



HAL
open science

Simulation numérique des matériaux à changement de phase.

Cecile Legrand

► **To cite this version:**

Cecile Legrand. Simulation numérique des matériaux à changement de phase.. Modélisation et simulation. Normandie Université, 2023. Français. NNT : 2023NORMR097 . tel-04473186

HAL Id: tel-04473186

<https://theses.hal.science/tel-04473186>

Submitted on 22 Feb 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.

THÈSE

Pour obtenir le diplôme de doctorat

Spécialité **MATHEMATIQUES**

Préparée au sein de l'**Université de Rouen Normandie**

Simulation numérique des matériaux à changement de phase.

Présentée et soutenue par

CECILE LEGRAND

Thèse soutenue le 27/11/2023

devant le jury composé de :

M. YUCEF MAMMERI	Professeur des Universités - UNIVERSITE SAINT ETIENNE JEAN MONNET	Rapporteur du jury
M. CORNEL MARIUS MUREA	Maître de Conférences HDR - Université de Haute-Alsace	Rapporteur du jury
M. FRÉDÉRIC HECHT	Professeur des Universités - SORBONNE UNIVERSITE	Membre du jury
M. FRANCKY LUDDENS	Maître de Conférences - Université de Rouen Normandie	Membre du jury
M. DRISS YAKOUBI	Maître de Conférences - EC SUP ING LD VINCI LA DEFENSE	Membre du jury
MME STEPHANIE SALMON	Professeur des Universités - UNIVERSITE REIMS CHAMPAGNE ARDENNE	Président du jury
M. IONUT DANAILA	Professeur des Universités - Université de Rouen Normandie	Directeur de thèse

Thèse dirigée par **IONUT DANAILA** (LABORATOIRE DE MATHEMATIQUE RAPHAEL SALEM)



Contents

1. Introduction	1
1.1. Contexte physique	1
1.2. Modélisation mathématique	5
1.3. Approche numérique utilisée	9
1.4. Objectif de la thèse	10
1.5. Organisation du mémoire	11
2. Modèle mathématique pour les systèmes à changement de phase	15
2.1. Méthode d'enthalpie-porosité	15
2.2. Équations de Navier-Stokes avec l'approximation de Boussinesq	17
2.3. Adimensionnement du système d'équations pour l'approche mono-domaine	19
2.4. Méthode numérique	21
3. Problème de Stefan	27
3.1. Description physique du problème	27
3.2. Solution analytique	29
3.2.1. Solution analytique de l'équation de la chaleur	29
3.2.2. Solution analytique appliquée à la fusion	31
3.3. Méthode d'enthalpie	33
3.3.1. Méthode numérique	33
3.3.2. Résultats numériques	35
3.4. Comparaison avec la méthode du C_p -modifié	38
4. Analyse numérique pour la simulation de la convection naturelle	45
4.1. Cadre et discrétisation	46
4.1.1. Formulation faible	46
4.1.2. Propriétés des formes bilinéaires et trinéaires	46
4.1.3. Approximation par éléments finis	48
4.1.4. Notations et hypothèses	49
4.2. Première estimation d'erreur pour la convection naturelle	51
4.3. Projection de Stokes modifiée	57
4.3.1. Définition d'une famille d'opérateurs	57
4.3.2. Analyse des opérateurs	59
4.3.2.1. L'opérateur de pénalisation $\mathbb{P}_{\gamma_h,0}^{X,L^2}$	59
4.3.2.2. L'opérateur de projection $\mathbb{P}_{\gamma_h,\gamma_h}^{X,Q_h}$	60
4.3.3. Estimations d'erreurs pour l'opérateur $\mathbb{P}_{\gamma_h,0}^{X,Q_h}$	62
4.4. Nouvelle estimation d'erreur	64

4.5.	Résultats numériques	69
4.5.1.	La projection modifiée $\mathbb{P}_{\gamma_h,0}^{X_h,Q_h}$	70
4.5.1.1.	Solution manufacturée (cas MP-Bur)	70
4.5.1.2.	Convection naturelle dans un carré (cas MP-NC)	73
4.5.2.	Convection naturelle en 2D	75
4.5.2.1.	Solution manufacturée (cas NC-Nour)	75
4.5.2.2.	Convection naturelle dans un carré (cas NC-Sq)	77
4.5.2.3.	Convection naturelle de Rayleigh-Bénard dans un carré (cas NC-RB)	79
4.5.3.	Coût de calcul	80
4.5.3.1.	Convection naturelle 2D	80
4.5.3.2.	Convection naturelle 3D	81
4.6.	Conclusion	82
5.	Simulation numérique du changement de phase avec coefficients variables	83
5.1.	Paramètres numériques	83
5.1.1.	Architecture des programmes	83
5.1.2.	Conditions initiales	84
5.2.	Validation pour les MCP à coefficients constants	86
5.2.1.	Cas MCP-Okada	87
5.2.2.	Cas MCP-Bertrand	90
5.2.3.	Cas MCP-Luo	91
5.3.	Validation avec les expériences de Kamkari	92
5.4.	Conclusion	98
6.	Simulation dans de géométries complexes	101
6.1.	Case MCP-Groulx	102
6.2.	Case MCP-Kamkari-ailettes	104
6.3.	Case MCP-Sweidan	108
6.4.	Case MCP-AIR	112
7.	Conclusions et perspectives	117
7.1.	Conclusions	117
7.2.	Perspectives	119
A.	Architecture des programmes et organisation des fichiers	121
A.1.	Architecture des programmes	121
A.2.	Paramètres d'entrée	122
A.3.	Sorties	125
	Bibliography	127

1. Introduction

1.1. Contexte physique

La demande mondiale croissante d'énergie pour les activités humaines repose principalement sur des ressources énergétiques non-renouvelables telles que les combustibles fossiles, ce qui pose une question de durabilité. Les énergies renouvelables telles que l'énergie solaire, éolienne ou hydraulique deviennent donc des sources d'énergie plus prometteuses, propres et sûres. L'intérêt pour les énergies propres ne cesse donc de croître. Cependant, ce type d'énergie est de nature oscillante, car affecté par des variations aléatoires dues aux conditions météorologiques locales. La nature oscillante de ces énergies se remarque sur la figure 1.1 qui montre l'évolution temporelle de la puissance solaire et éolienne sur la journée du 6 mai 2022 en France (Source : Réseau de Transport d'Électricité français, RTE). Prenons l'exemple de l'énergie éolienne. Aux heures de pointe, la demande d'énergie est supérieure à sa production et, la nuit, la production d'énergie est supérieure à sa consommation. Il est donc nécessaire de gérer l'équilibre entre la production et la demande pour assurer un service optimal. Un stockage d'énergie est donc nécessaire pour permettre l'utilisation différée de l'énergie excédentaire produite pendant les périodes de haute disponibilité ou de faible demande. Sauf dans des cas très spécifiques, il est difficile de stocker directement l'électricité, il faut donc la transformer en une autre forme d'énergie plus facilement stockable. L'adaptation de solutions de stockage d'énergie à grande échelle est donc une condition préalable au développement des énergies renouvelables.

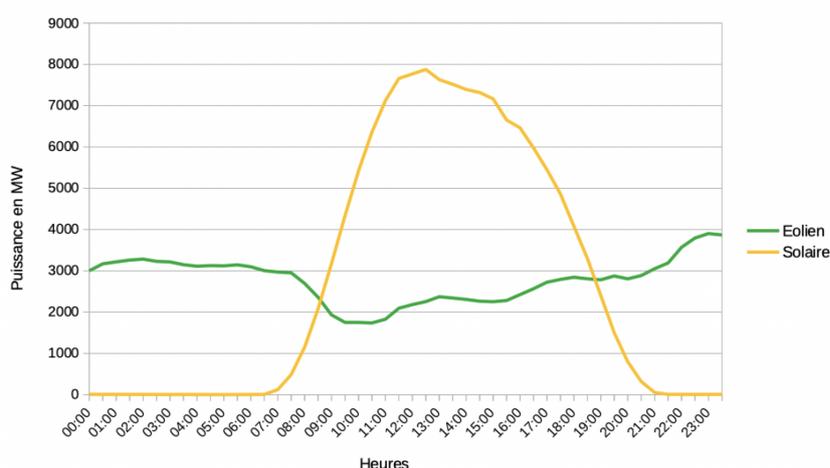


FIGURE 1.1. – Évolution journalière de la puissance solaire et éolienne en France le 6 mai 2022. Source : Réseau de Transport d'Électricité français, RTE.

Par ailleurs, une meilleure utilisation de ces énergies constitue un enjeu environnemen-

tal majeur. La consommation d'énergie dans les bâtiments représentait 30% de la consommation d'énergie mondiale en 2021. La demande croissante de confort thermique dans les bâtiments et en particulier, le refroidissement des locaux, a entraîné la plus forte augmentation de la demande en 2021, soit une augmentation de plus de 6,5% par rapport à 2020 (Agency, 2022). Le développement de systèmes et de méthodes visant à assurer l'efficacité énergétique des bâtiments et donc à réduire l'utilisation d'énergie est, par conséquent, devenu une préoccupation majeure ces dernières années. La consommation de chauffage et de climatisation d'un bâtiment est directement liée à la composition de son enveloppe. Celle-ci est directement exposée au rayonnement solaire, aux températures froides, mais également à la présence de sources de chaleur interne, telles que des machines, des installations informatiques ou des personnes. La consommation d'électricité varie donc considérablement au cours de la journée et de la nuit, mais aussi pendant la semaine et pendant le week-end, ainsi qu'en fonction des saisons. Les fluctuations de la demande d'énergie pour le chauffage et la climatisation se produisent donc quotidiennement, hebdomadairement et saisonnièrement. La gestion de ces disparités nécessite donc un stockage de l'énergie thermique (Ye et al., 2017).

Le développement de véhicules électriques fait également partie d'un large programme de réduction d'émission de gaz à effet de serre et donc de protection de l'environnement. Ce type de véhicules nécessite des batteries, notamment des batteries à lithium-ion à haute densité énergétique. Ce type de batteries est de plus en plus utilisé dans les véhicules électriques, mais également dans les appareils électroniques portables ou les outils alimentés par batterie, en raison de leur haute densité énergétique, de leurs longs cycles de vie, de leur puissance élevée et de leur faible taux d'auto décharge. La sécurité, les performances, la stabilité et la fiabilité de ces batteries sont considérablement liées aux effets thermiques de celle-ci. En effet, la plupart des produits chimiques des batteries lithium-ion commerciaux ont tendance à se dégrader ou à vieillir à partir des températures supérieures à 60 °C, ce qui entraîne une diminution de la puissance totale produite et une cyclabilité (charge/décharge) limitée. La température de fonctionnement optimal est comprise entre 20°et 40 °. La vitesse de dissipation de la chaleur du bloc de batteries doit donc être suffisamment rapide pour que celui-ci n'atteigne jamais la température d'emballement thermique. Le système de gestion thermique repose donc sur le transfert de chaleur de la surface de la batterie pour inhiber l'augmentation de la température du cœur et prévenir la dégradation des matériaux. Par conséquent, il est essentiel de développer de nouveaux systèmes qui atténuent l'augmentation considérable de la température pendant les processus de décharge et de charge, réduisant ainsi la dégradation des performances et améliorant la sécurité du système de batteries (Alrashdan et al., 2010; Liu et al., 2022).

