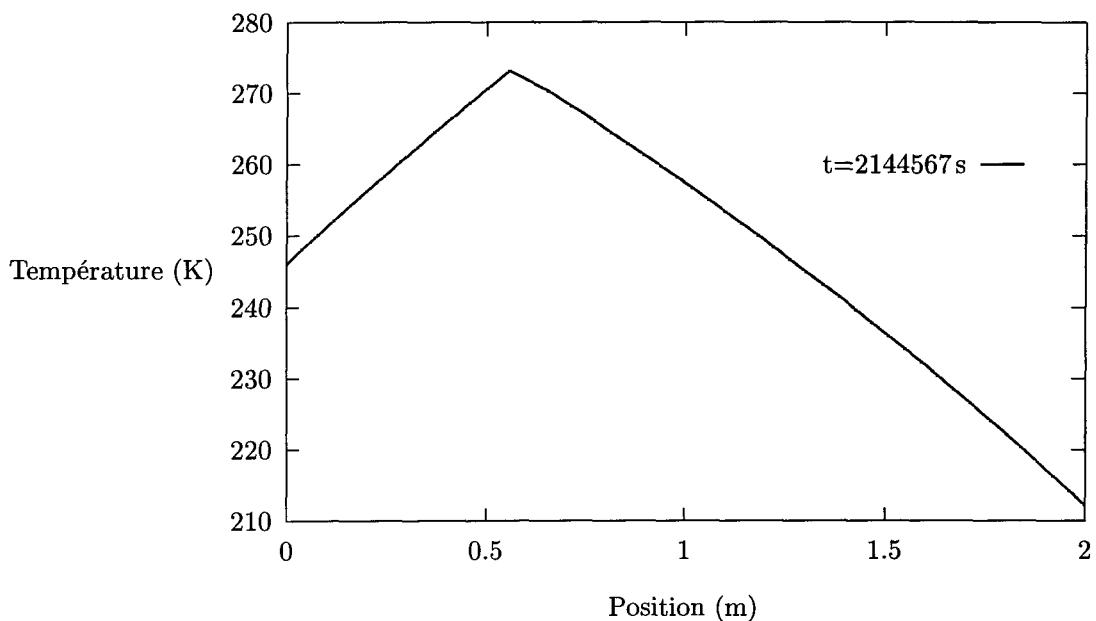


Figure 5.8: Profil de température au temps final pour le test 4

# Chapitre 6

## Présentation du schéma numérique en 2D

Dans ce chapitre, la méthode des volumes finis dirigés est brièvement décrite pour la résolution de l'équation de la chaleur pour des problèmes de changement de phase en 2D.

### 6.1 Cadre général

En deux dimensions d'espace, l'équation (1.9) (page 7) se résume à

$$\int_V \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -k \frac{\partial T}{\partial y} \right) dV = 0, \quad (6.1)$$

où rappelons-le,  $V$  est un volume de contrôle espace-temps. Considérons le domaine fermé  $W \subseteq \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ . Le domaine  $W$  est fermé par les éléments frontières  $w_1, w_2, \dots, w_n$ . On cherche pour un intervalle de temps  $I = [0, t_{fin}]$  une fonction

$$T : (x, y, t) \in W \times I \mapsto T(x, y, t)$$

qui est solution de (6.1) et satisfait la condition initiale

$$T(x, y, 0) = T^0(x, y),$$

où  $T^0 : W \rightarrow \mathbb{R}$ . On suppose la solution connue au temps initial.

Pour chacun des éléments frontières, la condition au bord peut être de type **Dirichlet**

$$T|_{w_i} = T_{w_i}^0,$$

ou de type **Neumann**

$$-k \nabla T \cdot \mathbf{n} = -k \left( \frac{\partial T}{\partial x} n_x + \frac{\partial T}{\partial y} n_y \right) = q_{w_i},$$

où  $\mathbf{n}$  est le vecteur normal unitaire pointant vers l'extérieur du domaine et dont les composantes sont  $n_x$  et  $n_y$ . Les valeurs du flux  $q_{w_i}$  sont des constantes. Pour chacun des éléments frontières, la condition au bord peut être différente.

Par le théorème de la divergence, on peut ramener l'intégrale de volume (6.1) à l'intégrale de surface

$$\int_{\partial V} \left( -k \frac{\partial T}{\partial x}, -k \frac{\partial T}{\partial y}, H \right) \cdot \mathbf{n} dA = 0, \quad (6.2)$$

où  $dA$  est l'élément d'aire sur  $\partial V$ . La conservation de l'énergie pour un volume de contrôle arbitraire peut alors être calculée à partir d'une intégrale de surface sur la frontière de ce volume.

## 6.2 Volumes de contrôle espace-temps en 2D

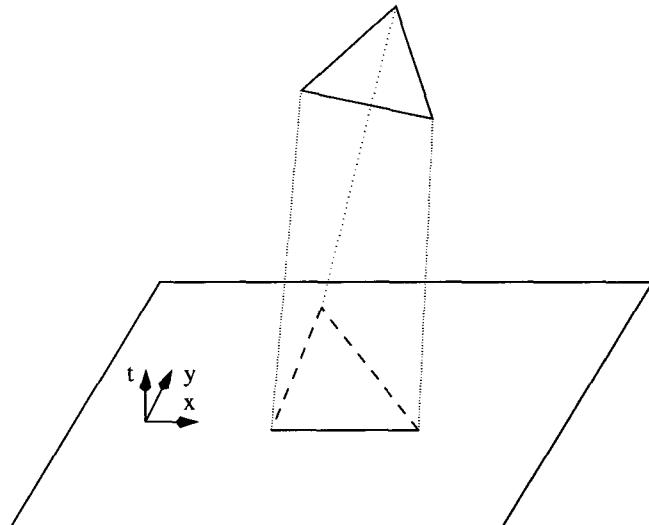


Figure 6.1: Élément prismatique triangulaire

Pour la résolution numérique en 2D, on discrétise le domaine en espace avec des triangles. Les sommets de ces triangles sont appelés des noeuds. Dans des situations spéciales qui seront expliquées plus tard, un triangle peut être dégénéré en un point ou en un segment de droite. Comme les noeuds peuvent se déplacer au cours du temps, un triangle peut se déformer.

Considérons une bande espace-temps  $\{(x, y, t) | (x, y) \in W, t \in [t_0, t_1]\}$ , où  $W$  est un sous-domaine fermé de  $\mathbb{R}^2$ . En reliant les sommets correspondant du triangle au temps  $t_0$  et d'un même triangle au temps  $t_1$ , on obtient un prisme, possiblement tordu (figure 6.1, page 52). On appellera ce prisme **élément prismatique triangulaire**. Une bande espace-temps est donc constituée d'un nombre fini d'éléments prismatiques triangulaires.

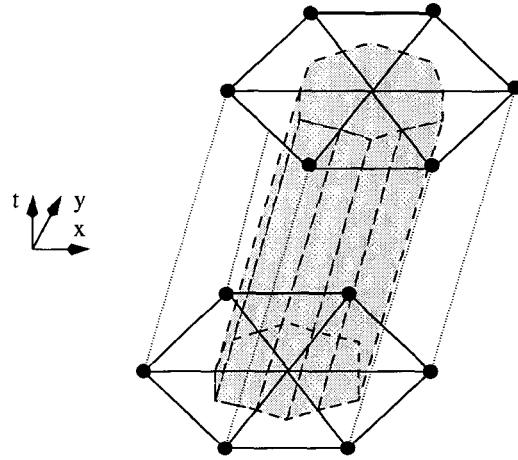


Figure 6.2: Cellule et volume de contrôle espace-temps en 2D

Considérons un noeud  $\mathbf{x}_0^t$  quelconque de sous-indice  $0^1$ , ce noeud est un sommet des triangles  $\Delta_0, \Delta_1, \dots, \Delta_n$ . On note par les sous-indices  $1_i$  et  $2_i$  les deux autres sommets du triangle  $\Delta_i$ . De plus, les noeuds de sous-indice  $0, 1_i$  et  $2_i$  sont orientés dans le sens anti-horaire.

Considérons la figure 6.2. En un temps  $t$  fixé, une **cellule** entourant le noeud  $\mathbf{x}_0^t$  est formée de la réunion des triangles  $\Delta_0, \Delta_1, \dots, \Delta_n$  dont le noeud  $\mathbf{x}_0^t$  est un sommet. Le déplacement de cette cellule du temps  $t$  ( $t_0 \leq t < t_1$ ) au temps  $t_1$  engendre une **cellule espace-temps**.

Pour chacun des triangles de cette cellule, introduisons les points

$$\mathbf{x}_{A_i}^t = \frac{\mathbf{x}_0^t + \mathbf{x}_{1_i}^t}{2}, \quad \mathbf{x}_{B_i}^t = \frac{\mathbf{x}_0^t + \mathbf{x}_{1_i}^t + \mathbf{x}_{2_i}^t}{3} \quad \text{et} \quad \mathbf{x}_{C_i}^t = \frac{\mathbf{x}_0^t + \mathbf{x}_{2_i}^t}{2}.$$

---

<sup>1</sup>Rappelons que  $\mathbf{x}_i^1$  et  $\mathbf{x}_i^0$  désignent respectivement les positions d'un noeud au temps  $t_1$  et  $t_0$ .

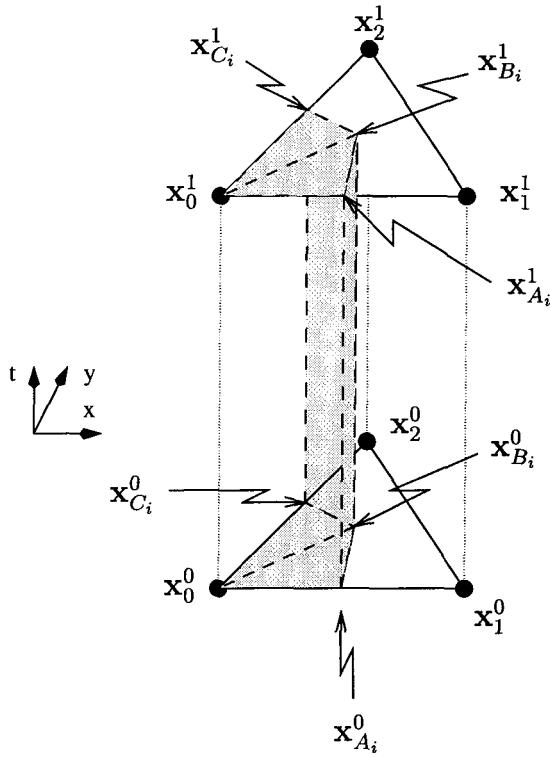


Figure 6.3: Surfaces d'un volume de contrôle pour deux prismes triangulaires voisins

Les points  $\mathbf{x}_{A_i}^t$  et  $\mathbf{x}_{C_i}^t$  sont respectivement les points milieux des arêtes  $[x_0^t, x_1^t]$  et  $[x_0^t, x_2^t]$  (figure 6.3). Le point  $\mathbf{x}_{B_i}^t$  est le centre géométrique du triangle  $x_0^t x_1^t x_2^t$ . Les points  $\mathbf{x}_0^t$ ,  $\mathbf{x}_{A_i}^t$  et  $\mathbf{x}_{B_i}^t$  ainsi que  $\mathbf{x}_0^t$ ,  $\mathbf{x}_{B_i}^t$  et  $\mathbf{x}_{C_i}^t$  sont les sommets de petits triangles. En un temps  $t_p$  ( $t_0 \leq t_p < t_1$ ) fixé, la réunion de ces petits triangles autour du point  $\mathbf{x}_0^t$  engendre un polygone. Le déplacement de ce polygone du temps  $t_p$  au temps  $t_1$  engendre un **volume de contrôle espace-temps**. La figure 6.2 (page 53) illustre un volume de contrôle espace-temps, le volume de contrôle est représenté par la partie ombragée.

### 6.3 Déplacement, éclatement et rencontre de noeuds en 2D

Tout comme en 1D, les noeuds peuvent se déplacés et par conséquence, des rencontres entre des noeuds ou entre des noeuds et des segments sont possibles. Dans le cadre de ce travail, on utilise un maillage fixe que l'on appelle **maillage de base**. Ce maillage de base peut être raffiné et *seulement les noeuds du raffinement sont mobiles*.

### 6.3.1 Déplacement des noeuds

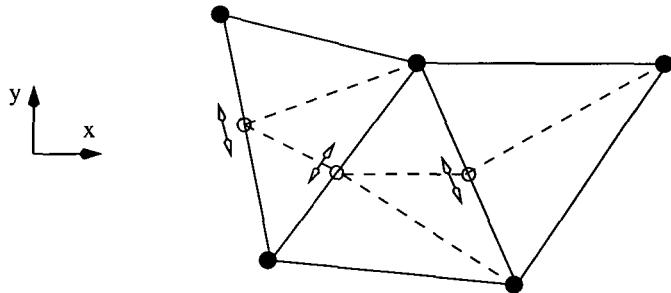


Figure 6.4: Déplacement des noeuds en 2D

Afin de simplifier le problème du déplacement des noeuds, un noeud mobile ne peut se déplacer que s'il provient du raffinement du maillage de base. De plus, il ne peut se déplacer que sur les arêtes du maillage de base.

La figure 6.4 présente un maillage qui comporte des noeuds mobiles. Les noeuds du maillage de base sont représentés par des disques pleins, les noeuds mobiles par des disques vides. Les arêtes du maillage de base sont représentées par des lignes continues et les arêtes ajoutées par des lignes pointillées. Les flèches indiquent la liberté de déplacement des noeuds mobiles.

