



HAL
open science

Déformation eXtrême de maillage (X-MESH) : un nouveau paradigme pour le suivi de surfaces physiques. Application au changement de phase

Nicolas Moes, Jean-François Remacle, Jonathan Lambrechts, Benoît Lé,
Nicolas Chevaugéon

► To cite this version:

Nicolas Moes, Jean-François Remacle, Jonathan Lambrechts, Benoît Lé, Nicolas Chevaugéon. Déformation eXtrême de maillage (X-MESH) : un nouveau paradigme pour le suivi de surfaces physiques. Application au changement de phase. 25e Congrès Français de mécanique, Association Française de mécanique, Aug 2022, Nantes, France. hal-04508497

HAL Id: hal-04508497

<https://hal.science/hal-04508497>

Submitted on 18 Mar 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Déformation eXtrême de maillage (X-MESH) : un nouveau paradigme pour le suivi de surfaces physiques, application au changement de phase

N. MOËS^{a,c}, J.-F. REMACLE^b, J. LAMBRECHTS^b, B. LÉ^a,
N. CHEVAUGEON^a

- a. Nantes Université, Ecole Centrale de Nantes, GeM UMR CNRS 6183, Nantes, France,
nicolas.moes,benoit.le,nicolas.chevaugon@ec-nantes.fr
- b. Institute of Mechanics, materials and engineering, Université Catholique de Louvain,
Louvain-La-Neuve, Belgique, jean-francois.remacle,jonathan.lambrechts@uclouvain.be
- c. Institut Universitaire de France (IUF)

Résumé :

L'approche de déformation eXtrême de maillage (X-MESH) est une nouvelle méthode pour suivre des interfaces sans remaillage ni changement de la topologie du maillage [1]. L'originalité réside dans le fait que l'interface peut malgré tout changer de topologie (nucléation, coalescence, branchement). L'idée principale est de permettre aux éléments d'atteindre une mesure nulle autorisant ainsi le relais, l'annihilation et la nucléation de l'interface d'une manière continue dans le temps. La présentation portera sur le modèle de changement de phase de Stefan pour lequel le front de solidification comporte une discontinuité de gradient de température.

Abstract :

The eXtreme Mesh deformation approach (X-MESH) is a new method for tracking sharp interfaces without remeshing or changing the mesh topology [1]. However, the interface may change its topology (nucleation, coalescence, branching). The main idea is to allow the elements to reach a zero measure. This allows for relaying, annihilation and nucleation of the interface in a continuous manner in time. The presentation will focus on the Stefan phase change model in which the solidification front has a temperature gradient discontinuity.

Mots clefs : X-MESH, suivi de front, changement de phase, modèle de Stefan

1 Introduction

Les approches traditionnelles de suivi de front comme la méthode Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE) sont capables de suivre les interfaces mais ne peuvent pas gérer correctement les changements de topologie de ces interfaces. Le suivi de front sur de longues distances est également une difficulté pour

l’ALE. D’autres approches, dites de capture, basées sur un maillage fixe et des stratégies d’enrichissement (comme les méthodes d’éléments finis étendues/généralisées) peuvent gérer les changements topologiques mais au prix de l’utilisation de degrés de liberté supplémentaires impliquant une gestion spéciale et des points techniques (comme par exemple la stabilité temporelle du schéma d’intégration avec un nombre évolutif de degrés de liberté).

L’approche X-MESH conserve un nombre fixe d’inconnues et une approximation classique par éléments finis. Le maillage se déforme tout en conservant sa topologie. Les nœuds situés sur le front de solidification/fusion ne sont pas toujours les mêmes car le front est relayé entre les nœuds. Des exemples démontrant la capacité de X-MESH à traiter la nucléation et la coalescence du front seront montrés dans les prochaines section pour le problème de changement de phase de Stefan.

2 Modèle de Stefan

Nous considérons un domaine Ω représenté sur la figure 1. Sa frontière, $\partial\Omega$, est supposée fixe dans le temps. Le domaine est composé d’une phase solide et d’une phase liquide, désignées respectivement par Ω_s et Ω_ℓ . Le front qui sépare les phases, Γ , se déplace avec une vitesse notée v .

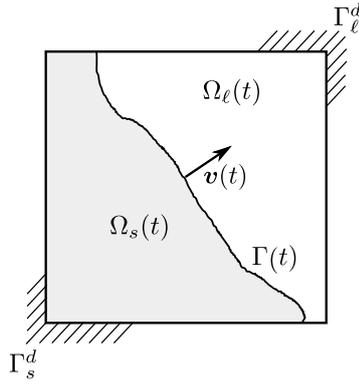


FIGURE 1: Définition du problème.