Le stockage de l'énergie est donc un des pôles de recherche importants dans la problématique environnementale, mais il concerne également d'autres domaines, tels que l'électronique. En effet, les progrès technologiques relatifs aux dispositifs électroniques ont permis d'améliorer les fonctions et de réduire les dimensions, tout en améliorant la densité de puissance des boîtiers. La puissance des puces électroniques ne cesse de croître, tandis que leurs volumes sont progressivement réduits. Cependant, la plupart des puces électroniques génèrent beaucoup plus de chaleur en fonctionnement qu'en veille ; l'augmentation transitoire de la température est donc rapide. Par conséquent, la résistance aux chocs thermiques est devenue un enjeu majeur dans le développement de la technologie des puces. De plus, une température excessive a un effet important sur la durée de vie du dispositif et peut éventuellement conduire à une

défaillance thermique. Le refroidissement traditionnel par convection naturelle et convection forcée n'est pas suffisant pour les flux de chaleur élevés, c'est pourquoi d'autres moyens de gestion thermique doivent être envisagés. Ces dispositifs doivent être capables de maintenir la température de fonctionnement de ces appareils en dessous de leur température maximale admissible (Yin et al., 2008).

De nombreuses applications nécessitent donc l'étude des stockages à énergie thermique. Ces types de stockages sont classés en trois catégories : le stockage de chaleur sensible (SHS), le stockage d'énergie thermique à chaleur latente (LHTES) et le stockage thermochimique (SECT). Le stockage de la chaleur sensible et de la chaleur latente entre dans la catégorie des systèmes passifs, tandis que la chaleur thermochimique est comptabilisée dans les systèmes actifs (Heier et al., 2015).

Dans le stockage de chaleur sensible (SHS), l'énergie absorbée pendant le changement de température du matériau de stockage, sans en changer la phase, est appelée chaleur sensible. L'énergie thermique est donc stockée en élevant la température du matériau de stockage, en dessous d'une température limite pour laquelle le matériau ne subit pas de changement de phase. C'est la forme la plus simple et la plus facile de stockage de la chaleur où le matériau ne subit pas de changement de phase. La quantité d'énergie stockée est donc fonction de la chaleur spécifique du matériau, du changement de température et de la quantité de matériau de stockage. Quantitativement, la capacité de chaleur sensible d'un matériau peut être exprimée comme suit (Singh Rathore et al., 2020; Dincer, 2002).

$$Q = mC_p(T_{final} - T_i)$$

où m est la masse du matériau, C_p sa chaleur spécifique et $T_{final} - T_i$ la différence entre la température finale T_{final} et la température initiale T_i . Les substances SHS peuvent être classées en SHS liquides comme l'eau et le pétrole ou en SHS solides comme les roches, les métaux et les matériaux de maçonnerie. Les gaz ayant une très faible capacité thermique, ils ne sont généralement pas adaptés au stockage du froid ou de la chaleur. L'eau peut être considérée comme la meilleure de toutes les substances habituellement utilisées, car elle a la plus grande capacité thermique volumétrique. Cependant, pour un besoin spécifique d'énergie thermique, le stockage de chaleur sensible nécessite un récipient plus grand que les stockages de chaleur latente et thermochimique. De plus, étant donné que la chaleur sensible est absorbée avec une augmentation significative de la température, elle ne peut pas être utilisée comme stockage d'énergie pour des applications à grande échelle et pendant une longue durée.

Dans le stockage d'énergie thermique par chaleur latente (LHTES), la chaleur libérée ou absorbée par un corps ou un système thermodynamique au cours d'un processus de transition de phase à température constante est appelée chaleur latente. Ce mode de stockage implique une transformation de phase du matériau de stockage d'un état de la matière à un autre, tel que solide-liquide ou liquide-gaz et vice-versa. La chaleur latente associée à la fusion d'un solide ou à la solidification d'un liquide est appelée chaleur de fusion tandis que la chaleur latente associée à la vaporisation d'un liquide ou d'un solide ou à la condensation de la vapeur est appelée chaleur de vaporisation. La chaleur latente de vaporisation est supérieure à la chaleur latente de fusion, mais une transition liquide-gaz exige un grand volume de matériau alors que le changement de phase pendant la fusion/solidification se produit avec un changement de volume négligeable. Par conséquent, dans la plupart des cas, la transition de phase solide-

liquide est utilisée.

La quantité d'énergie libérée ou absorbée lors du changement de phase de la substance d'un matériau peut être exprimée comme suit (Ibrahim et al., 2017; Liu et al., 2022; Singh Rathore et al., 2020) :

$$Q = mc_{p,s}(T_f - T_i) + mL + mc_{p,l}(T_{final} - T_f)$$

où $c_{p,s}$ et $c_{p,l}$ sont les chaleurs spécifiques du solide et du liquide du matériau de stockage respectivement. m est la masse du matériau, L est l'enthalpie de changement d'état, T_i , T_f et T_{final} sont la température initiale, de fusion et finale, respectivement. Le premier terme de l'équation est la chaleur sensible de la phase solide, le deuxième est la chaleur latente de fusion et le troisième est la chaleur sensible de la phase liquide. Les LHTES offrent l'avantage de pouvoir stocker et récupérer l'énergie en fonction des besoins et des applications. De plus, le stockage d'énergie sous forme de chaleur latente est très prometteur et attrayant en raison de sa compacité et de sa capacité à stocker l'énergie à une température quasi-constante, correspondant à la température de transition de phase du matériau. De surcroît, l'énergie stockée sous forme de chaleur latente est assez importante par rapport à la chaleur sensible.

Les systèmes d'énergie thermochimique (SET), quant à eux, utilisent la génération et la libération de chaleur pendant la dissociation et la synthèse de composés chimiques dans une réaction chimique endothermique réversible. Cette technique de stockage d'énergie a gagné en popularité en raison de sa forte densité de stockage d'énergie à température constante et de sa faible perte thermique, mais divers obstacles limitent son utilisation. Ils sont corrosifs, chimiquement instables, leur production est peu respectueuse de l'environnement, et leur coût est élevé. De plus, leur fonctionnement à long terme est peu connu. Cependant, la recherche sur les réactions thermochimiques réversibles est encore à un stade prématuré.

On peut donc conclure que, parmi toutes les techniques de stockage de l'énergie thermique, le stockage de la chaleur latente est la méthode la plus prometteuse pour améliorer la capacité de stockage de la chaleur. Le matériau utilisé pour le stockage de l'énergie par chaleur latente est appelé matériau à changement de phase (MCP). Les MCP sont des substances qui, à une température donnée, ont une chaleur latente relativement élevée par unité de volume. Par conséquent, ils absorbent ou libèrent une grande quantité de chaleur pendant leur processus de fusion ou de solidification. Au point de fusion, une grande quantité d'énergie est dépensée pour faire passer le MCP de la phase solide à la phase liquide. L'énergie est ensuite absorbée sous forme de chaleur latente par la fusion de ces matériaux. Ce phénomène est connu sous le nom de charge. Inversement, lorsque l'énergie est extraite du stockage du MCP et que le MCP fondu se solidifie à nouveau, on parle de décharge. Ainsi, l'énergie est stockée dans les matériaux MCP et peut être extraite à tout moment. Un exemple du phénomène de charge est donné dans la figure 1.2. Un MCP, initialement solide (phase blanche), est placé dans un domaine cylindrique. Un cylindre interne chauffe le MCP au delà de sa température de fusion, il se met alors à absorber la chaleur et à fondre. Une phase liquide fait alors son apparition. Celle-ci s'observe par la zone noire.

La fusion et la solidification constituent donc des processus de transfert de chaleur importants qui se produisent dans une grande variété d'applications scientifiques et techniques. Ce processus de transfert de chaleur se caractérise par un changement de phase, qui produit des régions de phase solide et liquide aux apparences extrêmement complexes. Une étude détaillée de ce processus et des mécanismes de solidification et de fusion nécessite,



FIGURE 1.2. – Observations expérimentales de la fusion du n-octadécane dans un domaine cylindrique, chauffé par une cylindre interne (Azad and Groulx, 2021).

par conséquent, des expériences soigneusement conçues et rigoureusement caractérisées ainsi que des techniques de modélisation numérique avancées. L'objectif principal de ces études est de déterminer comment le front de changement de phase évolue dans le temps, et comment les différents paramètres du problème influencent la propagation du front de changement de phase. Ces problèmes de frontières mobiles ont été largement étudiés à la fois expérimentalement et théoriquement pendant plusieurs décennies, mais le développement de modèles mathématiques pour ces problèmes continue à être d'un grand intérêt en raison de la pertinence pratique et réelle de ces problèmes. De surcroît, il n'est pas possible de prédire a priori à quoi ressemblera le front de changement de phase évoluant dans le temps. Les solutions analytiques exactes pour ces types de problèmes non-linéaires ne sont connues que pour certains systèmes simplifiés et idéalisés, les méthodes numériques semblent donc être le seul moyen pratique pour traiter les problèmes généraux de fusion et de solidification. De plus, les problèmes à interface mobile dépendant du temps représentent un défi mathématique considérable, notamment en ce qui concerne le développement de techniques de résolution numérique, d'où le grand intérêt d'approfondir ces recherches.

1.2. Modélisation mathématique

Dans la phase liquide, l'écoulement qui se produit est appelé convection naturelle. Les gradients de température induisent des forces de flottabilité dans la phase liquide et génèrent un flux convectif important. Dans les écoulements de convection naturelle, la force motrice du mouvement du fluide est le champ de gravité qui agit sur les différences de densité. Cette force, dite de flottaison, implique que les parties les plus denses du fluide se déplacent vers le bas et que les parties moins denses se déplacent vers le haut. Les différences de densité peuvent résulter de divers effets. Cependant, nous nous intéressons uniquement aux variations spatiales de densité causées par des distributions de température non-uniformes. Cet écoulement est caractérisé, physiquement, par diverses propriétés : la vitesse, la pression, la température, la densité et la viscosité. Ces principales propriétés doivent être considérées simultanément lors de

l'étude de l'écoulement du fluide et doivent être définies avec précision afin de développer un modèle mathématique rigoureux. Le modèle mathématique le plus largement appliqué pour étudier ces changements de propriété pendant les interactions dynamiques et thermiques se base sur les équations Navier-Stokes avec l'approximation de Boussinesq pour les effets thermiques. Les équations de Navier-Stokes sont exprimées sur la base des principes de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. L'équation de conservation de la masse et de la quantité de mouvement prennent la forme d'une équation de convection-diffusion, tandis que l'équation de conservation de l'énergie s'écrit comme une équation de advection-diffusion pour la température. Les variations de densité impliquées dans le mouvement du fluide sont très compliquées et rendent la résolution des équations difficile. Une simplification du problème de convection naturelle a été proposée par Joseph Valentin Boussinesq en 1897. L'essence de l'approximation de Boussinesq suppose que la différence d'inertie est négligeable, mais que la gravité est suffisamment forte pour que le poids spécifique soit sensiblement différent entre les deux fluides. Cette approximation néglige donc les différences de densité, sauf dans le terme de gravité dans l'équation de quantité de mouvement. Cela nous permet de traiter les écoulements de convection naturelle dans le cadre incompressible. Dans la suite, nous supposons la partie fluide des MCP incompressible (la densité ne varie pas au cours du temps), homogène (la densité est indépendante de la position), isotrope (les propriétés mécaniques sont indépendantes de la position), continue (les quantités observables varient de manière continue dans le temps) et avec un comportement newtonien (le tenseur de déformation est linéaire). Dans la phase solide, la conduction est le phénomène principal et le modèle approprié est l'équation classique de la chaleur. La principale difficulté de modélisation est de relier ces deux modèles en prenant en compte la séparation des deux phases par une interface nette, à travers laquelle les propriétés thermodynamiques sont discontinues.

Les modèles mathématiques permettant de résoudre les problèmes de changements de phase avec convection ont été abordés numériquement de deux manières différentes. Le premier modèle adopte une approche bi-domaine, où les équations de quantité de mouvement et de l'énergie sont résolues dans chaque domaine de phase séparément. Le deuxième modèle traite ces problèmes avec une approche mono-domaine, où un système d'équations de quantité de mouvement et d'énergie est résolu dans l'ensemble du domaine physique.

