

Méthodes numériques et simulation de matériaux à changement de phase

Responsables :

Ionut DANAILA

ionut.danaila@univ-rouen.fr

Francky Luddens

francky.luddens@univ-rouen.fr

Corentin Lothodé

corentin.lothode@univ-rouen.fr

Laboratoire de mathématiques Raphaël Salem, Université de Rouen Normandie

Positionnement du sujet :

A l'heure du déploiement des solutions "vertes" pour la production et la gestion des énergies, les solutions de refroidissement passif deviennent prioritaires dans différents domaines d'activité (bâtiment, data centers, télécom). L'utilisation des matériaux à changement de phase (MCP) pour stocker, et ensuite restituer l'énergie, constitue une solution d'avenir très prometteuse.

Même si les MCP sont intensivement étudiés d'un point de vue expérimental, il existe très peu d'études mathématiques rigoureuses de modélisation et de simulation numérique. Les travaux effectués au LMRS sur ce sujet portent sur le développement des outils mathématiques avancés pour la modélisation (équations de Navier-Stokes-Boussinesq), la simulation des MCP (écoulements complexes avec des effets thermiques et changement de phase) et l'optimisation de leur utilisation (optimisation de forme et du placement) [1, 2, 3].

Contexte et perspectives :

Le stage se déroulera dans le cadre du projet régional M2NUM (2015-2019). Il pourra se poursuivre par une thèse débutant en octobre 2019 (demande de financement régional ou bourse de l'Ecole doctorale MIIS).

Une thèse sur la modélisation et la simulation des MCP est en cours au LMRS, ce qui permettra de multiples interactions dans l'équipe EDP-CS du LMRS. La collaboration avec des industriels intéressés par ces dispositifs est également envisagée.

Description du sujet : Le sujet se situe à l'interface entre mathématiques appliquées et modélisation physique, sans toutefois nécessiter des connaissances approfondies en physique. Le travail va combiner le développement de méthodes numériques et la programmation en utilisant le logiciel FreeFem++ [4].

La base de départ des travaux sera constituée par les scripts FreeFem++ déjà développés pour le calcul 2D d'un cycle de fusion-solidification d'un MCP. Ils utilisent une méthode de type éléments finis avec adaptation de maillage pour résoudre un modèle physique mono-domaine basé sur les équations de Navier-Stokes-Boussinesq. Ce modèle introduit une zone de séparation entre les deux phases (liquide et solide), ce qui permet de régulariser les fonctions discontinues décrivant les propriétés des matériaux. L'utilisation de la méthode de Newton pour résoudre les équations non-linéaires du modèle devient ainsi possible.

L'objectif du stage est d'enrichir le modèle décrivant la zone mixte entre la phase liquide et celle solide, en introduisant des équations supplémentaires décrivant la cristallisation de dendrites dans la phase liquide. Des cas simples seront d'abord analysés et simulés numériquement [5]. L'implémentation du modèle pour la simulation d'un cycle de fusion-solidification sera l'objectif final du stage.

Bibliographie :

[1] I. Danaila, R. Moglan, F. Hecht, S. Le Masson: A Newton method with adaptive finite elements for solving phase-change problems with natural convection, *Journal of Computational Physics*, **274**, p. 826-840, 2014.

[2] A. Rakotonrandisa, I. Danaila : Simulation de matériaux à changement de phase par une méthode d'éléments finis adaptatifs, 25ème Congrès Français de Thermique, 30 mai- 2 juin 2017, Marseille.

[3] A. Rakotonrandisa, I. Danaila, L. Danaila : Etude numérique d'un cycle complet fusion-solidification pour un matériau à changement de phase, 26ème Congrès Français de Thermique, 29 mai- 3 juin 2018, Pau.

[4] <http://www.freefem.org>

[5] Y. Hua, Q. Shi, V. F. De Almeida, X. Li : Numerical simulation of phase transition problems with explicit interface tracking, *Chemical Engineering Science*, **128**, p. 92-108, 2015.