### 6.3.2 Éclatement d'un noeud en 2D

Afin de pouvoir adapter automatiquement le maillage à l'évolution de la solution au cours d'un pas temps, on permet l'éclatement d'un noeud en un ou plusieurs triangles. La figure 6.5 (page 56) présente l'éclatement d'un noeud en un triangle. On remarque qu'au temps  $t_0$  le prisme à base triangulaire est dégénéré en un point. La figure 6.6 (page 56) présente l'éclatement d'un noeud en trois triangles.

### 6.3.3 Rencontre de noeuds en 2D

Les noeuds ne peuvent se déplacer que sur des arêtes du maillage. Par conséquent, les seules rencontres possibles sont celles entre des noeuds, les rencontres entre des noeuds et des arêtes sont exclues. La figure 6.7 (page 57) présente l'évolution d'un prisme à base triangulaire lors d'une rencontre. Le prisme est dégénéré en un point

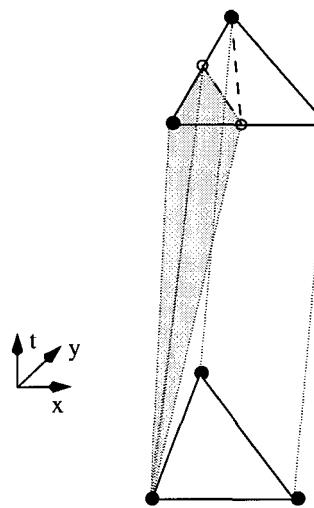


Figure 6.5: Éclatement d'un noeud en un triangle

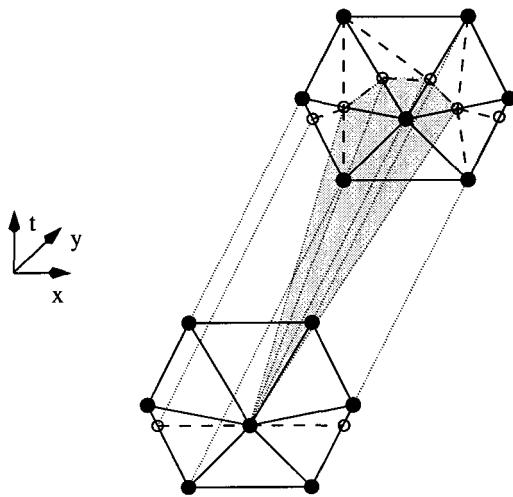


Figure 6.6: Évolution possible du maillage lors d'un éclatement en 2D

au temps  $t_1$ . Du point de vue géométrique, une rencontre est le phénomène inverse de l'éclatement. La figure 6.8 (page 57) présente la rencontre de plusieurs noeuds mobiles avec un noeud du maillage de base.

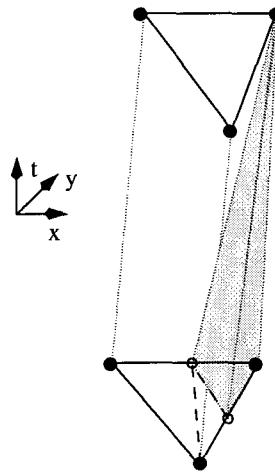


Figure 6.7: Élément prismatique triangulaire lors d'une rencontre en 2D

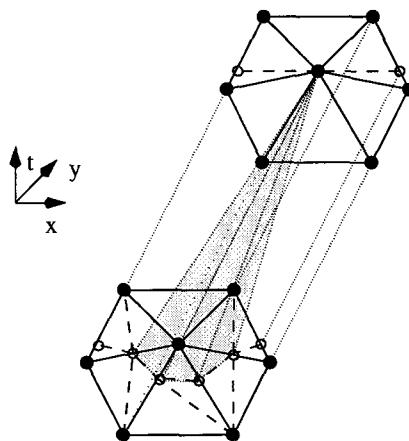


Figure 6.8: Évolution possible du maillage lors d'une rencontre en 2D

## 6.4 Discrétisation du problème en 2D

Le problème à résoudre est envisagé de la même façon tant en 1D qu'en 2D. On considère une bande espace-temps  $\{(x, y, t) \mid (x, y) \in W, t \in [t_0, t_1]\}$ , où  $W$  est un sous-domaine fermé de  $\mathbb{R}^2$ . On veut décrire la position d'un point de cette bande à l'aide de coordonnées adaptées à la solution du problème. Posons  $\mathbf{r} = (\mathbf{x}(x_0, y_0, t), t)$ .

Pour chaque point  $\mathbf{x}_0$  fixe, on obtient une courbe  $\mathbf{r}(t)$  qui est orientée vers le temps positif, à savoir

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot (0, 0, 1) = \left( \frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, 1 \right) \cdot (0, 0, 1) = 1 \neq 0.$$

On admet, à la limite, que plus d'une courbe aient la même origine ou le même point d'arrivée. On considère deux types de courbes :

1. des segments temporels  $(x_0, y_0, t) = (x_0, y_0)$  ;
2. des courbes de niveau de la solution approximée  $\tilde{T}$ .

Le domaine de résolution est discrétement en  $m$  bandes espace-temps. Sur chacune de ces bandes espace-temps, on cherche à trouver une fonction  $\tilde{T}(x, y, t)$  ainsi qu'un ensemble fini de courbes afin qu'elle soit décrite de la meilleure façon possible.

À chaque courbe (ou trajectoire de noeud) à l'intérieur d'une bande correspond un seul noeud, et possiblement plusieurs aux extrémités. La position en espace d'un noeud arbitraire au temps  $t_j$  est notée  $\mathbf{x}(x_i, y_i, t_j) = \mathbf{x}_i^j$ , sa valeur nodale  $T(x_i, y_i, t_j) = T_i^j$ . Pour un temps donné, les noeuds sont indiqués de 0 à  $n - 1$ . Pour un temps subséquent, il y a correspondance des indices des noeuds.

Tout comme en 1D, en un noeud, on a deux types d'inconnues :

1. la température au noeud dans le cas d'un noeud fixe (la trajectoire est connue),
2. la position du noeud dans le cas où le noeud est sur une isotherme dont on veut suivre le déplacement (la trajectoire est inconnue).

Puisque certains noeuds sont mobiles, on peut avoir des rencontres entre les noeuds. S'il y a une rencontre de noeuds, il y aura au moins deux noeuds à la même position au temps  $t_{j+1}$ . Bien qu'il y ait plusieurs noeuds à la même position, il n'y a qu'une valeur limite de la solution cherchée pour une position. *Il ne peut pas y avoir de discontinuité de la température au temps  $t_{j+1}$  ( $t > 0$ ).*

Afin de pouvoir adapter le maillage à la solution au temps  $t_{j+1}$ , on peut éclater (figure 6.6, page 56) un noeud en plusieurs noeuds. S'il y a éclatement d'un noeud, on a plusieurs noeuds à la même position au temps  $t_j$ . *Lors d'un éclatement, c'est seulement au temps initial ( $t = 0$ ) que l'on admet plus d'une valeur nodale pour une*

*position nodale.* À  $t > 0$ , il ne peut y avoir qu'une valeur nodale pour une position nodale. Rappelons que dans ce travail, pour chaque noeud au temps  $t > 0$ , il ne peut y avoir qu'une seule valeur inconnue.

#### 6.4.1 Fonctions interpolantes en 2D

Pour toutes les positions décrites par les trajectoires, il existe une valeur de la fonction  $T$ . Pour un ensemble de trajectoires fixées, la fonction  $T$  peut être approximée par

$$\tilde{T}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n-1} c_i^j \phi_i^j(\mathbf{x}_i^j), \quad (6.3)$$

où  $\{\sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n-1} c_i^j \phi_i^j(\mathbf{x}_i^j) \mid c_i^j \in \mathbb{R}\}$  est l'**espace des fonctions interpolantes**. Les  $c_i^j$  sont les coefficients et les  $\phi_i^j$  les **fonctions d'une base d'approximation** (elles seront définies dans la section suivante). Sauf dans le cas où il y a une discontinuité au temps initial, la fonction  $\tilde{T}$  est continue partout.

Le changement de coordonnées  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(x_0, y_0, t)$  peut-être être approximé par des fonctions du même type :

$$\tilde{x}(x_0, y_0, t) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n-1} d_i^j \phi_i^j(\mathbf{x}_i^j) \quad (d_i^j \in \mathbb{R}) \quad (6.4)$$

et

$$\tilde{y}(x_0, y_0, t) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n-1} e_i^j \phi_i^j(\mathbf{x}_i^j) \quad (e_i^j \in \mathbb{R}). \quad (6.5)$$

Les fonctions  $\tilde{x}$  et  $\tilde{y}$  sont continues partout.

Tout comme en 1D, lorsque les positions sont fixées, les fonctions d'une base de l'espace d'approximation sont connues. Lorsque certaines trajectoires sont inconnues, on associe une équation discrète à chacune des trajectoires inconnues. La base d'approximation est fixée lors de la résolution du système d'équations discrètes.

Les bandes espace-temps sont composées de prismes à base triangulaire. Sur chacun des prismes à base triangulaire, on effectue le paramétrage suivant<sup>2</sup> des variables des composantes des trajectoires et de la température  $\tilde{T}$  :

$$\begin{aligned} \tilde{x}(r, \theta, \tau) &= (1 - \tau)\{(1 - r)x_0^0 + r[(1 - \theta)x_1^0 + \theta x_2^0]\} \\ &+ (\tau)\{(1 - r)x_0^1 + r[(1 - \theta)x_1^1 + \theta x_2^1]\}, \end{aligned} \quad (6.6)$$

---

<sup>2</sup>Afin de simplifier la notation, nous laissons tomber le sous-indice  $i$  des points  $\mathbf{x}_{1i}$  et  $\mathbf{x}_{2i}$ .

$$\begin{aligned}\tilde{y}(r, \theta, \tau) &= (1 - \tau)\{(1 - r)y_0^0 + r[(1 - \theta)y_1^0 + \theta y_2^0]\} \\ &+ (\tau)\{(1 - r)y_0^1 + r[(1 - \theta)y_1^1 + \theta y_2^1]\},\end{aligned}\quad (6.7)$$

$$\begin{aligned}\tilde{T}(r, \theta, \tau) &= (1 - \tau)\{(1 - r)T_0^0 + r[(1 - \theta)T_1^0 + \theta T_2^0]\} \\ &+ (\tau)\{(1 - r)T_0^1 + r[(1 - \theta)T_1^1 + \theta T_2^1]\},\end{aligned}\quad (6.8)$$

$$0 \leq r, \theta, \tau \leq 1,$$

où on fait le changement de variable suivant sur le temps :

$$t(\tau) = (1 - \tau)t_0 + \tau t_1. \quad (6.9)$$

Les fonctions  $\tilde{T}$ ,  $\tilde{x}$  et  $\tilde{y}$  sont bilinéaires : elles sont linéaires en espace, et linéaires le long d'une trajectoire espace-temps. Pour un temps  $t$  fixe, les fonctions  $\tilde{T}(r, \theta, \tau)$ ,  $\tilde{x}(r, \theta, \tau)$  et  $\tilde{y}(r, \theta, \tau)$  varient linéairement au dessus de tous les triangles.

#### 6.4.2 Fonctions de la base de l'espace d'interpolation en 2D

Dans la section précédente, les fonctions d'approximation pour la température et les trajectoires ont été définies comme étant :

$$\tilde{T}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n-1} c_i^j \phi_i^j(\mathbf{x}_i^j),$$

$$\tilde{x}(x_0, y_0, t) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n-1} d_i^j \phi_i^j(\mathbf{x}_i^j)$$

et

$$\tilde{y}(x_0, y_0, t) = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n-1} e_i^j \phi_i^j(\mathbf{x}_i^j),$$

où les  $\phi_i^j$  sont les fonctions d'une base de l'espace d'approximation.

Afin de correctement décrire l'espace des fonctions interpolantes, les fonctions de la base ont les caractéristiques suivantes :

- une seule fonction  $\phi_i^t$  de la base est attachée à chacun des noeuds ;
- si plusieurs noeuds sont à la même position, on aura autant de fonctions qu'il y a de valeurs nodales à cette position ;
- une fonction  $\phi_i^t$  est linéaire au-dessus de tous les triangles ;
- une fonction  $\phi_i^t$  est linéaire le long d'une trajectoire espace-temps ;
- pour une fonction continue ou une fonction discontinue au temps initial, la fonction  $\phi_i^t$  n'est non nulle que sur les éléments prismatiques triangulaires où  $T_i^t$  doit être représentée ;
- sur les noeuds des éléments prismatiques triangulaires où la fonction  $\phi_i^j$  est non nulle, elle peut prendre les valeurs suivantes :

$$\phi_i^t(\mathbf{x}_k^t) = \begin{cases} 1, & k = i \text{ et } t = j \\ 0, & \text{autrement.} \end{cases}$$

## 6.5 Équations discrètes

Un volume de contrôle espace-temps  $V$  est la réunion d'éléments prismatiques triangulaires. Ces éléments prismatiques triangulaires seront notés  $W_i$ . Les surfaces d'intégration sur deux éléments prismatiques triangulaires voisins sont illustrées sur la figure 6.9 (page 62).