La première approche de modélisation est basée sur le modèle classique à deux phases de Stefan. Les équations de conservation sont résolues dans deux domaines distincts, un solide et un liquide. À l'interface, une condition d'équilibre thermique est imposée, appelée condition de Stefan. À l'aide de méthodes de *front tracking* ou *front fixing*, la position de l'interface solide-liquide est suivie explicitement. Les méthodes de *front tracking* utilisent généralement l'approche de modélisation mixte eulérienne-lagrangienne : une grille eulérienne fixe est utilisée pour calculer le champ d'écoulement, tandis que l'interface est explicitement représentée par des particules lagrangiennes (marqueurs) et sa dynamique est suivie par le mouvement de ces particules. Comme l'interface se déforme continuellement, il est nécessaire de restructurer sa grille au fur et à mesure des calculs. Ainsi, l'interaction de la grille d'interface avec la grille stationnaire induit une complexité dans la programmation et la solution. De plus amples détails sur la méthode du *front tracking* peuvent être trouvés dans [Udaykumar et al. \(1996\)](#); [Unverdi and Tryggvason \(1992\)](#). Les méthodes de *front fixing*, quant à elles, fixent le front mobile en introduisant une nouvelle variable spatiale, en modifiant les coordonnées du

problème. Tout comme les méthodes de suivi du front, elles suivent explicitement la frontière mobile. La différence avec les méthodes de suivi du front est que la frontière mobile est suivie dynamiquement à chaque pas de temps et que la frontière du maillage est configurée pour être attachée au front mobile et suivre son mouvement. Cette méthode est recommandée pour les géométries simples en raison de sa complexité. Une description plus détaillée de cette méthode peut-être trouvée dans (Stella and Giangi, 2004). Ces méthodes à deux domaines ont une grande complexité algorithmique, qui rend difficile la capture précise des interfaces solide-liquide de forme ou de structure compliquée. Les configurations avec de multiples interfaces en interaction sont également difficiles à simuler avec ces méthodes.

La deuxième approche utilise un modèle à domaine unique, ce qui permet d'éviter d'imposer explicitement la condition de Stefan à l'interface solide-liquide. L'équilibre énergétique à l'interface est implicitement pris en compte par le modèle. Par conséquent, la position de l'interface est obtenue a posteriori par post-traitement du champ de température calculé. Différents modèles ont été développés pour cette approche. Notamment, de récentes études se basent sur la méthode de Boltzmann sur réseau (Du et al., 2021; Huang et al., 2013). Les fluides sont généralement décrits en termes de champs remplissant l'espace, tels que la densité, la vitesse, la pression, qui varie de façon régulière dans l'espace et le temps. La méthode de Boltzmann sur réseau se base sur une représentation des fluides en termes de probabilité (densité) de trouver une particule donnée à une position donnée dans l'espace, au temps t , avec une vitesse donnée. Le principal inconvénient de cette méthode est qu'elle nécessite des pas de temps très petit. D'autres modèles se basent sur la méthode C_p -modifiée (Groulx and Biwolé, 2014). Cette méthode modélise l'énergie de changement de phase en modifiant la capacité thermique globale du MCP pour tenir compte de la grande quantité d'énergie requise une fois la température de fusion atteinte, fournie par la chaleur latente de fusion. Cette capacité thermique modifiée est créée à partir d'une fonction gaussienne pour tenir compte de la chaleur latente de fusion sur une plage de températures de fusion. Cette méthode fait l'objet d'une étude approfondie détaillée dans le chapitre 3 de ce mémoire.

Les méthodes de champ de phase (Fabbri and Voller, 1997) et les méthodes enthalpiques (Voller and Prakash, 1987; Cao et al., 1989) sont quant à elles les modèles à un seul domaine les plus couramment utilisés. Les modèles de champ de phase ont été largement utilisés pour étudier l'évolution de la croissance cristalline pendant la solidification (Krill Iii and Chen, 2002; Shibuta et al., 2015; SenGupta et al., 2019). Selon cette méthode, les interfaces sont décrites par l'intermédiaire d'un champ, souvent appelé paramètre d'ordre. Le champ de phase prend des valeurs distinctes dans chacune des phases et possède une décroissance rapide dans la zone d'interface. Ainsi, la plage sur laquelle elle change est la largeur de l'interface (Javierre et al., 2006).

La méthode d'enthalpie est une méthode simple pour résoudre le problème de changement de phase avec convection. La loi de conservation de l'énergie est formulée en termes d'enthalpie et les effets de la chaleur latente sont inclus dans la définition de celle-ci. Le changement de phase est ainsi modélisé en introduisant un terme source enthalpique dans l'équation de la chaleur. L'équation ainsi obtenue peut-être exprimée en fonction de l'enthalpie ou de la température. De plus, en satisfaisant une condition de vitesse nulle lorsque le liquide devient solide, cette équation s'applique alors à la fois aux phases liquides et solides et prend implicitement en compte la séparation des phases. Cette méthode a l'avantage d'être valable pour les MCP qui fondent sur une plage ou en un seul point de température. La formulation de l'en-

thalpie et les schémas de correction de la vitesse sont indépendants de la technique numérique utilisée (méthode des éléments finis, méthode des différences finies et méthode des volumes finis). Nous concentrons donc notre étude sur les méthodes enthalpiques, qui sont les modèles à domaine unique les plus utilisés en raison de leur simplicité algorithmique.

Cependant, dans les problèmes de changement de phase utilisant un mono-domaine, une vitesse nulle doit être garantie à l'intérieur de la phase solide. L'équation de quantité de mouvement doit être modifiée pour prendre en compte une transition de la phase liquide à la phase solide et ainsi garantir des valeurs de vitesse nulles. Il existe plusieurs méthodes dans la littérature qui peuvent être utilisées à cette fin.

La plus simple est la technique de désactivation, qui fixe directement la vitesse de la phase solide à zéro. Le principal inconvénient de cette méthode est qu'elle peut provoquer des discontinuités dans le champ d'écoulement à proximité des régions solide-liquide. Des variantes de cette méthode tel que la technique de désactivation à rampe permettent d'éliminer ces discontinuités. Différentes implémentations de ces techniques avec des méthodes de volumes finis sont présentées dans (Morgan, 1981; Ma and Zhang, 2006; Wang et al., 2010a).

Une deuxième technique, très répandue consiste à augmenter grandement et artificiellement la viscosité du fluide dans les régions solides. Cette méthode de viscosité variable, introduite par Gartling (1978), permet de résoudre le même système d'équations dans la phase liquide et solide en introduisant un coefficient de viscosité variable, qui prend des valeurs très importantes dans le solide. Les valeurs de viscosité élevées induisent une décélération de la vitesse progressive dans la phase solide par le biais d'une augmentation des termes diffusifs de l'équation de quantité de mouvement. Pour éviter l'explosion ou les incohérences numériques, les grands gradients de viscosité doivent être correctement résolus dans la zone mixte. Ceci est naturellement réalisé dans les méthodes d'éléments finis avec une adaptabilité dynamique du maillage (Danaila et al., 2014), tandis que dans les méthodes de volumes finis avec des grilles fixes, le pas de temps doit être adapté à la résolution spatiale (Ma and Zhang, 2006).

Une troisième technique pour satisfaire cette condition consiste à utiliser un terme de pénalisation en vitesse, ce qui permet de dissocier les points de calcul solides et liquides. Cela permet à la vitesse de diminuer progressivement dans la phase solide à travers une région intermédiaire dite "poreuse". Le changement de phase est supposé se produire sur un intervalle de température qui définit la largeur de cette région molle.

En ce qui concerne la résolution, les méthodes d'éléments finis et de volumes finis sont généralement privilégiées par rapport aux méthodes de différences finies en raison de leur capacité à traiter des mécanismes couplés dans des conditions aux limites variées et complexes. Cependant, la méthode des volumes finis est principalement utilisée avec une approche à maillage fixe, ce qui nécessite un raffinement significatif du maillage dans l'ensemble du domaine pour obtenir des simulations précises, et entraîne une augmentation considérable du temps de calcul (Voller et al., 1996; Wang et al., 2010b). Le choix d'utiliser la méthode des éléments finis est donc motivé par sa capacité à adapter dynamiquement le maillage et à traiter plusieurs domaines géométriques. De plus, l'avantage de la méthode des éléments finis est de permettre une mise en œuvre directe de différents types de non-linéarités.

Dans la méthode des éléments finis, la stabilité du schéma numérique pour résoudre les équations de Navier-Stokes est dictée par la condition inf-sup. En effet, lorsque cette condition

est satisfaite uniformément au niveau discret, le caractère bien posé du problème sous-jacent est assuré. Par conséquent, celui-ci ne présente pas de modes parasites. Il a été prouvé qu'un grand nombre d'éléments finis satisfont la condition inf-sup, par exemple l'élément classique de Taylor-Hood. L'utilisation d'un élément fini de Taylor-Hood pour les inconnues de la vitesse et de la pression assure donc la convergence de la méthode (Aldbaissey et al., 2018). La stabilité d'un schéma d'approximation par éléments finis avec condition inf-sup pour les problèmes de changement de phase a été évaluée par Woodfield et al. (2019). En revanche, la paire d'éléments finis P_1 - P_1 ne satisfait pas cette condition : l'espace des éléments finis pour la vitesse n'est pas assez riche pour contrôler les modes de pression parasites. L'apparition d'oscillations de pression non physiques a été mise en évidence par Ern and Guermond (2002) (paragraphe 5.2.5). Plusieurs méthodes ont été introduites pour supprimer les modes parasites. L'une des plus couramment employées consiste à enrichir l'espace des vitesses en ajoutant un degré de liberté par élément, associé au barycentre de l'élément. Ce nouvel élément fini, appelé P_{1b} , peut être utilisé pour de nombreuses équations différentielles. Afin d'éviter le problème d'instabilité lié au choix de l'élément fini P_1 pour la vitesse, plusieurs méthodes induisent des espaces discrets plus petits pour l'inconnue de pression et/ou utilisent une stabilisation supplémentaire : la stabilisation par projection (Chacón Rebollo et al., 2013; de Frutos et al., 2019), la stabilisation basée sur deux intégrations locales de Gauss (Li and He, 2008; Zhang et al., 2014), la stabilisation par pression symétrique (Burman and Fernández, 2009), et bien d'autres. Afin d'éviter le problème d'instabilité lié au choix de l'élément fini P_1 pour la vitesse, l'utilisation d'une stabilisation supplémentaire est nécessaire. Dans le chapitre 4, nous analysons la stabilisation de la pression minimale proposée par Brezzi and Fortin (1991) en termes d'estimations d'erreurs.

1.3. Approche numérique utilisée

La présente étude est basée sur un modèle enthalpie-porosité à domaine unique pour les problèmes de changement de phase solide-liquide avec convection. Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement considérées sont les équations incompressibles de Navier-Stokes avec l'approximation de Boussinesq pour les effets de flottabilité. Elles sont résolues dans tout le domaine et la vitesse est ramenée à zéro dans la phase solide en introduisant un terme de pénalité suivant le modèle de Carman-Kozeny. Le système est couplé à l'équation de conservation de l'énergie dont la formulation est basée sur la température. Cette équation prend en compte la chaleur latente en introduisant un terme source discontinu. Le système d'équations ainsi obtenu est intégré dans le temps en utilisant un schéma de Gear du second ordre. Tous les termes sont traités implicitement et les équations discrétisées résultantes sont résolues à l'aide d'une méthode de Newton (Danaila et al., 2014; Rakotondrandisa et al., 2020). Les paramètres variables et discontinus (chaleur latente, diffusivité thermique, etc.) à l'interface solide-liquide sont régularisés par une région poreuse artificielle. Pour la discrétisation de l'espace, un terme de stabilisation de la pression minimale est introduit (Brezzi and Fortin, 1991), permettant l'utilisation des éléments finis linéaires P_1 pour la vitesse et la pression. Cependant, nous utilisons généralement des éléments finis triangulaires de Taylor-Hood, c'est-à-dire P_2 pour la vitesse et P_1 pour la pression.