Nous cherchons à déterminer l’évolution du champ de température $T(\mathbf{x}, t)$ [K] pour $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, t_{\max}]$, qui satisfait aux équations suivantes

$$\begin{aligned}\rho_s c_s T_{,t} &= \nabla(k_s \nabla T) + \rho_s S \text{ in } \Omega_s \\ \rho_\ell c_\ell T_{,t} &= \nabla(k_\ell \nabla T) + \rho_\ell S \text{ in } \Omega_\ell\end{aligned}$$

où ρ_s et ρ_ℓ sont les densités [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$], c_s et c_ℓ les capacités thermiques spécifiques [$\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{kg}^{-1}$], k_s et k_ℓ les conductivités thermiques isotropes [$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$] des phases et S une source de chaleur [$\text{W}\cdot\text{kg}^{-1}$]. Pour assurer la conservation de la masse dans le modèle de Stefan, les densités doivent être considérées comme égales ($\rho_s = \rho_\ell = \rho$).

Le champ de température doit également satisfaire les conditions limites, internes et initiales suivantes :

$$T(\mathbf{x}, t) = T_d, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^d \times [0, t_{\max}], \quad (1a)$$

$$T(\mathbf{x}, t) = T_0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma(t) \times [0, t_{\max}], \quad (1b)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_i(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (1c)$$

où T_d est la température imposée sur la frontière de Dirichlet $\Gamma^d = \Gamma_s^d \cup \Gamma_\ell^d$ et T_0 la température de changement de phase. Pour simplifier la présentation, mais sans perte de généralité, la température imposée est supposée constante et uniforme sur Γ^d . La position de Γ^d est également supposé fixe dans le temps. Le reste de la frontière externe ($\partial\Omega \setminus \Gamma^d$) est isolé (gradient de température normal nul). Sur le front de changement de phase Γ , le saut de flux thermique est lié à la vitesse du front par

$$(k_s \nabla T - k_\ell \nabla T) \cdot \mathbf{n} = \rho l (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \quad (2)$$

où \mathbf{n} est la normale à $\Gamma(t)$ se déplaçant à la vitesse v et l est la chaleur latente [$\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$].

La forme forte des équations peut être transformée sous une forme variationnelle. Pour cela nous définissons la fonction énergie et conductivité en terme de la température. Ces deux fonctions sont discontinues en T_0 comme l'indique l'utilisation de la fonction Heaviside $H(T)$ (nulle pour $T \leq T_0$ et unitaire pour $T > T_0$) :

$$\begin{aligned} e(T) &= ((1 - H(T))c_s + H(T)c_\ell) T + H(T)\bar{l}, \\ k(T) &= (1 - H(T))k_s + H(T)k_\ell \end{aligned}$$

Le saut d'énergie interne donne la chaleur latente l :

$$l = (c_\ell - c_s)T_0 + \bar{l}.$$

Pour représenter le mouvement du maillage, nous introduisons le référentiel lagrangien eulérien arbitraire (voir par exemple [1]). Une transformation fait correspondre les points \mathbf{X}^0 d'un domaine de référence Ω^0 aux points \mathbf{X} du domaine Ω^t :

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^0, t) \quad (3)$$

On suppose que la transformation ne modifie la forme du domaine. La vitesse du domaine (maillage) \mathbf{w} , le gradient de déformation du domaine \mathbf{F} et le Jacobien de la transformation sont donnés par

$$\mathbf{w} = \left. \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}^0}, \quad \mathbf{F} = \left. \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}^0} \right|_t, \quad J = \det \mathbf{F}.$$

L'espace des températures admissibles est défini par

$$\mathcal{U}_d = \{T : \Omega^0 \rightarrow \mathbb{R}, T \in H^1(\Omega^0), T = T_d \text{ on } \Gamma^d\}.$$