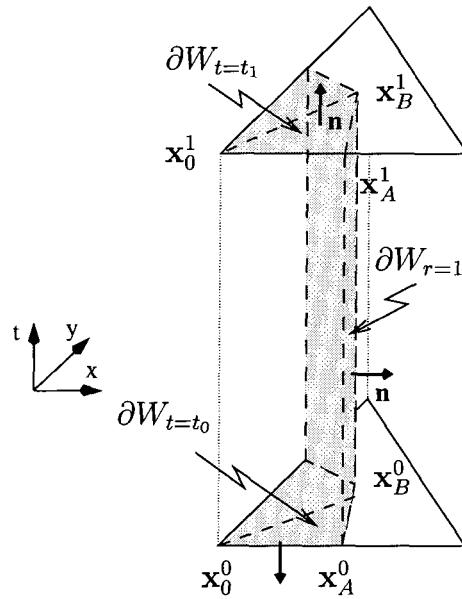


Figure 6.9: Surface d'intégration sur deux prismes triangulaires voisins

Pour chacun des éléments prismatiques triangulaires, l'intégration de

$$\int_{\partial V} \left( -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x}, -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y}, \tilde{H} \right) \cdot \mathbf{n} dA$$

se divise en trois parties :

1. l'intégration sur la surface extérieure du triangle au temps  $t_0$  (intégration en espace), cette surface est notée  $\partial W_{t=t_0}$  ;
2. l'intégration sur la surface extérieure du triangle au temps  $t_1$  (intégration en espace), cette surface est notée  $\partial W_{t=t_1}$  ;
3. l'intégration sur la surface extérieure engendrée par les segments  $\overline{x_A^0 x_B^0}$  et  $\overline{x_A^1 x_B^1}$  du prisme à base triangulaire (intégration en espace-temps). Cette surface est notée  $\partial W_{r=1}$ .

On notera par  $\mathbf{p} = (x, y, t)$  un point dans l'espace-temps. Tout comme  $\tilde{x}$ ,  $\tilde{y}$  et  $\tilde{T}$ , un point dans l'espace-temps a une représentation paramétrique donnée par

$$\mathbf{p}(r, \theta, \tau) = (1 - \tau)\mathbf{p}^0(r, \theta) + \tau\mathbf{p}^1(r, \theta), \quad (6.10)$$

où

$$\mathbf{p}^t(r, \theta) = (1 - r)(x_0^t, y_0^t, t) + r[(1 - \theta)(x_A^t, y_A^t, t) + \theta(x_B^t, y_B^t, t)].$$

Tout comme en un 1D, on utilise la température au barycentre ( $\bar{T} = \tilde{T}(\frac{2}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ) de l'élément pour déterminer les propriétés sur l'élément.

### 6.5.1 Intégration en espace

On calcule ces intégrales sur les surfaces  $\partial W_{\tau=0}$  et  $\partial W_{\tau=1}$  qui sont paramétrées avec  $r$  et  $\theta$ .

#### Intégration au temps $t=t_0$

Un élément d'aire orienté  $\mathbf{n} dA$  est calculé à partir de

$$\mathbf{n} dA = \frac{\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial r} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta}}{\left| \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial r} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \right|} \cdot \left| \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial r} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \right| d\theta dr = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial r} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} d\theta dr,$$

où

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial r} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} = \left( 0, 0, \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial y}{\partial r} - \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial y}{\partial \theta} \right).$$

Pour l'intégration au temps  $t_0$ , l'intégrale

$$\int_{\partial V} \left( -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x}, -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y}, \tilde{H} \right) \cdot \mathbf{n} dA$$

se résume à

$$\int_{\partial W_{t=t_0}} \tilde{H} \left( \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial y}{\partial r} - \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial y}{\partial \theta} \right) d\theta dr.$$

On notera cette intégrale par:

$$Hs^0, \bar{T} < T_f \quad \text{ou} \quad Hl^0, \bar{T} > T_f,$$

dépendant de la température au barycentre de l'élément.

### Intégration au temps $t=t_1$

Un élément d'aire orienté  $\mathbf{n} dA$  est calculé à partir de

$$\mathbf{n} dA = \frac{\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial r}}{\left| \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial r} \right|} \cdot \left| \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial r} \right| d\theta dr = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial r} d\theta dr,$$

où

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial r} = \left( 0, 0, \frac{\partial y}{\partial \theta} \frac{\partial x}{\partial r} - \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial x}{\partial \theta} \right).$$

Pour l'intégration au temps  $t_1$ , l'intégrale

$$\int_{\partial V} \left( -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x}, -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y}, \tilde{H} \right) \cdot \mathbf{n} dA$$

se résume à

$$\int_{\partial W_{t=t_1}} \tilde{H} \left( \frac{\partial y}{\partial \theta} \frac{\partial x}{\partial r} - \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial x}{\partial \theta} \right) d\theta dr.$$

On notera cette intégrale par:

$$Hs^1, \tilde{T} < T_f \quad \text{ou} \quad Hl^1, \tilde{T} > T_f,$$

dépendant de la température au barycentre de l'élément.

#### 6.5.2 Intégration en espace-temps

L'intégrale en espace-temps est calculée sur la surface  $\partial W_{r=0}$  qui est paramétrée avec  $\theta$  et  $\tau$ . Un élément d'aire orienté  $\mathbf{n} dA$  est calculé à partir de

$$\mathbf{n} dA = \frac{\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \tau}}{\left| \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \tau} \right|} \cdot \left| \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \tau} \right| d\theta dr = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \tau} d\theta dr$$

où

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \tau} d\theta d\tau = \left( \Delta t \frac{\partial y}{\partial \theta}, -\Delta t \frac{\partial x}{\partial \theta}, \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial y}{\partial \tau} - \frac{\partial x}{\partial \tau} \frac{\partial y}{\partial \theta} \right) d\theta d\tau.$$

Il faut donc calculer l'intégrale suivante:

$$\int_{\partial W_{r=1}} \left[ -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} \Delta t \frac{\partial y}{\partial \theta} + k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \Delta t \frac{\partial x}{\partial \theta} + \tilde{H} \left( \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial y}{\partial \tau} - \frac{\partial x}{\partial \tau} \frac{\partial y}{\partial \theta} \right) \right] d\theta d\tau.$$

Les dérivées partielles  $\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x}$  et  $\frac{\partial \tilde{T}}{\partial y}$  sont calculées à partir des expressions:

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} = \frac{1}{\det K} \left[ \frac{\partial \tilde{T}}{\partial r} \frac{\partial y}{\partial \theta} - \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \theta} \frac{\partial y}{\partial r} \right], \quad (6.11)$$

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} = \frac{1}{\det K} \left[ -\frac{\partial \tilde{T}}{\partial r} \frac{\partial x}{\partial \theta} + \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \theta} \frac{\partial x}{\partial r} \right] \quad (6.12)$$

et

$$\det K = \left[ \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial y}{\partial \theta} - \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial y}{\partial r} \right]. \quad (6.13)$$

La dernière intégrale peut être subdivisée en trois intégrales qui seront notées

$$\begin{aligned} Qx &= \int_{\partial W_{r=1}} -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} \Delta t \frac{\partial y}{\partial \theta} d\theta d\tau; \\ Qy &= \int_{\partial W_{r=1}} k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \Delta t \frac{\partial x}{\partial \theta} d\theta d\tau; \\ Hs^{01} (Hl^{01}) &= \int_{\partial W_{r=1}} \tilde{H} \left( \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial y}{\partial \tau} - \frac{\partial x}{\partial \tau} \frac{\partial y}{\partial \theta} \right) d\theta d\tau; \end{aligned}$$

la dernière intégrale est dépendante de la température au barycentre de l'élément et la valeur de la conductivité  $k$  dépend de la phase où est calculé le flux.

### 6.5.3 Équations discrètes

Une équation discrète pour le noeud  $i$  est donnée par l'expression :

$$\text{phase solide: } \sum_{j=1}^n \left[ Hs_j^0 + Hs_j^1 + Hs_j^{01} + Qx_j + Qy_j \right] = 0, \quad (6.14)$$

$$\text{phase liquide: } \sum_{j=1}^n \left[ Hl_j^0 + Hl_j^1 + Hl_j^{01} + Qx_j + Qy_j \right] = 0. \quad (6.15)$$

Le sous-indice  $j$  des termes d'intégration indique le prisme où est calculé le terme d'intégration.

Pour un noeud de l'interface dont les voisins 1 à  $k$  sont dans une partie solide et les voisins  $k + 1$  à  $n$  sont dans une partie liquide, l'équation discrète à ce noeud est donnée par:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^k \left[ Hs_j^0 + Hs_j^1 + Hs_j^{01} + Qx_j + Qy_j \right] + \\ \sum_{j=k+1}^n \left[ Hl_j^0 + Hl_j^1 + Hl_j^{01} + Qx_j + Qy_j \right] = 0. \end{aligned} \quad (6.16)$$

### 6.5.4 Traitement des frontières

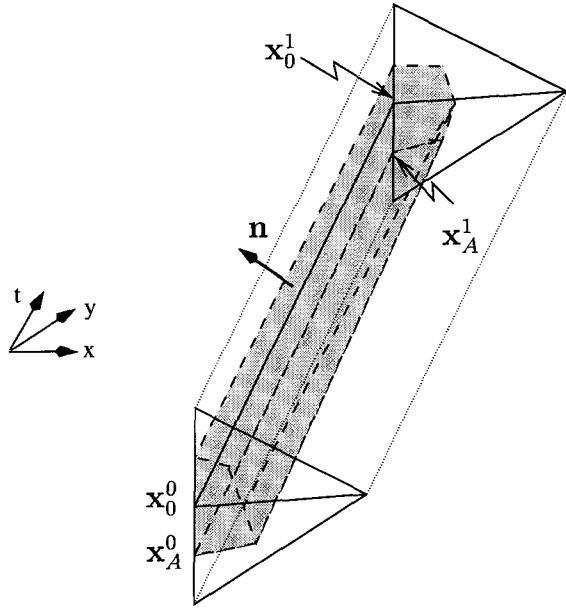


Figure 6.10: Surfaces d'intégration pour un noeud sur une frontière

Pour les prismes à base triangulaire dont une face fait partie d'une frontière où une condition de flux est imposée, on doit effectuer une intégrale sur la face extérieure qui est sur le bord (figure 6.10).

La condition de flux est donnée par l'expression

$$-k\nabla T \cdot \mathbf{n} = -k \left( \frac{\partial T}{\partial x} n_x + \frac{\partial T}{\partial y} n_y \right) = q_{w_k}'' ,$$

où  $\mathbf{n}$  est le vecteur normal pointant vers l'extérieur du domaine. Considérons le noeud  $i$ , si on intègre sur l'élément de frontière  $k$  du domaine, l'intégration de

$$\int_{\partial W_k} \left( -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x}, -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y}, \tilde{H} \right) \cdot \mathbf{n} dA$$

se résume alors à

$$Qb_k = q_{w_k}'' |A| , \quad (6.17)$$

où  $|A|$  est l'aire de la face extérieure  $\partial W_{\theta=1}$  ou  $\partial W_{\theta=0}$ . Pour un noeud  $i$  sur une frontière, les équations (6.14) et (6.15) (page 65) deviennent respectivement:

$$\text{phase solide: } \sum_{j=1}^n \left[ Hs_j^0 + Hs_j^1 + Hs_j^{01} + Qx_j + Qy_j \right] + Qb_1 + Qb_n = 0 , \quad (6.18)$$

$$\text{phase liquide : } \sum_{j=1}^n [Hl_j^0 + Hl_j^1 + Hl_j^{01} + Qx_j + Qy_j] + Qb_1 + Qb_n = 0. \quad (6.19)$$

$Qb_1$  et  $Qb_n$  sont les intégrales de flux au bord. Pour un noeud de fusion sur une frontière, l'équation discrète à ce noeud est maintenant donnée par l'expression

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^k [Hs_j^0 + Hs_j^1 + Hs_j^{01} + Qx_j + Qy_j] + \\ & \sum_{j=k+1}^n [Hl_j^0 + Hl_j^1 + Hl_j^{01} + Qx_j + Qy_j] + Qb_1 + Qb_n = 0. \end{aligned} \quad (6.20)$$

## Chapitre 7

# Mise en oeuvre du schéma numérique en 2D

### 7.1 Introduction

La mise-en-oeuvre de la MVFD en 2D est similaire à la mise-en-oeuvre en 1D, les situations à traiter restent essentiellement les mêmes. La différence majeure réside dans la gestion du maillage lors des éclatements et des rencontres.

En 2D, pour un temps  $t$  fixé, une interface diphasique est représentée par une courbe. Cette courbe est discrétisée avec des noeuds de fusion qui sont mobiles. En plus des noeuds de fusion, d'autres noeuds pourront se déplacer au besoin. La gestion de l'interface ainsi que le déplacement des noeuds comprend les situations suivantes :

- le déplacement des noeuds ;
- la rencontre de noeuds ;
- la sortie du domaine d'un ou de plusieurs noeuds de fusion ;
- l'entrée dans le domaine d'un ou plusieurs noeuds de fusion.

### 7.2 Déplacement des noeuds

Les noeuds mobiles ne peuvent se déplacer que sur des arêtes du maillage. En considérant une arête comme un espace de dimension 1, le déplacement des noeuds se fait dans un espace de dimension 1.

Considérons la figure 7.1 (page 69). Le noeud de sous-indice  $i$  se déplace entre les noeuds de sous-indice 0 et 1. La position du noeuds  $i$  est donnée par la fonction

$$\mathbf{x}_i^t(r) = (1 - r)\mathbf{x}_0^t + r\mathbf{x}_1^t, \quad 0 \leq r \leq 1.$$

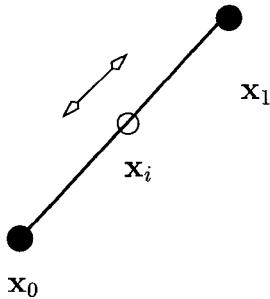


Figure 7.1: Déplacement d'un noeud sur une arête

À partir du paramètre  $r$ , on peut déterminer la position du noeud  $i$  sur l'arête.