Le code développé est basé sur la Toolbox développée par Rakotondrandisa et al. (2020),

disponible en open source. Il a été implémenté en utilisant le logiciel FreeFem++ (Hecht, 2012; Hecht et al., 2007), qui est un logiciel libre (sous licence LGPL). FreeFem++ est reconnu pour sa performance dans l'implémentation des méthodes numériques. Il offre une grande flexibilité dans la génération de maillages grâce à son générateur de maillage avancé. En tant que logiciel d'éléments finis, FreeFem++ présente également l'avantage d'avoir une syntaxe proche des formulations mathématiques, ce qui facilite l'implémentation des algorithmes numériques. De plus, FreeFem++ propose des fonctionnalités avantageuses telles que la parallélisation des calculs et une fonctionnalité d'adaptation de maillage simple à utiliser, qui permet de réduire le nombre de degrés de liberté d'un problème et donc le temps de calcul associé, tout en maintenant un haut niveau de précision. Ainsi, FreeFem++ offre un environnement puissant et flexible pour résoudre une large gamme de problèmes physiques et mathématiques, notamment en mécanique des fluides.

La méthode des éléments finis s'est avérée très efficace pour la simulation numérique des matériaux à changement de phase, décrits par les équations de Navier-Stokes complétées par une approximation de Boussinesq pour la convection naturelle et un modèle enthalpique pour l'évolution de la température, notamment lorsqu'ils sont combinés à un raffinement adaptatif du maillage (Belhamadia et al., 2019; Rakotondrandisa et al., 2020). Nous utilisons donc la fonction standard d'adaptation du maillage (`adaptmesh`) proposée par FreeFem++ (Hecht, 2012) avec les paramètres d'adaptations de maillage développées par Rakondrandisa (2019). Leurs paramètres ont été optimisés pour permettre le raffinement du maillage à chaque pas de temps : la densité du maillage a été augmentée autour des interfaces de changement de phase, offrant une résolution optimale des grands gradients de toutes les fonctions régularisées, tandis que le maillage a été déraffiné (triangles plus grands) dans la partie solide.

1.4. Objectif de la thèse

Les problèmes de changement de phase sont un défi du point de vue numérique. La méthode numérique doit capturer correctement les cellules de convection dans la région fluide. De plus, elle doit capturer avec précision l'interface solide-liquide. Cette difficulté réside principalement dans la variation très nette des divers coefficients des équations (capacité thermique, chaleur latente, chaleur spécifique, etc.) dans une petite région autour de l'interface solide-liquide. Un premier travail a été réalisé par Rakotondrandisa et al. (2020), qui a développé une Tool-Box pour le logiciel FreeFem++. Cette ToolBox permet la résolution des équations de Navier-Stokes-Boussinesq adimensionnées pour des MCP présentant des coefficients constants. Une deuxième ToolBox a été développée par Sadaka et al. (2020) pour le calcul parallèle de systèmes à changement de phase liquide-solide en 2-dimensions et 3-dimensions impliquant la convection naturelle.

Des recherches approfondies ont été menées sur différents aspects de la méthode numérique utilisée, notamment sur le choix du schéma d'intégration temporelle, les paramètres d'adaptabilité du maillage, ainsi que la valeur de la constante de Carman-Kozeny. De plus, une approche d'initialisation de la fusion a été proposée, qui consiste à augmenter progressivement la température de la paroi chaude et le nombre de Rayleigh sur une courte période de temps, afin d'atteindre les valeurs souhaitées.

La précision de la méthode numérique a été validée sur des cas tests théoriques, en calculant les ordres de convergence en espace et en temps. Par la suite, une validation plus approfondie a été réalisée en simulant la convection naturelle de l'air dans des enceintes carrées, ainsi que la fusion et la solidification de matériaux à changement de phase carrés et cylindriques.

Leur étude a également démontré la robustesse de la méthode en effectuant un cycle complet de fusion et de solidification. Ces résultats ont confirmé la fiabilité et l'efficacité de la méthode numérique dans la résolution de problèmes complexes de convection et de changement de phase à coefficients constants.

Ce travail s'inscrit dans la continuité des études réalisées au laboratoire de mathématiques Raphaël Salem sur les MCP. Un premier objectif de cette thèse est d'améliorer le code existant et de valider les codes numériques. A cet effet, les objectifs suivants ont été abordés :

- Analyse numérique en vue de prouver la convergence de la méthode pour les MCP.
- Adapter les méthodes proposées pour prendre en compte la variabilité des coefficients physiques : conductivité thermique, capacité thermique, masse volumique.
- Étendre le programme aux équations physiques.
- Initialiser la fusion du MCP avec une approche physique, c'est à dire avec la solution analytique du problème de Stefan.
- Tester ces codes sur différentes configurations $1D$, $2D$ présentées dans la littérature. Vérifier les propriétés attendues et comparer les résultats à des données expérimentales.
- Étudier des cas difficiles en simulant des géométries complexes (MCP cylindrique, MCP avec présence d'ailettes, MCP en série, cavité accolée MCP-AIR).

Dans le modèle numérique, un paramètre de pénalisation a été introduit pour remplir la diagonale du terme de pression au niveau algébrique, lorsqu'une condition limite de Dirichlet est appliquée pour la vitesse. Une étude du paramètre de pénalisation a été réalisée en calculant la valeur moyenne du champ de pression et du champ de vitesse sans divergence. Il a été conclu que choisir une valeur de 10^{-7} pour ce paramètre assurait une bonne approximation du champ de pression avec une moyenne nulle. Cependant, un bon choix de la valeur de ce paramètre d'un point de vue théorique permet d'assurer la convergence pour les éléments finis d'ordre le plus bas. Un deuxième objectif de cette thèse a donc été d'étudier cette procédure de stabilisation en termes d'estimation d'erreur et de déterminer la valeur optimale du terme de pénalisation pour assurer la convergence du modèle.

1.5. Organisation du mémoire

Le chapitre 2 rappelle les fondements mathématiques et physiques du système numérique utilisé pour simuler des problèmes de changement de phase avec convection naturelle. Nous présentons en détail le modèle enthalpie-porosité utilisé pour l'équation d'énergie. Ensuite, nous rappelons l'équation de Navier-Stokes avec l'approximation de Boussinesq pour modéliser la convection naturelle dans l'écoulement du liquide. L'approche à domaine unique, qui utilise le terme de pénalité de Carman-Kozeny, est ensuite exposée pour résoudre ce système d'équations dans tout le domaine. Enfin, le système d'équations sans dimension est décrit

en détail. Une dernière section est consacrée à l’algorithme numérique utilisé pour résoudre le système précédemment présenté. L’algorithme d’éléments finis est présenté, incluant le schéma d’intégration temporelle, la discrétisation des éléments finis et la méthode de Newton.

Une première évaluation de la méthode numérique décrite dans le chapitre 2 est réalisée dans le chapitre 3. Notre approche enthalpique est validée sur un cas de fusion d’un MCP sans convection pour lequel une solution analytique est disponible, à savoir le problème de Stefan. Nous commençons par détailler cette solution analytique, puis nous appliquons notre modèle enthalpique sans convection afin de comparer les résultats obtenus. Les distributions de température et la position de l’interface sont ainsi validées pour un cas simple de fusion d’un MCP à coefficients variables. Le problème de Stefan est également utilisé comme référence pour comparer notre méthode enthalpique à la méthode du C_p -modifié proposée par Kabbara et al. (2016). Nous décrivons en détail cette approche et effectuons une comparaison avec notre méthode enthalpique. Les similitudes et les différences sont illustrées numériquement et expliquées théoriquement.

Le chapitre 4 est consacré à l’analyse numérique des équations décrivant le phénomène de convection naturelle. Des estimations d’erreur a priori en utilisant la paire d’éléments finis $P_l - P_l$ ($l \geq 1$), associée à la stabilisation de la pression minimale introduite par Brezzi and Fortin (1991) sont démontrées. Une première estimation d’erreur est démontrée en utilisant les propriétés d’interpolants bien connus tels que l’interpolant de Clément ou de Scott-Zhang (Ciarlet Jr, 2013). Ensuite, une projection de Stokes modifiée est introduite pour améliorer le taux de convergence. Une nouvelle estimation d’erreur est établie en utilisant cette nouvelle projection de Stokes modifiée. Les estimations résultantes sont ensuite illustrées numériquement sur différents cas de test (manufacturés et physiques). De plus, l’utilisation de ces éléments finis stabilisés permet de réduire le coût de calcul, comme cela est démontré pour la convection naturelle en 2D et 3D. Les résultats obtenus ont fait l’objet d’un article publié à *Computers and Mathematics with Applications*, co-écrit avec Francky Luddens et Ionut Danaïla (Cécile Legrand, 2022).

Le chapitre 5 se concentre sur la résolution numérique du problème de changement de phase plus complexe décrit par les équations de Navier-Stokes-Boussinesq présentées dans le chapitre 2. Tout d’abord, plusieurs cas test de fusion de MCP à coefficients constants sont implémentés (Okada, 1984; Bertrand et al., 1999; Luo et al., 2015). Ces différents tests permettent de valider le fonctionnement des codes en comparant la position de l’interface obtenue avec les résultats de la littérature. Ensuite, une deuxième étude portant sur un MCP à coefficients variables est présentée. Elle est basée sur une étude expérimentale de fusion de MCP dans une cavité rectangulaire (Kamkari et al., 2014). Ce cas test nous permet de comparer nos résultats numériques avec les données expérimentales et ainsi valider notre méthode numérique pour les MCP à coefficients variables. De plus, une nouvelle approche pour la mise en place d’une couche fluide très mince à température isotherme au voisinage de la paroi chaude est présentée. Celle-ci consiste à initier la température par la distribution de température analytique du problème de Stefan, ce qui permet de se rapprocher au plus près des phénomènes physiques présents lors du début de fusion.

Dans le chapitre 6, l’accent est mis sur la simulation de différentes configurations plus complexes. Un premier cas d’étude concerne la fusion d’un MCP à coefficients variables dans un domaine cylindrique, tandis qu’un deuxième cas d’étude modélise la fusion d’un

MCP avec des inclusions métalliques dans son domaine (Kamkari and Shokouhmand, 2014). La présence de ces inclusions métalliques rend le transfert de chaleur plus complexe. Ces modèles démontrent la capacité de notre code à traiter avec succès des géométries plus complexes. Un troisième cas d'étude porte sur la mise en série de plusieurs MCP, chacun ayant une température de fusion différente. Cette configuration géométrique représente un défi numérique, nécessitant un code robuste capable de prendre en compte les différentes propriétés des matériaux et les particularités du domaine. Enfin, une dernière étude présente une cavité remplie d'air adjacente à un MCP. Ce test nécessite la modélisation de la convection naturelle d'un côté et la fusion d'un MCP de l'autre côté, ce qui nous permet de démontrer la capacité de notre code à traiter deux domaines où les phénomènes physiques diffèrent.

2. Modèle mathématique pour les systèmes à changement de phase

Tout d'abord, nous donnons une description détaillée de l'approche à un seul domaine, qui utilise le même système d'équations dans les deux phases. Le modèle est basé sur les équations de Navier-Stokes avec une approximation de Boussinesq, qui est une description simplifiée de l'écoulement du fluide avec convection naturelle. Afin de garantir une vitesse nulle à l'intérieur de la région solide, un terme de pénalité est ajouté aux équations de quantité de mouvement. Pour modéliser le processus de changement de phase, nous utilisons une méthode d'enthalpie-porosité dans l'équation de conservation de l'énergie. Nous présentons ensuite en détail la méthode numérique utilisée.