À tout instant $t \in [0, t_{\max}]$, le champ de température T doit appartenir à l'ensemble admissible \mathcal{U}_d et satisfaire le principe variationnel suivant :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega^0} \rho e(T) T^* J \, d\mathbf{X}^0 + \int_{\Omega^0} k(T) \mathbf{g}(T) \cdot \mathbf{g}(T^*) J \, d\mathbf{X}^0 + \int_{\Omega^0} \rho e(T) \mathbf{w} \cdot \mathbf{g}(T^*) J \, d\mathbf{X}^0 = \\ \int_{\Omega^0} \rho S T^* J \, d\mathbf{X}^0, \forall T^* \in \mathcal{U} \end{aligned} \quad (4)$$

où l'espace des fonctions de test est défini par

$$\mathcal{U} = \{T : \Omega^0 \rightarrow \mathbb{R}, T \in H^1(\Omega^0), T = 0 \text{ on } \Gamma^d\}$$

et

$$\mathbf{g}(T) = \mathbf{F}^{-1} \nabla_0 T. \quad (5)$$

3 Discrétisation et solveur

Nous considérons un ensemble d'instant discrets. Soit t^n un tel instant et t^{n+1} le suivant. Le principe variationnel (4) est discrétisé avec un schéma θ . Étant donné connu le champ de température T^n à t^n ,

on cherche le champ de température T^{n+1} à t^{n+1} satisfaisant :

$$\begin{aligned}
r(T^*) &\equiv \int_{\Omega^0} \rho e(T^{n+1}) T^* J^{n+1} \, d\mathbf{X}^0 - \int_{\Omega^0} \rho e(T^n) T^* J^n \, d\mathbf{X}^0 \\
&\quad + \theta \Delta t^{n+1/2} \int_{\Omega^0} \left(k(T^{n+1}) \mathbf{g}^{n+1}(T^{n+1}) \cdot \mathbf{g}^{n+1}(T^*) + \rho e(T^{n+1}) \mathbf{w}^{n+1/2} \cdot \mathbf{g}^{n+1}(T^*) \right) J^{n+1} \, d\mathbf{X}^0 \\
&\quad + (1 - \theta) \Delta t^{n+1/2} \int_{\Omega^0} \left(k(T^n) \mathbf{g}^n(T^n) \cdot \mathbf{g}^n(T^*) + \rho e(T^n) \mathbf{w}^{n+1/2} \cdot \mathbf{g}^n(T^*) \right) J^n \, d\mathbf{X}^0 \\
&\quad - \theta \Delta t^{n+1/2} \int_{\Omega^0} \rho S^{n+1} T^* J^{n+1} \, d\mathbf{X}^0 - (1 - \theta) \Delta t^{n+1/2} \int_{\Omega^0} \rho S^n T^* J^n \, d\mathbf{X}^0 \\
&= 0, \quad \forall T^* \in \mathcal{U}
\end{aligned} \tag{6}$$

où $\Delta t^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n$ et la vitesse du domaine est discrétisée comme :

$$\mathbf{w}^{n+1/2}(\mathbf{X}^0) = \frac{\mathbf{X}^{n+1} - \mathbf{X}^n}{t^{n+1} - t^n}.$$

Le domaine de référence Ω^0 est partitionné en un maillage triangulaire \mathcal{M}^0 . Le maillage évolue dans le temps et est noté \mathcal{M}^n à un instant ultérieur t^n . Dans l'approche X-MESH, la topologie du maillage (nombre de nœuds et adjacences entre les entités) est maintenue fixe. L'évolution du maillage est uniquement due aux mouvements des nœuds. L'ensemble des nœuds est noté \mathcal{N} . Les champs de température discrets à t^n et t^{n+1} sont définis comme :

$$T^n(\mathbf{X}^0) = \sum_{i \in \mathcal{N}} T_i^n T_i^*(\mathbf{X}^0), \quad T^{n+1}(\mathbf{X}^0) = \sum_{i \in \mathcal{N}} T_i^{n+1} T_i^*(\mathbf{X}^0)$$

où les scalaires T_i^n et T_i^{n+1} désignent les valeurs de température nodale au nœud i et la fonction T_i^* est la fonction d'approximation par éléments finis associée au nœud i (fonction chapeau). En utilisant l'approximation ci-dessus, dans le résidu (6), on obtient un système non linéaire d'équations reliant le maillage et les températures nodales aux temps t^n et t^{n+1} . Ce système est noté R .

Dans l'approche X-MESH, on impose une compatibilité entre le maillage et le champ de température : l'iso contour de la température de transition doit être maillé. La compatibilité est notée C . Le problème X-MESH à résoudre son pas de temps est le suivant :

Connaissant $(T^n, \mathbf{X}^n) \in C$, trouver $(T^{n+1}, \mathbf{X}^{n+1}) \in C$ tel que $R((T^{n+1}, \mathbf{X}^{n+1}), (T^n, \mathbf{X}^n)) = 0$.

Un solveur pour ce problème est proposé dans [2].