La température au noeud est constante. Pour un noeud de fusion, elle est égale à la température de fusion. La seule valeur inconnue pour un noeud mobile est le paramètre  $r$ . On n'a besoin que d'une seule équation pour déterminer  $r$ . Le déplacement du noeud doit satisfaire l'équation de conservation de l'énergie pour un volume de contrôle attaché à ce noeud. L'équation discrète pour l'inconnue à ce noeud est donnée par :

- (6.16) ou (6.20) (page 65 ou 67) dans le cas d'un noeud de fusion ;
- (6.14), (6.15), (6.18) ou (6.19) pour un noeud sur une autre isotherme.

### 7.3 Rencontre de noeuds

Avant chacune des résolutions, on approxime le temps nécessaire<sup>1</sup> pour qu'un ou plusieurs noeuds mobiles rencontrent un noeud du maillage de base. Si le temps nécessaire approximé est plus petit que le pas de temps par défaut, il y aura possiblement rencontre.

Considérons la figure 7.2 (page 70). Les noeuds de sous-indice  $i$ ,  $i + 1$  et  $i + 2$  se dirigent vers le noeud de sous-indice 0. Pour que la température reste continue aux interfaces des triangles, ces trois noeuds doivent *obligatoirement rencontrer en même temps* le noeud 0. Lorsque l'on prévoit que ces noeuds rencontreront le noeud 0, la position des noeuds mobiles au temps  $t_1$  est alors connue et est égale à la position du noeud 0 au temps  $t_0$ . La valeur nodale au temps  $t_1$  pour tous ces noeuds est alors

---

<sup>1</sup>On discutera de la méthode d'approximation au chapitre 9.

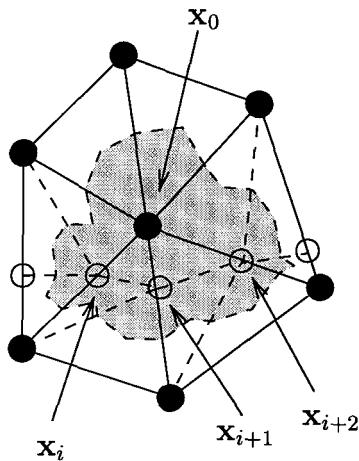


Figure 7.2: Surface d'intégration au temps  $t_0$  lors d'une rencontre

la même et est égale à la température de l'isotherme des noeuds mobiles. La valeur cherchée est le temps nécessaire pour la rencontre. L'équation discrète correspondante est la somme des équations discrètes pour les noeuds  $i$ ,  $i + 1$ ,  $i + 2$  et 0.

Pour déterminer quels seront les noeuds considérés pour une rencontre avec un noeud du maillage de base, on utilise les critères suivants :

- les noeuds mobiles sont à l'intérieur d'une même cellule du maillage de base ;
- les noeuds mobiles appartiennent à la même isotherme.

Après la résolution du système d'équations, les noeuds  $i$ ,  $i + 1$  et  $i + 2$  sont enlevés. Lorsque l'on veut continuer à suivre le déplacement de l'isotherme, le noeud 0 est ensuite éclaté. Dans le cas de l'interface diphasique, on procède toujours à un éclatement.

## 7.4 Éclatement des noeuds

Lors de l'entrée dans le domaine de l'interface ou après une rencontre, on doit procéder à l'éclatement d'un noeud pour que le maillage s'adapte à la solution future.

Considérons un noeud du maillage de base qui correspond à l'interface. Afin de déterminer quelles seront les arêtes sur lesquelles on ajoutera un noeud pour l'éclatement, on procède à un bilan d'énergie au noeud du maillage de base. Pour faire ce bilan d'énergie, on considère la température comme étant l'inconnue à ce noeud et on résout numériquement l'équation discrète attachée à ce noeud. Dans le cas de l'interface diphasique on procède de la façon suivante :

- s'il y a accroissement de la température, on éclate vers le solide (il y a fusion) ;
- s'il y a une baisse de la température, on éclate vers le liquide (il y a solidification).

## 7.5 Entrée dans le domaine de l'interface

### 7.5.1 Condition au bord de type Neumann

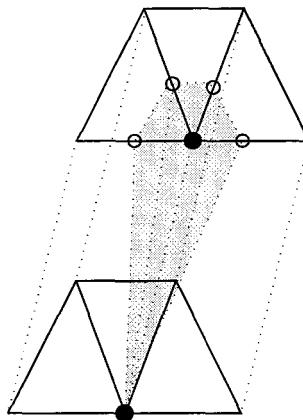


Figure 7.3: Éclatement lors de l'entrée de l'interface dans le domaine

Lorsqu'un changement de phase débute à partir d'un noeud sur la frontière du domaine, celui-ci se déroule en deux étapes :

1. la température d'un noeud sur une frontière devient égale à la température de fusion ;
2. le noeud sur la frontière est éclaté sur toutes les arêtes subissant le changement de phase (figure 7.3), la position des nouveaux noeuds et la température du noeud sur la frontière sont inconnues au temps  $t_1$ .

Tout comme en 1D, cette façon de procéder permet un traitement adéquat de l'interface. En débutant immédiatement le changement de phase lorsqu'un noeud atteint la température de fusion, le schéma numérique reste en accord avec la formulation mathématique du problème. Celle-ci impose que la fonction d'enthalpie présente en tout temps un saut égale  $\rho L$  à l'interface. Ce qui est le cas avec notre façon de procéder.

### 7.5.2 Condition au bord de type Dirichlet

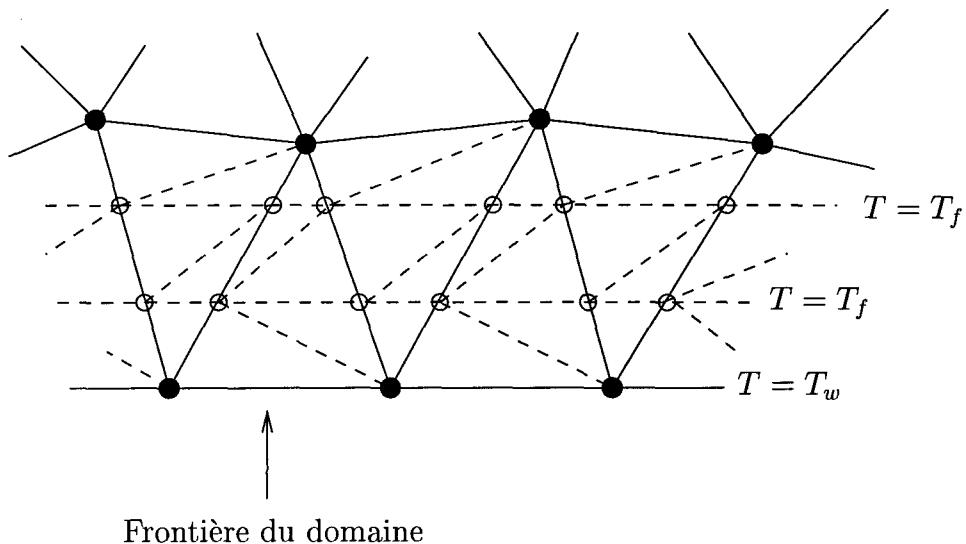


Figure 7.4: Structure du maillage pour le traitement d'une discontinuité

Pour obtenir de meilleurs résultats lorsque la température présente une discontinuité au temps initial, le même algorithme utilisé en 1D est appliqué en 2D.

#### Pas de temps initial

Pour chaque noeud de sous-indice  $i$  où la fonction est discontinue, on ajoute un noeud sur chacune des arêtes vers laquelle va évoluer l'isotherme de la température initiale. Ces noeuds sont ajoutés à la position occupée par le noeud  $i$ . De plus, lorsqu'un changement de phase débute à partir de cette discontinuité, on ajoute un noeud sur chacune des arêtes vers laquelle va évoluer l'interface. Au premier pas de temps, les noeuds sont éclatés et le maillage correspond alors à la structure illustrée sur la figure 7.4.

Lorsque la fonction est discontinue au temps initial, il y a plus d'une valeur nodale pour une position nodale. De plus, la dérivée de la fonction est alors indéfinie. Afin de contourner cette difficulté, on modifie la borne inférieure d'intégration en temps (comme en 1D). Le volume de contrôle espace-temps est alors compris entre les temps  $\tau = p$  et  $\tau = 1$ .

### Pas de temps suivants

Après le premier pas de temps, on ajoute d'autres noeuds mobiles pour mieux épouser la courbure du graphe de la température. Pendant un certain nombre de pas de temps subséquents, la position des noeuds ajoutés est inconnue et leur température connue. Lorsqu'un des noeuds d'une courbe de niveau autre que l'interface diphasique rencontre un des noeuds du maillage de base, tous les noeuds de cette courbe de niveau deviennent fixes.

Lorsque les noeuds sont mobiles, les équations sont fortement non-linéaires et plus difficiles à résoudre. Pour le traitement de la discontinuité, il est préférable que les noeuds soient mobiles car le maillage s'adapte à la solution. Ensuite, il devient préférable que les noeuds soient fixes puisque des noeuds mobiles ne sont plus nécessaires. On préfère donc ne pas continuer à suivre le déplacement des courbes de niveau autre que l'interface.

Chacun de ces noeuds restera fixe tant qu'un noeud de l'interface ne le rencontrera pas. Dans ce cas, il devient un noeud de l'interface pour éviter de faire inutilement des éclatements.

### Approximation d'une fonction bilinéaire

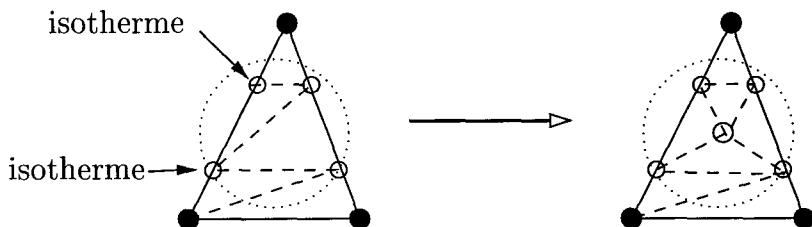


Figure 7.5: Modification d'un quadrangle

Considérons la figure 7.5. On remarque qu'entre les isothermes, le maillage comporte un quadrangle cassé par une arête. Pour améliorer la précision du schéma, on aimerait que la température soit une fonction bilinéaire sur un tel quadrangle. En utilisant un maillage triangulaire, on perd la bilinéarité de la température sur ce quadrangle. Lorsque la fonction  $T$  présente de très forts gradients, la solution numérique peut être fortement influencée par le maillage. Il serait donc préférable que la température soit bilinéaire au-dessus du quadrangle. Dans le cadre de ce travail, la MVFD a été mise en oeuvre pour des maillages à base triangulaire. On ne dispose donc pas, a priori, d'un maillage bien adapté à la situation.

Afin que le maillage triangulaire permette une approximation bilinéaire, on procède comme suit :

1. on enlève l'arête qui traverse le quadrangle ;
2. on ajoute un noeud au centre géométrique du triangle ;
3. on rattache ce noeud aux quatre noeuds du quadrangle ;
4. on impose que la température à ce noeud soit égale à la température moyenne de ses voisins.

De plus, ce noeud ne porte aucune inconnue et se déplace pour rester au centre de son quadrangle.

La température ne devient pas bilinéaire sur le quadrangle. Cependant, la nouvelle approximation de la température se rapproche d'une approximation bilinéaire. En fait, ceci est équivalent à ajouter une autre isotherme sur le quadrangle. Les calculs numériques montrent que les effets de maillage sont pratiquement éliminés. Avec cette approche, le maillage triangulaire permet de bien approximer une fonction qui présente de très forts gradients.

Il y a un désavantage avec cette façon de procéder. Les noeuds aux centres des quadrangles ne portent aucune inconnue. De plus, on ne modifie pas la façon dont on calcule les volumes de contrôle pour les noeuds qui portent une inconnue. Ainsi, *nos volumes de contrôle ne couvrent pas tout le domaine*. On augmente donc artificiellement la valeur de la dérivée seconde.

La valeur de la dérivée augmente puisque lors de son calcul, on intègre la dérivée première qui demeure la même et on divise par une surface qui est maintenant plus petite.

Il aurait été possible de définir de nouveaux volumes de contrôle pour ne pas changer la valeur de la dérivée seconde. Cependant, on a préféré ne pas introduire de nouveaux cas pour que le calcul des équations reste le même pour tous les noeuds.

Afin de faciliter la résolution du système d'équations discrètes lors des premiers pas de temps, on utilise un pas de temps plus petit que le pas de temps par défaut. Par exemple, si le pas de temps par défaut est de  $\Delta\tau = 0.0001$ , les vingt premiers pas de temps seront de  $\Delta\tau = 1 \times 10^{-6}$ .

## 7.6 Nettoyage des noeuds

En 2D, le nombre de noeuds est habituellement assez élevé. Un maillage grossier peut facilement comporter plus de mille noeuds. Dans un problème de changement de phase, l'interface diphasique peut traverser tout le domaine. Il peut donc y avoir plus de mille rencontres. Lors de la prédiction d'une rencontre, on doit souvent réduire le pas de temps pour permettre le rapprochement des noeuds. S'il y a beaucoup de rencontres lors d'une simulation, le nombre de pas temps peut augmenter significativement. On préfère donc enlever (nettoyer) les noeuds mobiles au lieu de faire certaines rencontres. On ne fait des rencontres que pour les noeuds sur le bord du domaine.