2.1. Méthode d'enthalpie-porosité

Le processus de changement de phase est modélisé par une méthode d'enthalpie avec une formulation basée sur la température : (Voller et al., 1987; Cao et al., 1989; Cao and Faghri, 1990). Nous partons de l'équation de l'énergie :

$$\frac{\partial h}{\partial t_\varphi} + \nabla \cdot (h\mathbf{U}) - R_T \nabla \cdot (K(T)\nabla T) = 0, \quad (2.1)$$

où t_φ est le temps physique, h l'enthalpie, \mathbf{U} le vecteur vitesse, T la température, R_T une constante valant k_l et K la conductivité thermique locale. Pour les matériaux purs, K est théoriquement une fonction de Heaviside dépendant de la température, qui prend la valeur 1 dans la région liquide et k^* dans la région solide. k^* désigne le rapport de la conductivité thermique entre la phase solide et la phase liquide, défini comme $k^* = k_s/k_l$.

Notons $c(T)$ la chaleur spécifique locale et $\rho(T)$ la masse volumique locale. Ces deux fonctions sont également des fonctions de Heaviside qui dépendent de la température. Dans la région liquide, $c(T)$ prend la valeur c_l (capacité thermique spécifique du liquide) et $\rho(T)$ prend la valeur ρ_l . Dans la région solide, $c(T)$ prend la valeur c_s (capacité thermique spécifique du solide) et $\rho(T)$ prend la valeur ρ_s . Notons T_0 la température initiale, inférieure à la température de fusion T_f .

L'enthalpie totale h est transformée comme la somme de la chaleur sensible et de la chaleur latente :

$$\begin{aligned} h &= h_{sen} + h_{lat} \\ &= \int_{T_0}^T \rho(T)c(T)dT + R_s\varphi_L(T) \\ &= \rho(T)c(T)(T - T_f) + R_s\varphi_L(T) + \rho_s c_s(T_f - T_0), \end{aligned} \quad (2.2)$$

Le terme source $R_s\varphi_L(T)$ est introduit pour modéliser la variation d'enthalpie lors de la transition solide-liquide. R_s est une constante qui est égale à $\rho_l h_{sl}$, où h_{sl} désigne la chaleur latente de fusion dans le cas du changement de phase solide-liquide. La fonction $\varphi_L(T)$ représente la fraction liquide et est définie comme une fonction échelon, prenant la valeur 0 dans la région solide et la valeur 1 dans la région liquide. Par conséquent, le terme source est nul dans la région solide et égal à $\rho_l h_{sl}$ dans la région liquide.

Nous définissons la fonction $C(T)$ par

$$C(T) = \rho(T)c(T) = \begin{cases} \rho_s c_s, & T < T_f \\ \rho_l c_l, & T \geq T_f \end{cases}. \quad (2.3)$$

Ainsi, l'expression de l'enthalpie totale (2.2) peut être reformulée de la manière suivante :

$$h = C(T)(T - T_f) + R_s\varphi_L(T) + \rho_s c_s(T_f - T_0). \quad (2.4)$$

Pour faciliter l'implémentation et la lecture, les fonctions $K(T)$ et $C(T)$ sont exprimées en fonction de la fraction liquide $\varphi_L(T)$ de la manière suivante :

$$K(T) = K_s + (K_l - K_s)\varphi_L(T) \quad \text{et} \quad C(T) = C_s + (C_l - C_s)\varphi_L(T), \quad (2.5)$$

où

$$\begin{cases} K_s = k^* \\ K_l = 1 \end{cases}, \quad \begin{cases} C_s = \rho_s c_s, \\ C_l = \rho_l c_l. \end{cases} \quad (2.6)$$

Si le changement de phase se produit sur un intervalle de température $T \in [T_f - T_\varepsilon, T_f + T_\varepsilon]$ autour de la température de fusion T_f , les fonctions échelons doivent alors être régularisées. Cela peut-être fait par des fonctions linéaires (Voller et al., 1987; Wang et al., 2010a) ou des fonctions plus lisses (Danaila et al., 2014) pour modéliser le saut des propriétés du matériau du solide au liquide. Les fonctions échelon, étant toutes définies en fonction de φ_L , peuvent être régularisées en remplaçant celle-ci par une fonction tangente hyperbolique continue et différentiable, définie pour tous les T par la formule (Danaila et al., 2014)

$$\varphi_L(T) = 1 + 0.5 \left\{ 1 + \tanh \left(\left(\frac{T_r - T}{\varepsilon} \right) \right) \right\}, \quad (2.7)$$

où T_r est la valeur centrale autour de laquelle on régularise, et ε le rayon de lissage. Sauf contre indications, T_r sera pris égal à T_f , la température de fusion. ε sera pris égal à 0.01 pour les configurations sans dimensions.

L'équation (2.1) peut être simplifiée en considérant les hypothèses suivantes :

- (i) Nous supposons que le phénomène de surfusion est négligeable pendant la phase de solidification (Wang et al., 2010b; Kowalewski and Gobin, 2004)
- (ii) Une variation de masse volumique induit une variation du volume du matériau subissant le changement de phase. Cette variation est négligée.
- (iii) La zone de régularisation est étroite et la vitesse à l'intérieur de cette zone est négligeable,

donc $\mathbf{U} = 0$ dans cette zone.

- (iv) Le terme de convection $R_s \nabla \cdot (\varphi_L(T)\mathbf{U})$ est négligé. Dans la phase solide, $\varphi_L(T) = 0$, dans la zone de régularisation, $\mathbf{U} = 0$ et dans la phase liquide, $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$.

Par conséquent, la forme finale de l'équation de l'énergie est obtenue en combinant les équations (2.1) et (2.4) :

$$\frac{\partial (C(T)(T - T_f))}{\partial t_\varphi} + \nabla \cdot (C(T)T\mathbf{U}) - R_T \nabla \cdot (K(T)\nabla T) + R_s \frac{\partial \varphi_L(T)}{\partial t_\varphi} = 0. \quad (2.8)$$

Afin d'éviter des instabilités numériques, l'équation d'enthalpie (2.8) est divisée par $\rho_l c_l$. Cette division entraîne une modification des paramètres de la façon suivante :

$$R_T = \alpha_l, \quad R_s = h_{sl}/c_l. \quad (2.9)$$

De plus, les paramètres de la fonctions $C(T)$ deviennent :

$$\begin{cases} C_s &= \rho^* c^*, \\ C_l &= 1, \end{cases} \quad (2.10)$$

où c^* désigne le rapport de la capacité thermique spécifique entre la phase solide et la phase liquide, défini comme $c^* = c_s/c_l$. De même, ρ^* désigne le rapport de masse volumique entre la phase solide et la phase liquide, défini comme $\rho^* = \rho_s/\rho_l$.

Dans ce modèle, la position de l'interface est déterminée implicitement en identifiant l'iso-ligne de température où $T = T_f$. Cela permet de déterminer implicitement la position de l'interface en fonction des conditions de température, sans avoir à imposer explicitement la condition de Stefan (voir chapitre 3-tableau 3.2).

2.2. Équations de Navier-Stokes avec l'approximation de Boussinesq

La convection naturelle dans la partie liquide du système est modélisée en utilisant les équations incompressibles de Navier-Stokes, avec l'approximation de Boussinesq pour les effets de flottabilité. Pour que ce modèle soit valable à la fois pour les phases liquide et solide, l'équation de conservation de la quantité de mouvement est écrite sous la forme :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t_\varphi} + (\mathbf{U} \cdot \nabla)\mathbf{U} + \frac{1}{\rho_{ref}} \nabla P - \frac{\mu_l}{\rho_{ref}} \nabla^2 \mathbf{U} + \rho_{ref} g \mathbf{e}_y = A(T)\mathbf{U}, \quad (2.11)$$

où P désigne la pression, μ_l la viscosité dynamique du fluide supposée constante, et g l'accélération gravitationnelle.

La vitesse, la pression, la viscosité et la force de Boussinesq n'ont pas de sens dans la

phase solide. Le terme de pénalité $A(T)\mathbf{U}$ est artificiellement introduit dans l'équation (2.11) pour étendre cette équation dans la phase solide. $A(T)$ est donc théoriquement nul dans le liquide, où l'équation de quantité de mouvement de Navier-Stokes-Boussinesq est récupérée. Une grande valeur de $A(T)$ est imposée dans le solide, réduisant l'équation de quantité de mouvement (2.11) à $A(T)\mathbf{U} = 0$, équivalent à $\mathbf{U} = 0$. L'expression exacte de A est donnée par (2.19).

L'approximation de Boussinesq suppose que la masse volumique est constante partout sauf dans le terme de flottabilité $\rho_{ref}g\mathbf{e}_y$ de l'équation (2.11). Sous l'hypothèse d'une faible variation de la masse volumique et de la température, l'approximation de Boussinesq permet de linéariser la masse volumique de la façon suivante :

$$\rho = \rho_{ref}(1 - \beta(T - T_{ref})), \quad (2.12)$$

où $\beta = -(1/\rho_{ref})(\partial\rho/\partial T)_{\rho_{ref}}$ est le coefficient de dilatation thermique, et (ρ_{ref}, T_{ref}) un état de référence. Nous avons $\rho_{ref} = \rho_l$. Il convient de noter que cette approximation est valable pour $\beta(T - T_{ref})$ considérablement plus petit que l'unité. Par conséquent, l'équation (2.11) peut s'écrire comme

$$\frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t_\varphi} + (\mathbf{U} \cdot \nabla)\mathbf{U} + \nabla p - \nu_l \nabla^2 \mathbf{U} - f_B(T - T_{ref})\mathbf{e}_y = A(T)\mathbf{U}, \quad (2.13)$$

où $\nu_l = \mu_l/\rho_l$ est la viscosité cinématique, $p = (P + \rho_{ref}gy)/\rho_{ref}$ inclut la pression hydrostatique $\rho_{ref}gy$ et $f_B = g\beta$ désigne la constante de flottabilité.

Enfin, la conservation de la masse dans la phase liquide est exprimée par l'équation de continuité dans le cadre des fluides incompressibles :

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0. \quad (2.14)$$

Le système d'équations final pour l'approche mono-domaine est donc :

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = (2.15)$$

$$\frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t_\varphi} + (\mathbf{U} \cdot \nabla)\mathbf{U} + \nabla p - \nu_l \nabla^2 \mathbf{U} - f_B(T - T_{ref})\mathbf{e}_y - A(T)\mathbf{U} = (2.16)$$

$$\frac{\partial(C(T)(T - T_f))}{\partial t_\varphi} + \nabla \cdot (C(T)(T - T_f)\mathbf{U}) - R_T \nabla \cdot (K(T)\nabla T) + R_s \frac{\partial\varphi_L(T)}{\partial t_\varphi} = (2.17)$$

Le terme de pénalité A dans l'équation de quantité de mouvement (2.16) est dérivé de la loi de Darcy, en modélisant l'écoulement du fluide dans la région molle comme un écoulement à travers un milieu poreux. L'équation bien connue dérivée de la loi de Darcy est le modèle de Carman-Kozeny :

$$\nabla p = -\frac{C_{ck}(1 - \lambda)^2}{\lambda^3} \mathbf{u}. \quad (2.18)$$

Par conséquent, A prend la forme (Belhamadia et al., 2012; Kheirabadi and Groulx, 2015)

$$A(T) = -\frac{C_{\text{ck}}(1 - \varphi_L(T))^2}{\varphi_L(T)^3 + b}, \quad (2.19)$$

où $\varphi_L(T)$ est la fraction liquide locale régularisé à l'intérieur de la région molle artificielle définie par (2.7). La constante de Carman-Kozeny C_{ck} est fixée à une grande valeur et la constante $b = 10^{-6}$ est introduite pour éviter les divisions par zéro.