4 Solidification d'un disque avec un puit chaleur au centre

On considère la solidification d'un domaine infini via un puits de chaleur d'intensité $100 \text{ [W.m}^{-1}\text{]}$. La chaleur latente est de $3, 3 \times 10^5 \text{ [J.kg}^{-1}\text{]}$. Au lieu de considérer un domaine infini, nous considérons un carré dimensions $3 \times 3 \text{ [m}^2\text{]}$ et appliquons la solution analytique au contour extérieur. On note $\Delta t^{n+1/2}$ le pas de temps entre t^n et t^{n+1} . Le pas de temps choisi vérifie la formule :

$$\Delta t^{n+1/2} = \Delta t^{1/2} \frac{1 + \sqrt{1 + 4t^n / \Delta t^{1/2}}}{2}. \tag{7}$$

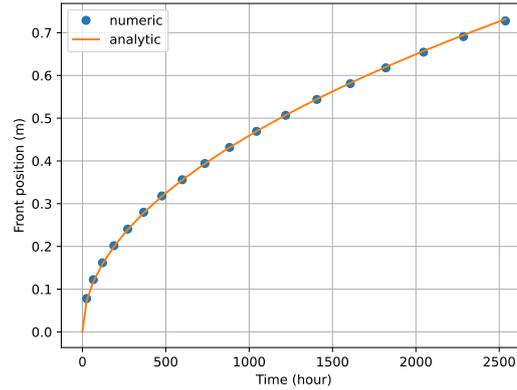
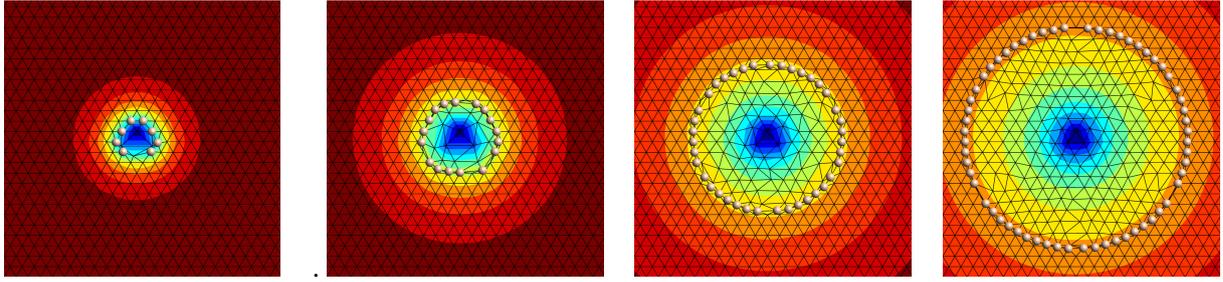


FIGURE 2: Problème axisymétrique de Stefan : comparaisons d’erreurs pour chaleur latente = $3,3 \times 10^5$ [J.kg⁻¹]. Le front de congélation est nucléé puis se propage.

Dans la simulation, la valeur $\Delta t^{1/2} = 25$ [h] a été utilisée. Nous commençons la simulation à $t^0 = 0$ [s] pour vérifier si la méthode peut gérer la nucléation. A chaque itération, nous recherchons le triangle qui contient le point $(x, y) = (0, 0)$ et nous plaçons le puits dans ce triangle en distribuant la valeur de 100 [W.m⁻¹] sur ses trois noeuds. La figure 2 montre les solutions à différents instants ainsi qu’une comparaison avec la solution analytique. Le front de congélation est créé automatiquement par l’algorithme et se propage ensuite. Une moyenne de 9 itérations quasi-Newton ont été nécessaires pour réduire le résidu d’un facteur 10^6 . Les chiffres montrent que notre méthode est capable de nucléer un front. Aux premiers stades, la forme de ce front n’est pas circulaire à cause de la résolution insuffisante du maillage. Le modèle de Stefan est très stable : lorsque le front grandit, il devient quasi-circulaire et notre solution numérique est très proche de la solution analytique. Les maillages de la Figure 2 montrent l’effet de la relaxation du maillage : la maille au centre du cercle qui était initialement affectée par l’algorithme de relais frontal revient progressivement à son état initial.

Références

- [1] J. Donea and A. Huerta. *Finite Element Methods for Flow Problems*. Wiley, 2003.
- [2] N. Moes, J.-F. Remacle, J. Lambrechts, B. Le, and N. Chevaugeon. The extreme mesh deformation approach (x-mesh) for the stefan phase-change model, 2022. Submitted to Journal of Computational Physics.