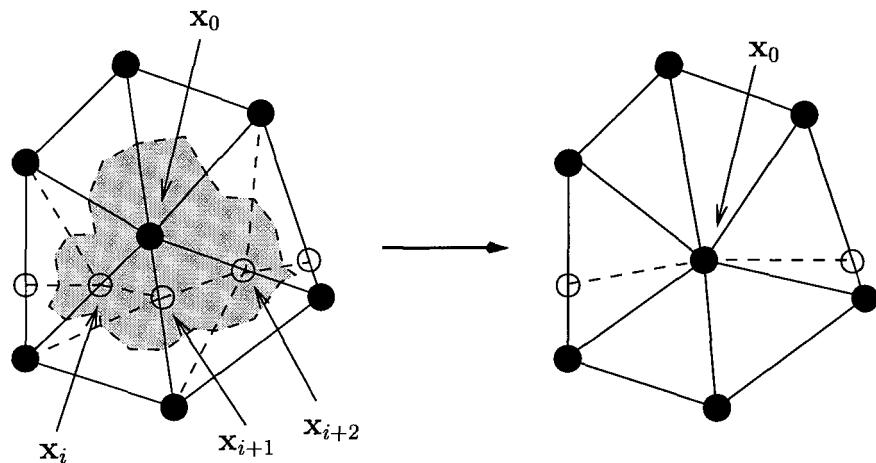


Figure 7.6: Nettoyage des noeuds en 2D

Considérons la figure 7.6. Les noeuds mobiles de sous-indice  $i$ ,  $i + 1$  et  $i + 2$  se dirigent vers le noeud fixe de sous-indice 0. On procède au nettoyage de ces noeuds dans les cas suivants :

1. la distance entre un des trois noeuds mobiles et le noeud 0 est plus petite qu'une longueur de référence (exemple  $1 \times 10^{-6}$ );
2. on prévoit qu'ils renconteront le noeud 0 dans un temps plus petit que le pas de temps par défaut.

Lorsque l'on enlève les noeuds mobiles, le noeud 0 du maillage de base est déplacé sur la position moyenne de ceux-ci. Au pas de temps suivant, le noeud 0 est éclaté au besoin.

# Chapitre 8

## Résultats numériques en 2D

Ce chapitre présente divers résultats obtenus lors de la résolution numérique de l'équation de la chaleur pour des problèmes diphasiques liquide-solide en 2D.

On présente deux types de problèmes comparatifs. Premièrement, on présente des résultats de problèmes à une phase qui sont comparés à ceux obtenus avec d'autres schémas numériques. Ensuite, on présente des résultats obtenus lors de la résolution de problèmes à deux phases.

Lors de la mise-en-oeuvre de la méthode, on a constaté que les problèmes à deux phases sont, du point de vue numérique, beaucoup plus difficiles que les problèmes à une phase. En fait, c'est pour ce type de problèmes qu'on a dû modifier le maillage de type triangulaire avec la méthode décrite dans la section 7.5.2 (page 72).

### 8.1 Condition au bord de type Dirichlet

Afin de pouvoir mesurer les performances du schéma numérique mis en oeuvre, divers tests ont été effectués. Ces tests sont tirés des articles de Gong et Mujundar[13] ainsi que Pham[18]. Les résultats numériques obtenus avec la MVFD sont comparés avec ceux obtenus par les auteurs de ces articles qui utilisent d'autres méthodes numériques.

#### 8.1.1 Problème 1, front de solidification (test à une phase)

Ce test est tiré de l'article de Pham[18]. Il est semblable au problème 1D dont la solution analytique est présentée dans le chapitre 2 à la page 17. Il s'agit d'une enceinte rectangulaire remplie d'un liquide à la température de solidification. C'est une enceinte carrée de 74mm de coté. Les parois est, nord et ouest sont parfaitement isolées, la

Propriétés	solide	liquide
$k$ ( $W/m \cdot K$ )	1	1
$c_p$ ( $J/kg \cdot K$ )	2000.	2000.
$\rho$ ( $kg/m^3$ )	1000.	1000.
$L$ ( $J/kg$ )	200000	
$T_f$ ( $^{\circ}C$ )	0	

Tableau 8.1: Propriétés physiques pour le problème 1

température de la paroi sud est abaissée de 0 à  $-30^{\circ}C$  au temps initial. Les propriétés caractérisant le solide et le liquide sont présentées dans le tableau 8.1.

La figure 8.1 (page 79) compare la position calculée numériquement (en pointillés) du front de solidification avec la solution analytique (représentée par une ligne continue). On constate que les résultats concordent très bien avec la solution analytique. De plus, l'erreur sur la position de l'interface ne s'accentue pas au cours de la simulation.

Afin de mesurer la précision de différents schémas numériques d'éléments finis, Pham s'est servi du temps nécessaire pour que le front de solidification atteigne la position  $y = 74mm$ . La solution analytique est  $20020s$ . Le tableau 8.2 (page 79) présente le temps calculé avec la MVFD et ceux des autres schémas. Le pas de temps cible et la discrétisation du domaine sont les mêmes pour tous les schémas numériques. Nos résultats sont plus précis que ceux des autres méthodes. L'erreur relative pour nos résultats est de 0.01%. Elle varie de 0.3% à 1.25% pour les autres méthodes.

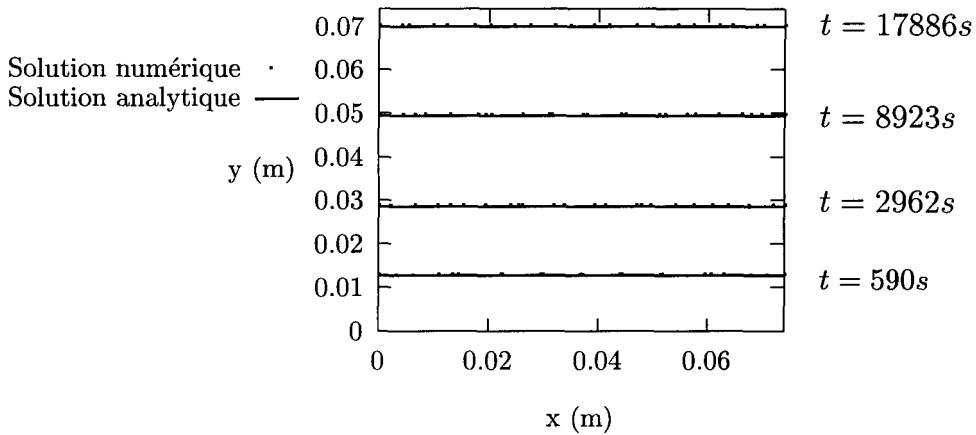


Figure 8.1: Évolution du front de solidification pour le problème 1

Méthode	Temps de solidification
Exacte	<u>20020</u>
MVFD	<u>20023</u>
TD-Comini76-Corr	20126
TD-Morgan-Corr	20118
TD-Pham-Corr	20118
TL-Iter	20118
HL-Direct	20270
HL-Comini2	20083

Tableau 8.2: Temps de solidification pour le problème 1

### 8.1.2 Problème 2, front de solidification (test à deux phases)

Un problème commun aux méthodes avec maillage fixe est l'apparition d'oscillations de la température près de l'interface ([13, 18]). *Ces oscillations sont dues au schéma numérique de résolution et ne sont pas physiques.* Pour des problèmes où seule la conduction thermique est considérée, il y a atténuation des oscillations. Dans de tels cas, les oscillations ne causent pas trop de problèmes. Cependant, pour des problèmes transitoires en présence de convection, ces oscillations peuvent significativement influencer la solution. Pour des problèmes de convection-diffusion, les erreurs vont plutôt s'accumuler. Après un certain temps, la solution numérique peut être très différente de la solution véritable. Ces problèmes d'oscillations sont particulièrement importants

lorsqu'il s'agit de problèmes à deux phases.

Ce problème 2 phases est tiré de l'article de Gong et Mujundar[13]. Il est analogue au problème précédent. Il s'agit d'une enceinte rectangulaire de  $0.5m$  de largeur (parois sud et nord) par  $2m$  de profondeur (parois est et ouest). Cette enceinte est remplie d'eau à  $10^{\circ}C$ . Les parois est, nord et ouest sont parfaitement isolées. La température de la paroi sud est abaissée à  $-20^{\circ}C$  au temps initial. Les propriétés du solide et du liquide sont présentées dans le tableau 8.3.

Propriétés	solide	liquide
$k$ ( $W/m \cdot K$ )	2.22	0.556
$c_p$ ( $J/kg \cdot K$ )	1762	4226
$\rho$ ( $kg/m^3$ )	1000.	1000.
$L$ ( $J/kg$ )	338000	
$T_f$ ( $C$ )	0	

Tableau 8.3: Propriétés physiques pour le problème 2

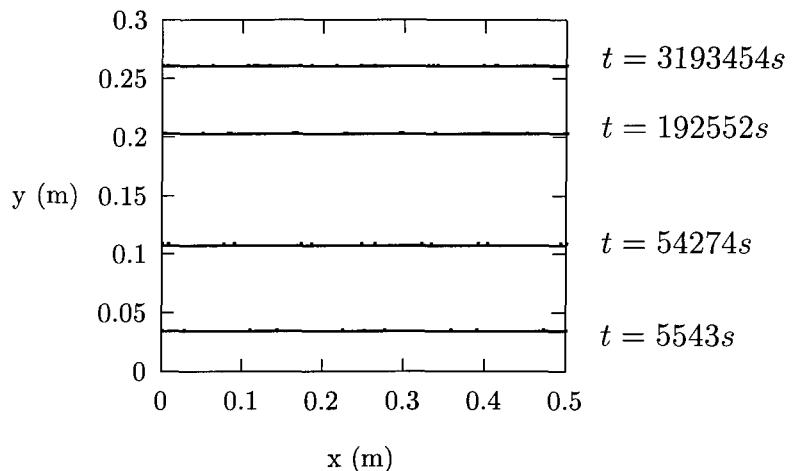


Figure 8.2: Évolution du front de solidification pour le problème 2

L'évolution du front de solidification est présentée sur la figure 8.2. Tout comme le problème précédent, la solution numérique est en accord avec la solution analytique.

La discréétisation utilisée comporte moins de noeuds que celle de Gong et Mujundar. La longueur moyenne des segments du maillage pour la MVFD est de  $0.05m$ .

Gong et Mujundar utilisent un maillage quadrangulaire avec des carrés de  $0.025m$  de coté. Le pas de temps utilisé de  $200s$  est le même.

Dans leur article, Gong et Mujundar rapportent des oscillations de la température pour les noeuds près de la zone du changement de phase. Ces oscillations ont une amplitude maximale près de la frontière comportant une condition de Dirichlet. Pour les tests qu'il a effectués, Pham[18] rapporte aussi avoir ce type d'oscillations. Il faut préciser que ces auteurs ont utilisé des méthodes de capacité thermique. Avec ces méthodes, des oscillations dans la zone du changement de phase sont fréquentes.

La figure 8.3 présente l'évolution de la température pour un noeud adjacent à la frontière comportant une condition de type Dirichlet. On constate que la solution numérique ne présente aucune oscillation.

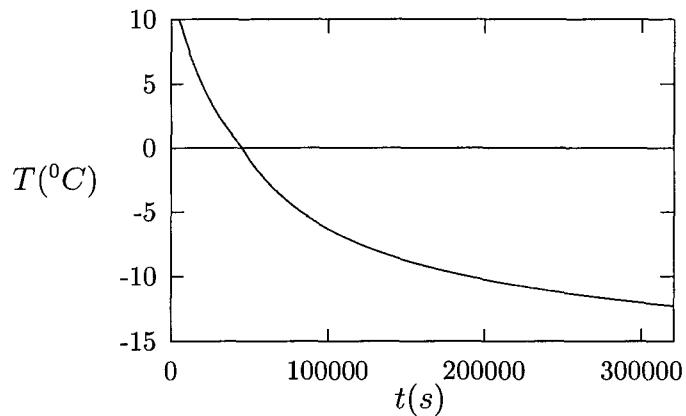


Figure 8.3: Évolution de la température pour un noeud adjacent à la frontière

### 8.1.3 Problème 3, solidification dans un coin infini (test à une phase)

Propriétés	solide	liquide
$k$ ( $W/m \cdot K$ )	1	1
$c_p$ ( $J/kg \cdot K$ )	1	1
$\rho$ ( $kg/m^3$ )	1	1
$L$ ( $J/kg$ )	1.5613	
$T_f$ ( $C$ )	0	

Tableau 8.4: Propriétés physiques pour le problème 3

Le problème 3 est tiré des articles de Pham[18] et Gong et Mujundar[13]. C'est le test du coin infini dont la solution analytique, mais approximative, est présentée dans le chapitre 2 à la page 19. Les valeurs qui caractérisent le solide et le liquide sont présentées dans le tableau 8.4. Le domaine est un carré de  $100m$  de coté. On utilise la même discrétisation de base du domaine que Pham. On a des noeuds à tous les  $10m$ . Le pas de temps de  $3s$  est le même que celui de Pham. Initialement, le liquide est à la température de solidification ( $T_i = 0^0C$ ). Au temps initial, la température sur les parois qui correspondent aux axes  $x = 0$  et  $y = 0$  est abaissée à  $-1^0C$

Pour mesurer la précision de différents schémas numériques d'éléments finis, Pham s'est servi du temps calculé numériquement pour que le front de solidification atteigne le noeud sur la diagonale  $x = y$  à la position  $x = y = 40m$ . La solution approximative rapportée par Pham est de  $t_{fin} = 1110s$ . Cependant, en utilisant la méthode décrite dans l'article de Rathjen et Jiji[20], nous avons calculé un temps de  $1130.93s$ . Afin de vérifier laquelle des deux solutions est la plus précise, on a de nouveau résolu ce problème avec la MVFD en utilisant un maillage très fin et un pas de temps de  $1s$ . Le temps calculé numériquement est alors de  $t_{fin} = 1131.4s$ . On a donc choisi  $t_{fin} = 1130.93s$  comme temps de référence.