Différentes études sont consacrées au choix d'une valeur appropriée de C_{ck} . Cette constante a une influence significative sur la forme et la position de l'interface solide-liquide. Cependant, jusqu'à présent, aucune étude permettant de déterminer analytiquement cette constante n'a été établie. Par conséquent, nous nous appuyons sur l'étude numérique réalisée par (Rakondrandisa, 2019), qui a identifié une valeur pertinente de C_{ck} produisant d'excellents résultats sur différents cas test. Dans la suite de notre étude, sauf indications contraires, nous prenons une valeur de C_{ck} égale à 10^6 .

2.3. Adimensionnement du système d'équations pour l'approche mono-domaine

Il est pratique de résoudre numériquement une forme sans dimension des équations précédentes. Pour ce faire, nous choisissons une longueur de référence L_{ref} (généralement la hauteur de la cavité dans le cas d'un domaine rectangulaire) ainsi qu'un état de référence $(\rho, V_{\text{ref}}, T_{\text{ref}})$. En utilisant ces références, nous pouvons définir les échelles suivantes pour les variables d'espace, de vitesse, de température et de temps :

$$\mathbf{x} = \frac{\mathbf{X}}{L_{\text{ref}}}, \quad \mathbf{u} = \frac{\mathbf{U}}{U_{\text{ref}}}, \quad \theta = \frac{T - T_{\text{ref}}}{\delta T}, \quad t = \frac{V_{\text{ref}}}{L_{\text{ref}}} t_{\varphi}. \quad (2.20)$$

Dans la plupart des cas, $T_{\text{ref}} = T_f$ (température de fusion). Par conséquent, la température de fusion adimensionnée est fixée à $\theta_f = 0$. La différence de température δT définit une échelle de température, choisie différemment pour les cas de fusion, solidification ou de convection naturelle sans changement de phase. Concernant la convection naturelle, δT est généralement défini comme $\delta T = T_h - T_c$ puisque le flux dans le fluide est entraîné par la différence de température entre la température chaude (T_h) et la température froide (T_c). Pour le MCP en fusion, la convection est déterminée par la différence de température $\delta T = T_h - T_f$. En ce qui concerne le processus de solidification, une discussion distincte est nécessaire.

Le système d'équations adimensionnées à résoudre s'écrit alors sous la même forme

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{u} - f_B \theta \mathbf{e}_y - A(\theta) \mathbf{u} = 0, \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial (C(\theta)\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (C(\theta)\theta \mathbf{u}) - R_T \nabla \cdot (K(\theta) \nabla \theta) + R_s \frac{\partial \varphi_L(\theta)}{\partial t} = 0. \quad (2.23)$$

où désormais, $f_B \theta e_y$ est la force de flottabilité de Boussinesq linéarisée avec le coefficient f_B adimensionné défini par

$$f_B = \frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{P}r \mathcal{R}e^2}. \quad (2.24)$$

$\mathcal{R}e$ est le nombre de Reynolds reliant les forces d'inertie aux forces visqueuses, et $\mathcal{P}r$ est le nombre de Prandtl exprimant le rapport entre les diffusivités thermique et de quantité de mouvement des molécules :

$$\mathcal{R}e = \frac{\rho V_{ref} L_{ref}}{\mu_l} = \frac{V_{ref} L_{ref}}{\nu_l}, \quad \mathcal{P}r = \frac{\nu_l}{\alpha_l}, \quad (2.25)$$

où $\alpha_l = k_l / (\rho_l c_l)$ la diffusivité thermique du liquide.

Dans l'expression de f_B , le nombre de Rayleigh de l'écoulement, qui indique l'importance relative du terme de flottabilité par rapport aux effets visqueux, est défini par

$$\mathcal{R}a = \frac{g \beta L_{ref}^3 \delta T}{\nu_l \alpha_l}. \quad (2.26)$$

Le nombre de Rayleigh est le paramètre sans dimension le plus important en convection naturelle. Selon la valeur du nombre de Rayleigh, ainsi que d'autres paramètres, l'écoulement dans la cavité peut être laminaire, turbulent; une combinaison des deux régimes peut se produire dans différentes parties de la cavité. Les grandes cavités ont généralement un nombre de Rayleigh élevé, ce qui conduit le plus souvent à un écoulement turbulent.

La conductivité thermique est adimensionnée par rapport à la conductivité thermique dans la phase liquide. Le paramètre R_T adimensionné est donc défini par

$$R_T = \frac{1}{\mathcal{R}e \mathcal{P}r}. \quad (2.27)$$

La forme adimensionnée de R_s s'écrit :

$$R_s = \frac{h_{sl}}{c_l \delta T} = \frac{1}{Ste}, \quad (2.28)$$

où le nombre de Stefan Ste est défini par

$$Ste = c_l \delta T / h_{sl}, \quad (2.29)$$

avec $c_l \delta T$ la chaleur sensible stockée dans le matériau sur la plage de température δT . D'un point de vue énergétique, le nombre de Stefan est défini comme le rapport de l'énergie sensible à stocker ou à récupérer sur l'énergie thermique latente totale dans le même système. C'est un nombre clé pour résoudre le problème du transfert de chaleur pendant la solidification ou la fusion.

Trouver une vitesse de référence ayant une signification physique est complexe. Nous

présentons trois options couramment utilisées pour U_{ref} dans la littérature.

$$(1) : U_{ref}^{(1)} = \frac{\nu_l}{L_{ref}} \implies t_{ref}^{(1)} = \frac{L_{ref}^2}{\nu_l} \implies Re = 1, \quad (2.30)$$

$$(2) : U_{ref}^{(2)} = \frac{\alpha_l}{L_{ref}} \implies t_{ref}^{(2)} = t_{ref}^{(1)} Pr \implies Re = 1/Pr, \quad (2.31)$$

$$(3) : U_{ref}^{(3)} = \frac{\nu_l}{L_{ref}} \sqrt{\frac{Ra}{Pr}} \implies t_{ref}^{(3)} = t_{ref}^{(1)} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \implies Re = \sqrt{\frac{Ra}{Pr}}, \quad (2.32)$$

Le dernier choix (2.32) est généralement utilisé pour les problèmes classiques de convection naturelle, tandis que les deux premiers choix sont préférés pour les problèmes de fusion/solidification.

Il peut être complexe de passer d'une configuration physique (plus ou moins réaliste) à une configuration adimensionnée (difficulté dans la définition des nombres sans dimension). Par conséquent, il est utile de conserver le choix d'utiliser des grandeurs physiques ou adimensionnées. En remarquant que les équations sont similaires dans les deux cas, il est possible d'unifier les équations pour faciliter leur lecture et leur implémentation. Ainsi, nous considérons désormais les équations suivantes :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - R_u \nabla^2 \mathbf{u} - f_B (T - T_f) \mathbf{e}_y - A(T) \mathbf{u} = 0, \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial (C(T)(T - T_f))}{\partial t} + \nabla \cdot (C(T)(T - T_f) \mathbf{u}) - R_T \nabla \cdot (K(T) \nabla T) + R_s \frac{\partial \varphi_L(T)}{\partial t} = 0. \quad (2.35)$$

où les paramètres sont définis dans le tableau 2.1

MCP		
Constantes	Physique	Adimensionnés
R_u	ν_l	$\frac{1}{Re}$
R_s	$\frac{h_{sl}}{c_l}$	$\frac{1}{Ste}$
f_B	$g\beta$	$\frac{Ra}{Re^2 Pr}$
R_T	α_l	$\frac{1}{Re Pr}$
T_f	T_f	0

TABLE 2.1. – Paramètres du problème.

2.4. Méthode numérique

Pour résoudre le système d'équations (2.33) - (2.35), nous utilisons une méthode d'éléments finis. Les méthodes d'éléments finis pour résoudre les systèmes d'équations de type Navier-

Stokes sont généralement basées sur une discrétisation séparée de la dérivée temporelle, en utilisant des méthodes telles que les différences finies, le fractionnement ou la méthode des caractéristiques.

Une précision élevée dans la discrétisation spatiale et temporelle est nécessaire pour capturer la physique complexe du problème, en particulier pour déterminer avec précision l'interface liquide-solide. L'utilisation de discrétisations spatiales précises du second ordre dans les problèmes de fusion permet de choisir des pas de temps grand tout en garantissant une convergence.

Notre code numérique est basé sur un schéma entièrement implicite du second ordre (BDF2 ou GEAR). Ces schémas implicites sont connus pour leur stabilité et leur capacité à gérer efficacement des pas de temps plus importants, tout en préservant l'exactitude et la précision de la solution. Ainsi, la dérivée temporelle d'une variable ϕ est approximée par :

$$\frac{d\phi}{dt} \simeq \frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}}{2\delta t} = c_1\phi^{n+1} + c_2\phi^n + c_3\phi^{n-1}. \quad (2.36)$$

La solution ϕ^{n+1} au temps $t_{n+1} = (n+1)\delta t$ est calculée en utilisant deux états précédents (ϕ^n, ϕ^{n-1}). Nous utilisons ce schéma pour faire avancer dans le temps les champs de vitesse ($\phi = \mathbf{u}$) et de température ($\phi = T$). Les autres termes des équations (2.33) - (2.35) sont traités implicitement (c'est à dire pris au temps t_{n+1}). Les équations non linéaires résultantes sont résolues à l'aide d'un algorithme de Newton.

Sauf indication contraire, la discrétisation de l'espace est basée sur des éléments finis de Taylor-Hood, en approximant la vitesse avec des éléments finis de Lagrange P_2 (quadratiques par morceaux), et la pression avec les éléments finis P_1 (linéaires par morceaux). La température et l'enthalpie sont discrétisées à l'aide d'éléments finis P_1 ou P_2 .

Pour utiliser les approximations par éléments finis, une formulation faible du système d'équations (2.33) - (2.35) est nécessaire. Nous introduisons les espaces de Hilbert classiques :

$$V = H^1(\Omega), \quad X = H_0^1(\Omega), \quad Q = \left\{ q \in L^2(\Omega) \mid \int_{\Omega} q = 0 \right\}, \quad \mathbf{X} = X \times X, \quad (2.37)$$

et définissons les formes bilinéaires et trinéaires suivantes : pour $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{X}$, $p \in Q$, $T \in V$, et $\psi \in X$,

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\nabla \mathbf{u}, \nabla \mathbf{v}), \quad (2.38)$$

$$\bar{a}(T, \phi) = (\nabla T, \nabla \phi), \quad (2.39)$$

$$b(\mathbf{u}, p) = -(\nabla \cdot \mathbf{u}, p), \quad (2.40)$$

$$c(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \frac{1}{2} (\mathbf{u} \nabla \mathbf{v}, \mathbf{w}) - \frac{1}{2} (\mathbf{u} \nabla \mathbf{w}, \mathbf{v}), \quad (2.41)$$

$$\bar{c}(\mathbf{u}, T, \psi) = \frac{1}{2} (\mathbf{u} \nabla T, \psi) - \frac{1}{2} (\mathbf{u} \nabla \psi, T), \quad (2.42)$$

où $(u, v) = \int_{\Omega} u \cdot v$ désigne le produit scalaire dans $L^2(\Omega)$. Si $\mathbf{u} \in \mathbf{X}$ est tel que $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$,

les opérateurs (2.41)-(2.42) sont équivalents à

$$c(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \nabla \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} (\mathbf{u} \nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{w}, \quad (2.43)$$

$$\bar{c}(\mathbf{u}, T, \psi) = (\mathbf{u} \nabla T, \psi) = \int_{\Omega} (\mathbf{u} \nabla T) \psi. \quad (2.44)$$

Si (\mathbf{u}, p, T) est une solution des équations (2.33)-(2.34)-(2.35) et $(\mathbf{v}, q, \psi) \in \mathbf{X} \times L^2 \times X$, nous obtenons par intégration par parties la formulation faible suivante :

$$b(\mathbf{u}, q) = 0, \quad (2.45)$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}, \mathbf{v} \right) + c(\mathbf{u}; \mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, p) + R_u a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - (f_B(T - T_f) \mathbf{e}_y, \mathbf{v}) - (A(T) \mathbf{u}, \mathbf{v}) = 0 \quad (2.46)$$

$$\left(\frac{\partial C(T)(T - T_f)}{\partial t}, \psi \right) + \bar{c}(\mathbf{u}, C(T)(T - T_f), \psi) + R_T (K(T) \nabla T, \nabla \psi) \quad (2.47)$$

$$+ R_s \left(\frac{\partial \varphi_L(T)}{\partial t}, \psi \right) = 0$$

Nous utilisons la discrétisation implicite aux différences finies du second ordre (2.36) de la dérivée temporelle et obtenons la semi-discrétisation temporelle du modèle (2.33) - (2.35) :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} + \gamma_h p^{n+1} = 0, \quad (2.48)$$

$$c_1 \mathbf{u}^{n+1} + (\mathbf{u}^{n+1} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n+1} + \nabla p^{n+1} - R_u \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} - A(T^{n+1}) \mathbf{u}^{n+1} - f_B(T^{n+1} - T_f) \mathbf{e}_y = -c_2 \mathbf{u}^n - c_3 \mathbf{u}^{n-1}, \quad (2.49)$$

$$c_1 C(T^{n+1})(T^{n+1} - T_f) + c_1 R_s \varphi_L(T^{n+1}) + \nabla \cdot (C(T^{n+1}) \mathbf{u}^{n+1} (T^{n+1} - T_f)) - R_T \nabla \cdot (K(T^{n+1}) \nabla T^{n+1}) = -c_2 (T^n - T_f) - c_2 R_s \varphi_L(T^n) - c_3 (T^{n-1} - T_f) - c_3 R_s \varphi_L(T^{n-1}). \quad (2.50)$$

Le terme de pénalisation ajouté à l'équation de conservation de la masse discrétisée est le terme de stabilisation de la pression minimale introduite par (Brezzi and Fortin, 1991). Lors de l'utilisation des éléments finis de Taylor-Hood, ce terme de pénalisation évite l'utilisation de pivot en éliminant un bloc nul dans la matrice de discrétisation. Il garantit également que la pression discrétisée soit à moyenne nulle. Comme décrit précédemment, ce terme joue également le rôle de stabilisateur lors de l'utilisation de l'élément fini minimal P_1 pour la vitesse et la pression. Une étude détaillée du paramètre γ_h est effectuée dans le chapitre 4.

La discrétisation spatiale des variables sur le domaine Ω utilise une méthode par éléments finis basée sur une formulation faible du système d'équations (2.48) - (2.50). Nous considérons des conditions aux limites homogènes de Dirichlet pour la vitesse, *i. e.* $\mathbf{u} = 0$ sur $\partial\Omega$. Suivant la généralisation du problème de Stokes (Temam, 1983; Girault and Raviart, 1986a; Quarteroni and Valli, 1994), la formulation variationnelle du système d'équations (2.48) - (2.50) peut

être écrite comme suit : trouver $(\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}, T^{n+1}) \in \mathbf{X} \times Q \times V$, tel que

$$b(\mathbf{u}^{n+1}, q) - \gamma_h(p^{n+1}, q) = 0, \quad \forall q \in Q$$

$$\begin{aligned} c_1(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}) + c(\mathbf{u}^{n+1}; \mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}) + R_u a(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}) - (A(T^{n+1}) \mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}) \\ + b(\mathbf{v}, p^{n+1}) - (f_B(T^{n+1} - T_f) \mathbf{e}_y, \mathbf{v}) = -c_2(\mathbf{u}^n, \mathbf{v}) - c_3(\mathbf{u}^{n-1}, \mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{X} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_1(C(T^{n+1})(T^{n+1} - T_f), \phi) + c_1 R_s(\varphi_L(T^{n+1}), \phi) \\ + (C(T^{n+1}) \mathbf{u}^{n+1}(T^{n+1} - T_f), \nabla \phi) + R_T(K(T^{n+1}) \nabla T^{n+1}, \nabla \phi) = -c_2(T^n - T_f, \phi) \\ - c_2 R_s(\varphi_L(T^n), \phi) - c_3(T^{n-1} - T_f, \phi) - c_3 R_s(\varphi_L(T^{n-1}), \phi), \quad \forall \phi \in X. \end{aligned}$$

Le système d'équations non linéaires (2.45) - (2.46), considéré comme une équation générale $\mathcal{F}(w) = 0$, avec $w = (\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}, T^{n+1})$, est résolu en utilisant une méthode de Newton. Pour faire progresser la solution du temps t_n à t_{n+1} , on part d'une estimation initiale $w_0 = (\mathbf{u}^n, p^n, T^n)$ (qui est la solution à t_n) et on construit la séquence de Newton $w_k = (u_k, p_k, T_k)$ en la résolvant pour chaque itération interne k :

$$D_w \mathcal{F}(w_k) w_{k+1} = D_w \mathcal{F}(w_k) w_k - \mathcal{F}(w_k). \quad (2.51)$$

$D_w \mathcal{F}$ est l'opérateur linéaire représentant la différentielle de \mathcal{F} . L'équation (2.51) peut être réécrite comme ci-dessous :

$$b(\mathbf{u}_{k+1}, q) - \gamma_h(p_{k+1}, q) = 0, \quad (2.52)$$

$$\begin{aligned} c_1(\mathbf{u}_{k+1}, \mathbf{v}) + c(\mathbf{u}_{k+1}; \mathbf{u}_k, \mathbf{v}) + c(\mathbf{u}_k; \mathbf{u}_{k+1}, \mathbf{v}) + R_u a(\mathbf{u}_{k+1}, \mathbf{v}) \\ - (A'(T_k) T_{k+1} \mathbf{u}_k, \mathbf{v}) - (A(T_k) \mathbf{u}_{k+1}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, p_{k+1}) - (f_B T_{k+1} \mathbf{e}_y, \mathbf{v}) \\ = - (c_2 \mathbf{u}^n + c_3 \mathbf{u}^{n-1}, \mathbf{v}) + c(\mathbf{u}_k; \mathbf{u}_k, \mathbf{v}) - (A'(T_k) T_k \mathbf{u}_k, \mathbf{v}) + (f_B T_f \mathbf{e}_y, \mathbf{v}), \end{aligned} \quad (2.53)$$

$$\begin{aligned} c_1(C'(T_k)(T_k - T_f) T_{k+1}, \phi) + c_1(C(T_k) T_{k+1}, \phi) + c_1 R_s(\varphi'_L(T_k) T_{k+1}, \phi) \\ - (C'(T_k)(T_k - T_f) \mathbf{u}_k T_{k+1}, \nabla \phi) - (C(T_k)(T_k - T_f) \mathbf{u}_{k+1}, \nabla \phi) \\ - (C(T_k) \mathbf{u}_k T_{k+1}, \nabla \phi) + R_T(K'(T_k) T_{k+1} \nabla T_k, \nabla \phi) + R_T(K(T_k) \nabla T_{k+1}, \nabla \phi) \\ = c_1(C'(T_k)(T_k - T_f) T_k, \phi) + c_1 R_s(\varphi'_L(T_k) T_k, \phi) - (C'(T_k)(T_k - T_f) T_k \mathbf{u}_k, \nabla \phi) \\ - (C(T_k) T_k \mathbf{u}_k, \nabla \phi) + R_T(K'(T_k) T_k \nabla T_k, \nabla \phi) + c_1(C(T_k) T_f, \phi) \\ - c_2(C(T^n)(T^n - T_f), \phi) - c_3(C(T^{n-1})(T^{n-1} - T_f), \phi) - c_1 R_s(\varphi_L(T_k), \phi) \\ - c_2 R_s(\varphi_L(T^n), \phi) - c_3 R_s(\varphi_L(T^{n-1}), \phi). \end{aligned} \quad (2.54)$$

La boucle de Newton, suivant k doit être itérée jusqu'à convergence pour chaque pas de

temps δt suivant l'algorithme

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Navier-Stokes time loop following } n \\ \text{set } w_0 = (\mathbf{u}^n, p^n, T^n) \\ \left\| \begin{array}{l} \text{Newton iterations following } k \\ \text{solve Eqs. (2.52) - (2.54) to get } \mathbf{w}_{k+1} \\ \text{stop when } \|\mathbf{w}_{k+1} - \mathbf{w}_k\| < \xi_N \\ \text{actualize } (\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}, T^{n+1}) = w_{k+1}. \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (2.55)$$

La syntaxe pour implémenter l'algorithme de Newton est très proche de la formulation mathématique donnée ci-dessus.

Dans le chapitre 3 nous validons le modèle d'enthalpie pour la modélisation du changement de phases des MCP à coefficients variables. Cette validation est réalisée sur un cas plus simple, sans convection naturelle et pour lequel des solutions analytiques sont disponibles : le problème de Stefan. Nous adaptons également notre méthode numérique à ce cas spécifique et la validons en comparant les résultats avec les solutions analytiques.

Par la suite, dans le chapitre 5, nous mettons en pratique notre modèle sur divers cas tests de fusion avec convection naturelle, dans diverses configurations. Ces cas test permettent d'évaluer l'efficacité et la précision de notre méthode dans des situations plus complexes et réalistes.

3. Problème de Stefan

3.1. Description physique du problème

Le phénomène de changement de phase solide-liquide a été étudié pour la première fois par **Lamé and Clapeyron (1831)**, puis par **Stefan (1889)**, dont le nom est désormais synonyme de cette classe de problèmes.

Les matériaux subissant un changement de phase avec absorption stockent la chaleur de manière isotherme, à la température de fusion. Dans le processus inverse, lorsqu'un puits de chaleur ou une source de chaleur froide est appliquée au matériau en fusion, celui-ci commence à libérer de la chaleur et à se solidifier. Le problème de Stefan est probablement le modèle mathématique le plus simple décrivant ce phénomène de changement de phase. Il a pour but de décrire l'évolution de la frontière entre les deux phases (le front de fusion ou de solidification) d'un matériau subissant un changement de phase. La position de l'interface entre les deux phases dans le temps étant inconnu, le problème de Stefan représente un exemple de problèmes de frontière libre. Afin de décrire l'évolution de la frontière entre les deux phases, on résout les équations de la chaleur dans les deux régions (liquide et solide), sous réserve de conditions aux limites et initiales données. À l'interface entre les phases, la température est fixée à la température de changement de phase. Pour fermer le système mathématique et obtenir une solution unique, une condition sur la frontière évolutive est nécessaire, la condition de Stefan. Il s'agit d'un bilan énergétique qui définit la position de l'interface mobile.

L'existence d'une solution analytique offre une référence fiable pour la validation de différentes méthodes numériques. Ce problème s'avère être une approche initiale idéale pour valider notre méthode.

Dans ce chapitre, notre objectif est de valider la méthode d'enthalpie à coefficients variables décrite dans le chapitre 2 en l'appliquant au problème de Stefan. Nous étudions donc l'équation (2.35) sans le terme de convection et comparons les résultats numériques obtenus avec la solution analytique du problème de Stefan décrite dans le paragraphe 3.2.