Le tableau 8.5 (page 83) présente le temps ( $t_{fin}$ ) calculé par la MVFD et par d'autres schémas pour un même pas de temps et une même discrétisation du domaine. Nos résultats sont plus précis que ceux des autres méthodes. L'erreur relative varie de 2.1% à 2.3% pour les méthodes de type TD, elle est de 11% pour les méthodes HL. L'erreur relative pour la MVFD est de 1.1%.

Méthode	temps calculé
Exakte	<u>1130.93</u>
MVFD	<u>1118</u>
TD-Comini76-Corr	1104
TD-Morgan-Corr	1104
TD-Pham-Corr	1107
TL-Iter	1107
HL-Direct	1000
HL-Comini2	1261

Tableau 8.5: Temps de solidification pour le problème 3

Sur la figure 8.4, on présente les résultats numériques obtenus avec la MVFD et la solution approximative de Rathjen et Jiji.

Les résultats obtenus sont en accord avec la solution approximative en tout point du domaine.

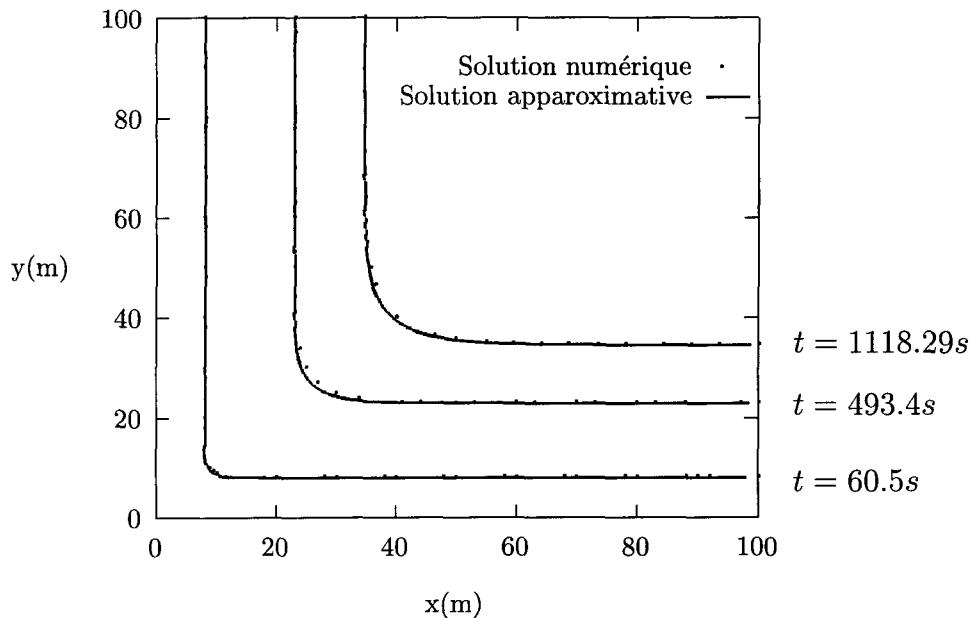


Figure 8.4: Évolution du front de solidification pour le problème 3

#### 8.1.4 Problème 4, solidification dans un coin infini (test à deux phases)

Propriétés	solide	liquide
$k$ ( $W/m \cdot K$ )	1	1
$c_p$ ( $J/kg \cdot C$ )	1	1
$\rho$ ( $kg/m^3$ )	1	1
$L$ ( $J/kg$ )	.25	
$T_f$ ( $C$ )	0	

Tableau 8.6: Propriétés physiques pour le problème 4

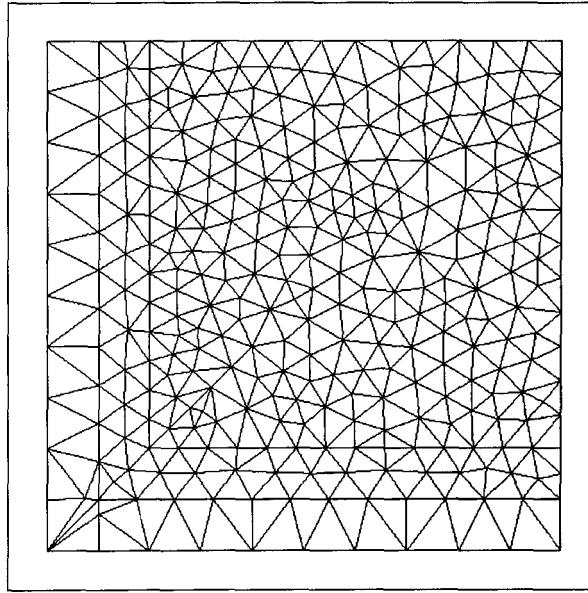


Figure 8.5: Maillage de base pour le problème 4

Le problème 4 est tiré de l'article de Gong et Mujundar[13]. Les propriétés du solide et le liquide sont présentées dans le tableau 8.6. Le domaine est un carré de  $100m$  de coté. La discréétisation initiale de 311 noeuds du domaine n'est pas uniforme. On présente sur la figure 8.5 le maillage de base utilisé. Le pas de temps par défaut est  $\Delta t = 1s$ . Initialement, le liquide est à une température  $0.3^0C$ . La température aux parois correspondant aux axes  $x = 0$  et  $y = 0$  est abaissée à  $-1^0C$  au temps initial.

La figure 8.6 compare les résultats numériques obtenus avec la MVFD avec la solution analytique de Rathjen et Jiji. Les résultats numériques sont en accord avec la solution analytique. Cependant, on peut remarquer que la position de l'interface est en avance sur la solution approximative. Cette avance est significative près de la diagonale  $x = y$ .

Dans la section 7.5.2, on a discuté de l'augmentation artificielle de la valeur de la dérivée seconde (viscosité numérique artificielle). On rappelle que cette modification de la dérivée seconde est causée par notre façon de choisir les volumes de contrôle pour ce cas. Il est fort possible que l'erreur soit causée par cette augmentation de la valeur de la dérivée seconde. Lorsque la valeur de la dérivée seconde augmente, le taux de variation de la température par rapport au temps augmente. Ainsi, on augmente la vitesse du déplacement de l'interface.

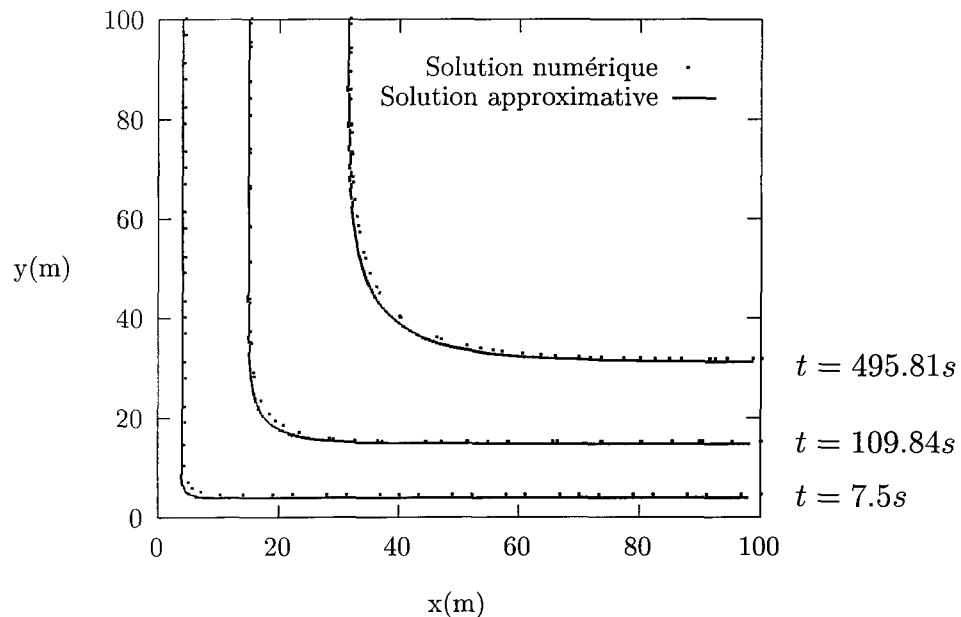


Figure 8.6: Évolution du front de solidification pour le problème 4

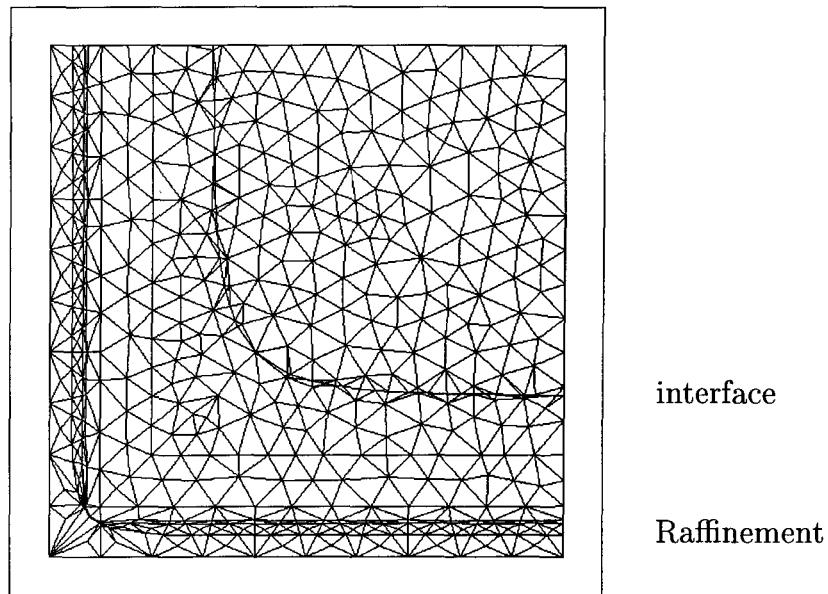


Figure 8.7: Maillage du problème 4 au temps  $t = 495.81s$

La figure 8.7 montre le maillage au temps  $t = 495.81s$ . On voit bien les arêtes qui correspondent à la position de l'interface. De plus, le maillage près des axes  $x = 0$  et  $y = 0$  illustre bien le raffinement du maillage lorsque l'on utilise la méthode de raffinement de la section 7.5.2.

### Effets du maillage sur la solution

Sur la figure 8.8 de la page 87, on présente les courbes de niveau  $T = 0^0C$  et  $T = 0.3^0C$  après vingt pas de temps ( $t = 4s$ ). On rappelle que pour faciliter la résolution, les pas de temps au début de la simulation sont plus petits que le pas de temps par défaut de  $1s$ .

On remarque que les courbes de niveau sont parfaitement parallèles aux axes  $x = 0$  et  $y = 0$ . L'approximation quasi-bilinéaire de la fonction avec la méthode décrite dans la section 7.5.2 permet d'éliminer les déformations de la solution qui sont causées par l'approximation linéaire.

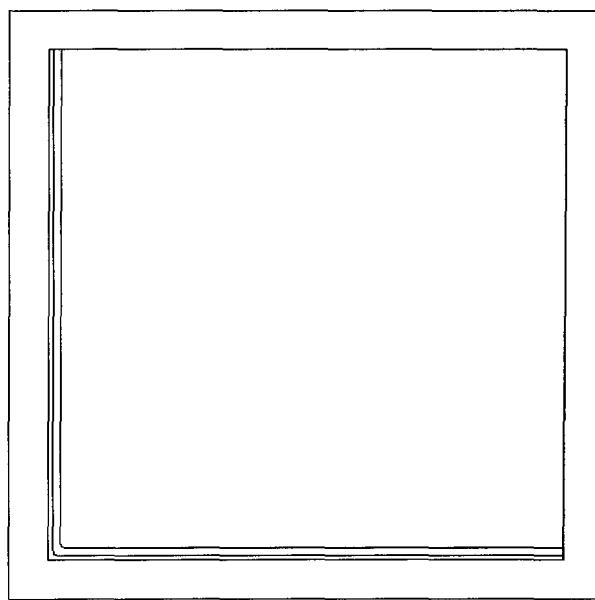


Figure 8.8: Courbes de niveau après 20 pas de temps.

#### 8.1.5 Problème 5, gestion de plusieurs interfaces diphasiques

Le problème 5 illustre la possibilité de gérer plus d'un front de solidification ou de fusion dans une géométrie complexe avec la MVFD. En plus d'avoir à gérer le déplacement de plusieurs fronts, ce problème demande de gérer la rencontre et la sortie du domaine de plusieurs fronts de solidification.

La simulation se déroule dans l'enceinte fermée qui est illustrée sur la figure 8.9 (page 88). Les propriétés physiques sont celles de l'aluminium et sont présentées dans le tableau 8.7 à la page 88. La température initiale est de  $1000K$  pour tout le domaine. La température sur la paroi intérieure et les parois est et ouest (figure 8.9, page 88) est abaissée à  $300K$  au temps initial. Trois fronts de solidification sont ainsi amorcés.

Propriétés	Solide	Liquide
$k$ ( $W/m \cdot K$ )	237.	218.
$c_p$ ( $J/kg \cdot K$ )	903.	1146.
$\rho$ ( $kg$ )	2702.	2702.
$L$ ( $J/kg$ )	399000.	
$T_f$ ( $K$ )	933.	

Tableau 8.7: Propriétés physiques pour le problème 5

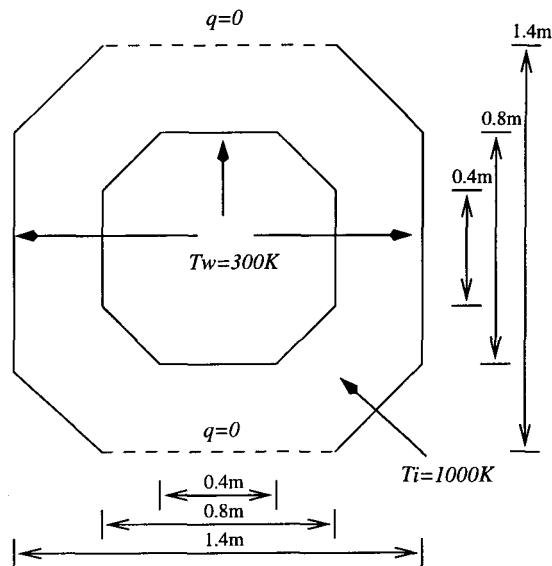


Figure 8.9: Géométrie et condition au bord pour le problème 5

Les résultats obtenus sont présentés sur les figures 8.10, 8.11, 8.12 et 8.13 des pages suivantes.

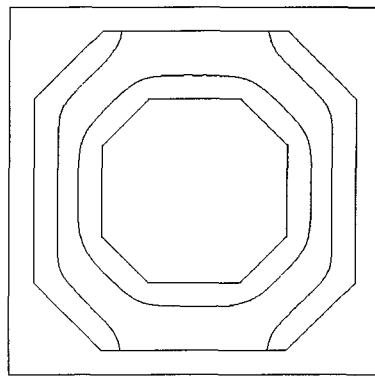


Figure 8.10: Fronts de solidification à  $t = 66.06s$

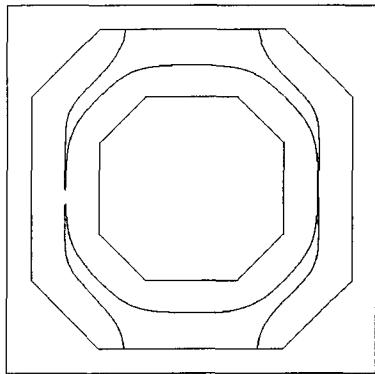


Figure 8.11: Fronts de solidification à  $t = 123.092s$

La figure 8.11 présente la position des fronts de solidification lors de leur rencontre à  $t = 123.092s$ . On constate que la solidification sur le côté gauche de la figure est légèrement plus avancée que sur le côté droit. Ceci est une erreur numérique causée par le schéma numérique ou la non symétrie du maillage. Le problème étant symétrique, les fronts devraient se rencontrer en même temps.

La figure 8.12 montre la forme des interfaces à  $t = 141.259s$ . En l'espace de seulement 18s, le liquide entre l'hexagone au centre et les parois est et ouest du périmètre de l'enceinte a pratiquement disparu.

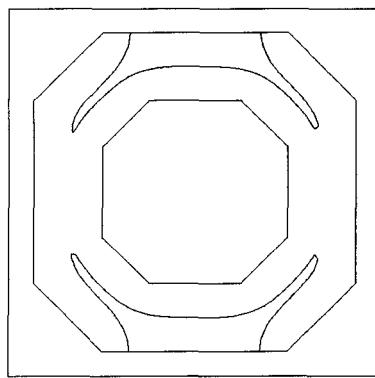


Figure 8.12: Fronts de solidification à  $t = 141.259s$

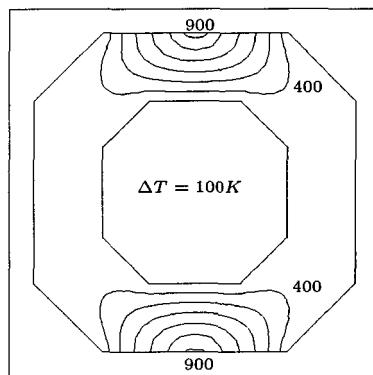


Figure 8.13: Profil de température à  $t = 485.453s$

La figure 8.13 présente le profil de température immédiatement avant la disparition complète des interfaces. Les courbes de niveau sont à tous les  $100^0$ . On remarque la symétrie des résultats.

Le problème 5 a permis d'illustrer qu'il est possible avec cette méthode de maillage mobile de gérer les situations suivantes en 2D :

- le déplacement de plus d'une interface diphasique ;
- la rencontre d'interfaces ;
- la sortie du domaine d'une ou plusieurs interfaces.

## 8.2 Condition au bord de type Neumann

Les problèmes suivants illustrent la possibilité de simuler des problèmes de changement de phase lorsque la condition au bord qui dirige l'évolution de la température est de type Neumann. Pour de tels problèmes, la substance est refroidie (chauffée) pour la solidifier (la fondre). Deux problèmes sont présentés. Le premier est un test pour évaluer la précision de la méthode. Le deuxième problème montre qu'il est possible avec cette méthode de maillage mobile de résoudre des problèmes où le déplacement de l'interface est fortement influencé par le domaine de résolution.

### 8.2.1 Problème 6, test à une phase de solidification avec condition de flux

Ce problème est analogue au test 1D effectué dans le chapitre 4 à la page 47. C'est un test de solidification de l'aluminium dans une enceinte fermée de  $0.5m$  de largeur (parois sud et nord) par  $1.0m$  de profondeur (parois est et ouest). L'aluminium liquide est initialement à sa température de solidification ( $933K$ ) et elle est refroidie sur la paroi sud. Les trois autres parois sont parfaitement isolées. Le flux de chaleur est de  $50kW/m^2$ . Les propriétés physiques de l'aluminium sont les mêmes que celles du problème 5. Elles sont présentées dans le tableau 8.7 à la page 88.

La figure 8.14 compare les résultats obtenus avec la solution analytique. La solution analytique est présentée avec des lignes continues et les résultats numériques avec des pointillés. La solution numérique est en accord avec la solution analytique. De plus, l'erreur ne s'accentue pas. Au temps final, l'erreur absolue maximale est de  $0.0003m$  (1.4%). Cependant, on rappelle que cette solution analytique est une fonction de série de puissances dont on ne connaît que les premiers termes.

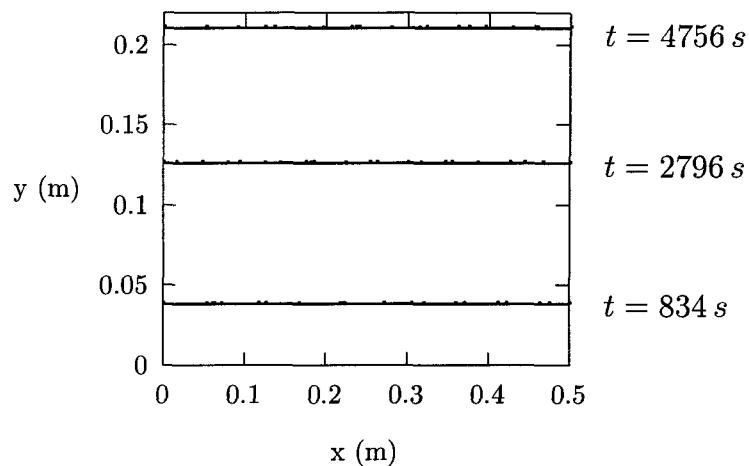


Figure 8.14: Évolution du front de solidification pour le problème 6

### 8.2.2 Problème 7, expérimentation numérique avec condition de flux

Il s'agit d'un problème de fusion dans une géométrie complexe. Celle-ci est présentée sur la figure 8.15. L'aluminium est initialement à une température de  $300K$  et un flux de chaleur de  $-50kW$  ( $100W/m^2$ ) est ensuite appliqué sur une partie de la paroi sud. La chaleur passe de l'extérieur vers l'intérieur du domaine et on a un réchauffement de la paroi.

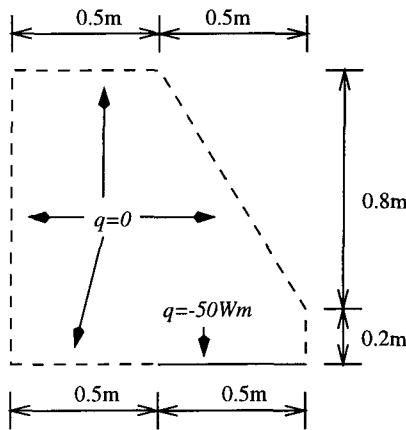


Figure 8.15: Géométrie et condition aux bord pour le problème 7

Les résultats sont présentés sur les figures 8.16, 8.17, 8.18 et 8.19.

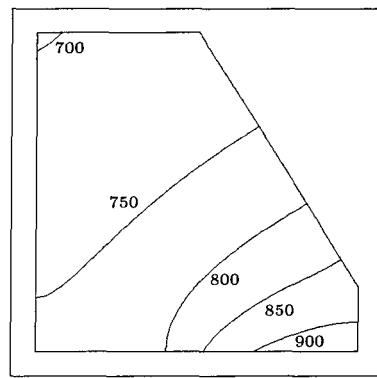


Figure 8.16: Profil de température à  $t = 18372s$

La solution numérique qui correspond au début de la fusion est présentée sur la figure 8.16.

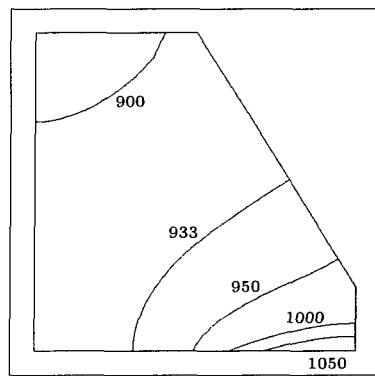


Figure 8.17: Profil de température à  $t = 21580s$

Sur les figures 8.17, 8.18 et 8.19, on montre l'évolution de la solution au cours de la simulation.

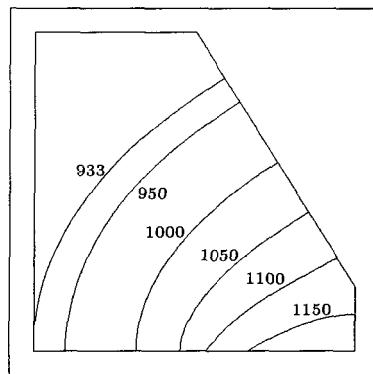


Figure 8.18: Profil de température à  $t = 39769s$

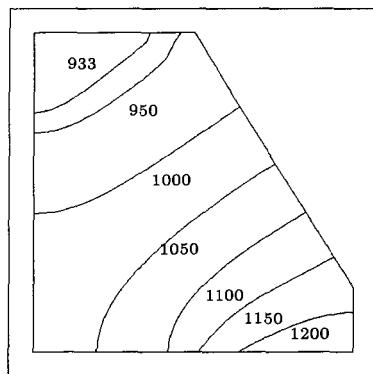


Figure 8.19: Profil de température à  $t = 46117s$

Sur la figure 8.19 on constate que la forme de l'interface est convexe. L'interface est donc passée d'une forme concave à une forme convexe. Même si la forme de l'interface évolue et se modifie, le déplacement des noeuds sur le maillage de base permet de bien en tenir compte.

Ce test a permis de montrer qu'il est possible avec cette méthode de maillage mobile de :

- faire entrer au cours d'une simulation une interface diphasique dans le domaine de résolution ;
- bien suivre le déplacement de l'interface même si la forme de celle-ci évolue et subit des changements importants.

Il est important de préciser que ces difficultés ne sont inhérentes qu'aux méthodes de maillage mobile, et non pas aux méthodes de maillage fixe.

# Chapitre 9

## Algorithme de résolution

Ce chapitre porte sur la description des étapes de l'algorithme de résolution utilisé pour les problèmes 1D et 2D.

### 9.1 Algorithme de résolution

Le problème solutionné est transitoire, on cherche à connaître l'évolution d'un ou de plusieurs fronts de solidification et/ou de fusion pour un intervalle de temps  $[0, t_{fin}]$ . Lors de chacune des résolutions du système d'équations, on choisit un pas de temps cible. La valeur des pas de temps est cependant variable. À l'approche d'une rencontre, le pas de temps est diminué pour permettre le rapprochement des noeuds. Lors d'une rencontre, le pas de temps est inconnu et est traité comme une variable du système d'équations. L'exécution d'un pas de temps se fait en plusieurs étapes que voici :

1. détermination du pas de temps et prédiction des rencontres possibles ;
2. détection de l'entrée dans le domaine de l'interface ;
3. préconditionnement du système d'équations ;
4. résolution du système d'équations ;
5. validation des résultats.

### 9.2 Résolueur

À tous les pas de temps, on doit résoudre un système d'équations non-linéaire. Celui-ci est résolu avec une méthode de Newton-Raphson. Le système linéaire présent dans la

méthode de Newton-Raphson est résolu avec l'algorithme GMRES de Y. Saad et M. Schultz[22].

La précision demandée est de  $1 \times 10^{-12}$  pour le résidu total. Le résidu total est la norme euclidienne du vecteur des résidus. Si cette précision n'est pas obtenue, mais que le résidu total est inférieure à  $1 \times 10^{-9}$ , on accepte la solution. Dans le cas contraire, on recommence la résolution du système d'équations avec un pas de temps plus petit. Habituellement, une précision de  $1 \times 10^{-12}$  est obtenu avec le pas de temps initialement prévu.

### 9.3 Prédicteur

Lors de la première étape de l'algorithme de résolution, on tente de prédire le plus précisément possible les temps des rencontres. Lors d'une rencontre, la seule valeur inconnue pour tous les noeuds de la rencontre est le pas de temps.

La prédiction du pas de temps nécessaire à la rencontre est effectuée en résolvant l'équation non-linéaire correspondante. Lors de la résolution de cette équation, la seule inconnue considérée est le pas de temps, alors que les autres variables sont fixées (pour cette prédiction). Pour résoudre cette équation, l'algorithme de Newton est utilisé. Les résultats obtenus sont satisfaisants. Les inversions de noeuds lors de la résolution de tout le système d'équations sont généralement évitées. Lors d'une inversion, on doit diminuer le pas de temps. Si on ne détecte l'inversion qu'à la fin de la résolution du système d'équations, on doit recommencer la résolution.

## 9.4 Détection de l'entrée dans le domaine de l'interface

Pour être certain que l'on ne manque pas le début d'un changement de phase sur une partie du bord du domaine, à tous les pas de temps, on utilise un prédicteur pour vérifier si la température d'un noeud sur le bord du domaine atteindra la température de fusion au cours du prochain pas de temps. Pour la prédition, on résoud numériquement l'équation discrète au noeud considéré. La température au temps suivant est alors posée égale à la température de fusion. On utilise donc l'algorithme suivant :

- 1° si la température d'un noeud se rapproche de la température de fusion ( $\Delta\theta \approx 1 \times 10^{-2}$ ), on évalue le pas de temps nécessaire pour que la température à ce noeud atteigne la température de fusion ;
- 2° lorsque le pas de temps évalué en 1° est plus petit que le pas de temps cible, on procède comme suit :
  - (a) on pose le pas de temps  $\Delta t$  inconnu ;
  - (b) la température au temps suivant ( $t = t_1$ ) du noeud considéré est posée égale à la température de fusion ;
  - (c) l'équation pour le pas de temps est celle du noeud considéré ;
  - (d) on résoud tout le système d'équations avec le pas de temps en inconnu.

Le maillage est ensuite modifié pour tenir compte de l'entrée dans le domaine de l'interface. Lors des tests effectués, cet algorithme a permis de bien débuter les changements de phase à partir du bord du domaine.

## 9.5 Préconditionnement

Afin d'améliorer la convergence de l'algorithme de Newton-Raphson lors de la résolution du système d'équations non-linéaires, on préconditionne ce système d'équations.

Soit :

- $x_j^n$  la dernière approximation de  $x_j$  ;
- $f_j$  une équation du système ;
- $\mathbf{x} = (x_0^{n+1}, x_1^{n+1}, \dots, x_i^n, x_{i+1}^n, \dots, x_m^n)$  le vecteur des inconnues ;
- $epsres$  la précision demandée pour toutes les équations ;
- $maxite$  le nombre maximal d'itérations ;
- $res$  le résidu total ;
- $nbvariables$  le nombre de variables.

L'algorithme utilisé est le suivant :

$$nbinconnues = nbvariables$$

Pour  $n = 0$ ,  $n < maxite$  et  $nbinconnues > 0$

$$res = 0$$

$$nbinconnues = nbvariables$$

Pour  $j = 0$ ,  $j < nbvariables$ ,

$$f_j = f_j(\mathbf{x}^{n+1})$$

$$res = res + f_j \cdot f_j$$

si  $f_j > epsres$

$$x_j^{n+1} = x_j^n - \frac{f_j(\mathbf{x}^{n+1})}{\frac{\partial f_j}{\partial x_j} \mid \mathbf{x}^{n+1}}$$

autrement

$$nbinconnues = nbinconnues - 1$$

fin

$$res = \sqrt{res}$$

$$n = n + 1$$

fin.

Cet algorithme est semblable à l'algorithme de Gauss-Siedel qui est utilisé pour la résolution de systèmes linéaires.

Lors des tests numériques, des résultats intéressants ont été obtenus en utilisant cet algorithme. En fait, cet algorithme permet de faire non pas seulement du préconditionnement, mais de résoudre le système d'équations non-linéaires. Pour les problèmes 2D, la convergence de cet algorithme est meilleure que celle de l'algorithme de Newton-Raphson. Habituellement, moins de 20 itérations sont nécessaires pour résoudre des systèmes d'équations qui comportent plus de mille inconnues.

L'étape où l'on vérifie l'ordre de grandeur du résidu des équations avant de procéder à une approximation linéaire de la solution comporte deux avantages :

- elle permet d'éviter de calculer inutilement la dérivée directionnelle de la fonction ;
- elle permet d'obtenir des résidus du même ordre de grandeur pour toutes les équations.

On ne peut pas utiliser uniquement cet algorithme de résolution. La convergence de celui-ci n'est pas assurée. Lorsque le système d'équations n'est pas résolu après un nombre déterminé d'itérations, on utilise l'algorithme de Newton-Raphson pour obtenir la précision recherchée.

## 9.6 Validation des résultats

Après chacune des résolutions, on vérifie la validité des résultats. Cette étape est nécessaire car deux types d'erreurs peuvent se produire :

1. l'inversion de noeuds lorsque des noeuds sont mobiles ;
2. le passage d'un noeud d'une phase à l'autre.

Ces erreurs sont causées par l'approximation linéaire des équations lors de la résolution du système non-linéaire.

Lorsque de telles erreurs se produisent, certaines équations ne sont plus définies. S'il y a inversion de noeuds, les dérivées sont indéfinies. S'il y a un passage d'une phase à l'autre d'un noeud voisin à l'interface, les équations à l'interface ne sont plus définies (la séparation entre le liquide et le solide devient indéterminée).

Afin d'éviter que ces erreurs nuisent à la résolution du système d'équations, on les repère en premier lieu dans l'algorithme de préconditionnement. On diminue alors le pas de temps pour faciliter la résolution.

Lorsque l'on utilise la méthode de Newton-Raphson pour résoudre le système d'équations, la validation se fait à la fin de la résolution. Si une erreur est repérée dans la solution, on doit recommencer la résolution de tout le système d'équations. Heureusement, ces erreurs se produisent habituellement lors du conditionnement. Il est rare que l'on doive recommencer la résolution de tout le système d'équations.

# Conclusion

Dans ce mémoire, on a présenté dans le contexte de l'équation de la chaleur, une nouvelle méthode de résolution d'équations aux dérivées partielles appelée méthode des volumes finis dirigés (MVFD). La MFVD est une méthode de volumes finis espace-temps. Les volumes de contrôle considérés sont en espace et en temps. On a vu que la MVFD permet le déplacement, la rencontre et l'éclatement de noeuds. On rappelle que l'éclatement de noeuds permet au maillage de s'adapter à la solution future.

La MVFD a été utilisée pour résoudre des problèmes de changement de phase de type Stefan. Ces problèmes sont caractérisés par le déplacement d'une frontière qui sépare le liquide et le solide (l'interface diphasique). On a donc résolu, en 1D et 2D, l'équation aux dérivées partielles

$$\frac{\partial H(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T(\mathbf{x}, t)) = 0, \quad (9.1)$$

où :

$$H = \begin{cases} \rho c_{ps} T, & T \leq T_f \quad (\text{solide}) \\ \rho c_{ps} T_f + \rho c_{pl}(T - T_f) + \rho L, & T \geq T_f \quad (\text{liquide}) \end{cases},$$

avec diverses conditions au bord et initiales.

La MVFD permet le déplacement des noeuds du maillage. Afin de modéliser le déplacement de l'interface diphasique, on a discrétisé celle-ci avec des noeuds mobiles. De plus, pour la résolution de problèmes où la fonction  $T$  présentait une discontinuité au temps initial, on a permis le déplacement d'autres noeuds. Pour connaître le déplacement des noeuds mobiles, on a assigné une équation discrète à ces derniers.

En plus de considérer les positions nodales comme pouvant être inconnues, le pas de temps peut lui aussi être inconnu. Le pas de temps est mis en inconnu pour deux types de situation :

- lors de la rencontre de noeuds ;
- lorsque la température d'un noeud au bord du domaine atteint la température de fusion (ou de solidification).

Lorsque le pas de temps était inconnu, on lui assignait une équation discrète.

Le système d'équations discrètes résolu pouvait être constitué d'équations pour les valeurs nodales (la température), les positions nodales et le pas de temps. Pour résoudre ce système d'équations non-linéaire, on a utilisé un algorithme de conditionnement en combinaison avec une méthode de Newton-Raphson. L'algorithme de conditionnement utilisé permet dans bien des cas de résoudre le système d'équations plus rapidement que la méthode de Newton-Raphson.

Divers tests numériques sont présentés. Pour des problèmes 1D et 2D, on a présenté des résultats qui ont été comparés à des solutions analytiques. Ces tests montrent que la méthode permet d'obtenir des résultats très précis. De plus, pour des problèmes 2D, on a comparé nos résultats avec ceux d'autres schémas numériques de résolution. Pour une même discrétisation de base du domaine et un même pas de temps, la MVFD a permis d'obtenir de meilleurs résultats.

On a ensuite présenté des tests originaux. Ces tests ont montré qu'il est possible avec cette méthode de maillage mobile de considérer le déplacement, la rencontre et la disparition de plus d'une interface diphasique.

Les tests comparatifs et les tests originaux ont permis d'illustrer que la méthode permet d'éliminer complètement les oscillations. Ces oscillations constituent un désavantage majeur des autres méthodes dites de type maillage fixe.

Bien que la méthode utilisée comporte de grands avantages, elle comporte aussi certains désavantages. Les deux principales difficultés d'utilisation de la MVFD que l'on a constatées sont :

- la complexité des équations de discrétisation, car on travaille dans un espace de dimension supérieure (on ajoute la dimension du temps) ;
- la mise-en-œuvre de librairies informatiques pour gérer les déformations du maillage (particulièrement en 2D).

La formulation mathématique de la MVFD est basée sur les équations de conservation de la mécanique des milieux continus. Sa formulation générale permet qu'elle soit utilisée pour la résolution de problèmes plus complexes. Des problèmes plus généraux où on considère la convection ainsi que des problèmes où le changement de phase a lieu sur un intervalle de température pourront fort probablement être résolus avec cette méthode.

## Bibliographie

- [1] M. R. Albert et K. O'Neill. *The use of Transfinite Mappings with Finite Elements on a moving Mesh for Two Dimensional Phase Change*. SIAM, 1983.
- [2] M. R. Albert et K. O'Neill. Moving boundary-moving mesh analysis of phase change using finite elements with transfinite mappings. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 23:591–607, 1986.
- [3] G. Bell. On the performance of the enthalpy method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 25:587–589, 1982.
- [4] R. Bonnerot et P. Jamet. Numerical computation of the free boundary for the two-dimensional stefan problem by space-time finite elements. *Journal of Computational Physics*, 25:163–181, 1977.
- [5] H. Budhia et F. Kreith. Heat transfer with melting or freezing in a wedge. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 16:195–211, 1973.
- [6] S. Candel. *Mécanique des fluides*. Dunod, 1995.
- [7] J. Crank. How to deal with moving boundaries in thermal problems. *Numerical Methods in Heat Transfer*, pages 177–200. John Wiley And Sons Ltd, 1981.
- [8] Isaacson Evans et MacDonald. Stefan-like problems. *Quarterly Applied Mathematics*, 8:312–319, 1950.
- [9] S. Frigon. Une méthode de volumes finis dirigés pour les problèmes hyberboliques en une dimension. Mémoire de maîtrise, Université Laval, 1995.
- [10] S. Frigon et P. Joyal. A directional finite volume method for advection-dominated problems. Université du Québec à Chicoutimi, 1995.

- [11] S. Frigon et P. Joyal. A directional finite volume method for advection-dominated problems, part II. Université du Québec à Chicoutimi, 1995.
- [12] S. Ghosh et S. Moorthy. An arbitrary lagrangian-eulerian finite-element model for heat transfer analysis of solidification processes. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 23:327–350, 1993.
- [13] Z. Gong et A. Mujundar. Noniterative procedure for the finite-element solution of the enthalpy model for phase-change heat conduction problems. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 27:437–446, 1995.
- [14] M. Lacroix et A. Garon. Numerical solution of phase change problems: an eulerian-lagrangian approach. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 19:57–78, 1992.
- [15] R. Lee et W. Chiou. Finite-element analysis of phase-change problems using multilevel techniques. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 27:277–290, 1995.
- [16] D.R. Lynch et K. O'Neill. Continuously deforming finite elements for the solution of parabolic problems, with and without phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 17:81–96, 1981.
- [17] M.N. Osizik. *Heat Conduction*. John Wiley And Sons Ltd, 1990.
- [18] Q.T. Pham. Comparaison of general-purpose finite-element methods for the stefan problem. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 27:417–435, 1995.
- [19] G. Poots. An approximate treatment of a heat conduction problem involving a two-dimensional solidification front. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 5:339–348, 1961.
- [20] K.A. Rathjen et L.M. Jiji. Heat conduction with melting or freezing in a corner. *Journal of Heat Transfer*, pages 101–109, Février 1971.
- [21] S.R. Runnels et G.F. Carey. Finite element simulation of phase change using capacitance methods. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 19:13–30, 1991.

- [22] Y. Saad et M. H. Schultz. A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, research report yaleu/dcs/rr-254. *SIAM*, 7:856–869, 1986.
- [23] V. Voller et M. Gross. Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 24:545–556, 1980.
- [24] V. Voller et C.R. Swaminathan. Fixed grid techniques for phase change problems: A review. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30:875–898, 1990.
- [25] J. Yoo et B. Rubinsky. A finite element method for the study of solidification processes in the presences of natural convection. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 23:1785–1805, 1986.