Par ailleurs, la modélisation du changement de phase a été abordée de différentes manières dans la littérature. Le problème de Stefan offre l'opportunité de comparer ces différentes méthodes, sur un cas simple de changement de phase. Nous nous concentrons spécifiquement sur la comparaison entre la méthode d'enthalpie et la méthode du C_p -modifié introduite par **Groulx and Biwolé (2014)**. Nous regardons de manière approfondie les similitudes et les différences entre ces deux méthodes. Les avantages et les limitations de chaque approche sont exposés, et nous soulignons l'implication de ces différences sur la robustesse, la stabilité numérique et la précision des résultats obtenus.

Afin d'atteindre ces objectifs, nous considérons le problème unidimensionnel de Stefan,

défini par un solide semi-infini. Initialement le MCP couvre le domaine $0 \leq x < \infty$, et il est à la température froide T_c . On néglige pour des raisons de simplicité tout changement de volume dans le matériau subissant le changement de phase. Nous supposons également que la température critique de changement de phase est une constante, T_f . À la frontière fixe du MCP ($x = 0$), une température constante supérieure à la température de fusion est fixée, c'est-à-dire $T_h > T_f$. Le problème est donc de trouver la distribution de la température dans les phases liquide et solide et l'emplacement de la frontière libre $s(t)$. Dans la suite, la frontière libre séparant les deux phases sera appelée interface et les indices s et l feront référence à la partie solide et liquide, respectivement.

Dans le chapitre 2, nous avons introduit des constantes permettant d'unifier les systèmes d'équations physiques et adimensionnés du problème de changement de phase avec convection naturelle. Afin de maintenir une cohérence dans notre formulation, nous introduisons les paramètres suivants :

MCP		
Constantes	Physique	Adimensionnées
α_{st_s}	α_s	$\frac{\alpha_s t_{ref}}{L_{ref}^2}$
α_{st_l}	α_l	$\frac{\alpha_l t_{ref}}{L_{ref}^2}$
R_{st}	$\frac{\rho_s h_{sl}}{k_l}$	$\frac{\rho^*}{Ste \alpha_{st_l}}$
T_s	T_s	θ_s
T_l	T_l	θ_l

TABLE 3.1. – Paramètres du problème de Stefan

En tenant compte de ces constantes, le problème de Stefan peut être formulé mathématiquement de la manière suivante :

	Phase liquide	Phase solide
Équation de la chaleur	$\frac{\partial T_l}{\partial t} = \alpha_{st_l} \frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2}$	$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha_{st_s} \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2}$
Conditions aux bords	$T_l(0, t) = T_h$	$T_s(\infty, t) = T_c$
Condition initiale	$T(x, 0) = T_c$	
Condition de Dirichlet à l'interface	$T(s(t), t) = T_f$	
Condition de Stefan à l'interface	$-\frac{\partial T_l}{\partial x} + k^* \frac{\partial T_s}{\partial x} = R_{st} \frac{ds}{dt}$	

TABLE 3.2. – Problème de Stefan. (s est la position de l'interface liquide-solide)

3.2. Solution analytique

3.2.1. Solution analytique de l'équation de la chaleur

Les équations à résoudre dans chaque phase du problème de Stefan sont des formes de l'équation de la chaleur. Ces équations possèdent des solutions générales qui donnent la distribution de température dans le domaine étudié. La solution de l'équation de la chaleur est donc essentielle pour déterminer une solution analytique du problème de Stefan. Dans ce paragraphe, nous présentons les solutions analytiques les plus courantes de l'équation de la chaleur (Jonsson, 2013).

Pour cela, considérons l'équation de la chaleur générale de la forme

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t). \quad (3.1)$$

La température est une fonction de deux variables indépendantes x et t . Ici, les deux variables indépendantes peuvent être combinées en une seule variable, définie par η comme

$$\eta = \frac{x}{\sqrt{t}}.$$

On cherche alors une solution de la forme

$$T(x, t) = F(\eta(x, t)),$$

où $F(\eta)$ est une fonction inconnue qui reste à trouver. Selon la règle de la chaîne, la dérivée partielle de T par rapport à t est

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial F(\eta(x, t))}{\partial t} = \frac{dF(\eta)}{d\eta} \frac{\partial \eta(x, t)}{\partial t} = -\frac{\eta}{2t} \frac{dF(\eta)}{d\eta}. \quad (3.2)$$

La dérivée partielle de T par rapport à l'espace est également obtenue en utilisant la règle de la chaîne :

$$\frac{\partial T}{\partial x}(x, t) = \frac{\partial F(\eta(x, t))}{\partial x} = \frac{dF(\eta)}{d\eta} \frac{\partial \eta(x, t)}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{t}} \frac{dF(\eta)}{d\eta}.$$

Similairement, la dérivée seconde de T par rapport à x est :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{t}} \frac{d}{d\eta} \left(\frac{dF(\eta)}{d\eta} \right) \frac{\partial \eta(x, t)}{\partial x} = \frac{1}{t} \frac{d^2 F(\eta)}{d\eta^2}. \quad (3.3)$$

En remplaçant les équations (3.2) et (3.3) dans l'équation de la chaleur (3.1), on obtient

l'équation différentielle homogène linéaire du second ordre suivante :

$$\frac{d^2 F(\eta)}{d\eta^2} + \frac{\eta}{2\alpha} \frac{dF(\eta)}{d\eta} = 0. \quad (3.4)$$

On introduit un facteur d'intégration $M(\eta)$ défini par

$$M(\eta) = \exp\left(\frac{\eta^2}{4\alpha}\right). \quad (3.5)$$

On multiplie l'équation (3.4) par (3.5) et nous obtenons

$$\frac{d^2 F(\eta)}{d\eta^2} M(\eta) + \frac{\eta}{2\alpha} M(\eta) \frac{dF(\eta)}{d\eta} = \frac{d^2 F(\eta)}{d\eta^2} M(\eta) + \frac{dM(\eta)}{d\eta} \frac{dF(\eta)}{d\eta} = \frac{d}{d\eta} \left(M(\eta) \frac{dF(\eta)}{d\eta} \right) = 0. \quad (3.6)$$

En intégrant l'équation (3.6), on obtient

$$M(\eta) \frac{dF(\eta)}{d\eta} = C,$$

où C est une constante d'intégration non nulle. Puisque $M(\eta) \neq 0$, en divisant par $M(\eta)$ et en intégrant entre 0 et η , on obtient

$$\int_0^\eta \frac{dF(\eta)}{ds} ds = \int_0^\eta C \exp\left(-\frac{s^2}{4\alpha}\right) ds.$$

On en déduit donc que F est de la forme

$$F(\eta) = C \int_0^\eta \exp\left(-\frac{s^2}{4\alpha}\right) ds + B, \quad (3.7)$$

où B est une constante d'intégration. On fait le changement de variable suivant $y = \frac{s}{2\sqrt{\alpha}}$, on a alors

$$\int_0^\eta \exp\left(-\frac{s^2}{4\alpha}\right) ds = 2\sqrt{\alpha} \int_0^{\frac{\eta}{2\sqrt{\alpha}}} \exp(-y^2) dy = \sqrt{\pi\alpha} \operatorname{erf}\left(\frac{\eta}{2\sqrt{\alpha}}\right), \quad (3.8)$$

où erf est la fonction définie par

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\tau^2} d\tau.$$

En remplaçant (3.8) dans (3.7), la forme finale de la solution des équations de la chaleur

(3.1) est définie par

$$F(\eta) = A \operatorname{erf}\left(\frac{\eta}{2\sqrt{\alpha}}\right) + B, \quad (3.9)$$

où A et B sont des constantes à déterminer avec les conditions aux bords et les conditions initiales.

3.2.2. Solution analytique appliquée à la fusion

En utilisant la solution générale de l'équation de la chaleur (3.9), nous pouvons résoudre le cas de la de fusion dans le cadre du problème de Stefan. En appliquant les conditions aux limites et initiales spécifiques à notre problème (3.2), nous obtenons la distribution de température à l'intérieur du matériau et la position de l'interface en fonction du temps. Notons les distributions de températures T_l et T_s , solutions des équations de la chaleur définies dans la partie liquide et dans la partie solide respectivement (voir tableau (3.2)). Notons A_l , B_l et A_s , B_s , les constantes de la partie liquide et solide, respectivement.

Nous pouvons définir T_l et T_s de la façon suivante :

$$T_l(x, t) = A_l \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_{st_l}t}}\right) + B_l, \quad T_s(x, t) = A_s \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_{st_s}t}}\right) + B_s.$$

Rappelons que $\operatorname{erf}(0) = 0$ et $\lim_{z \rightarrow \infty} \operatorname{erf}(z) = 1$.

D'après les conditions aux bords données dans le tableau (3.2), nous pouvons écrire

$$T_l(0, t) = B_l = T_h, \quad T_s(\infty, t) = A_s + B_s = T_c. \quad (3.10)$$

Utilisons désormais la condition à l'interface.

$$T_l(s(t), t) = A_l \operatorname{erf}\left(\frac{s(t)}{2\sqrt{\alpha_{st_l}t}}\right) + B_l = T_f$$

On en déduit que

$$A_l = \frac{T_f - T_h}{\operatorname{erf}(\lambda)}, \quad \text{où } \lambda = \frac{s(t)}{2\sqrt{\alpha_{st_l}t}}. \quad (3.11)$$

A_l étant une constante, λ doit également être une constante. La position de l'interface varie alors de la façon suivante

$$s(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_{st_l}t}. \quad (3.12)$$

Nous pouvons désormais obtenir une deuxième équation pour déterminer A_s et B_s en prenant $T_s(x, t)$ en $x = s(t)$. Combinée avec (3.10), nous obtenons le système d'équations suivant

$$\begin{aligned} T_s(\infty, t) &= A_s + B_s = T_c, \\ T_s(s(t), t) &= A_s \operatorname{erf}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\alpha^*}}\right) + B_s = T_f, \end{aligned}$$

où α^* désigne le rapport de la diffusivité thermique entre la partie solide et la partie liquide, défini comme $\alpha^* = \alpha_s/\alpha_l$.

Les valeurs des constantes A_s et B_s sont donc

$$A_s = \frac{T_c - T_f}{\operatorname{erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\alpha^*}}\right)}, \quad B_s = T_c - \frac{T_c - T_f}{\operatorname{erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\alpha^*}}\right)}, \quad (3.13)$$

où $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z)$.

Avec (3.10), (3.11) et (3.13), nous pouvons finalement décrire les distributions de température dans la phase liquide et dans la phase solide par les équations

$$T_l(x, t) = \frac{T_f - T_h}{\operatorname{erf}(\lambda)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_{st_l}t}}\right) + T_h, \quad (3.14)$$

$$T_s(x, t) = -\frac{T_c - T_f}{\operatorname{erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\alpha^*}}\right)} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_{st_s}t}}\right) + T_c. \quad (3.15)$$

Nous connaissons désormais la description de la position de l'interface et la distribution de température sous réserve de connaître λ . Afin de déterminer la valeur de λ , nous considérons la condition de Stefan avec $s(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_{st_l}t}$.

Calculons d'abord les dérivées premières en espace des distributions de température.

$$\frac{\partial T_l}{\partial x} = \frac{T_f - T_h}{\operatorname{erf}(\lambda)} \frac{1}{2\sqrt{\alpha_{st_l}t}} e^{-\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_{st_l}t}}\right)^2} \frac{2}{\sqrt{\pi}}, \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial x} = \frac{T_c - T_f}{\operatorname{erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\alpha^*}}\right)} \frac{1}{2\sqrt{\alpha_{st_s}t}} e^{-\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_{st_s}t}}\right)^2} \frac{2}{\sqrt{\pi}}. \quad (3.17)$$

En prenant $x = s(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_{st_l}t}$ dans la condition de Stefan défini dans (3.2) et en utilisant

(3.16) et (3.17), on obtient

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} - \frac{T_f - T_c}{T_h - T_f} \frac{k^*}{\sqrt{\alpha^*}} \frac{e^{-\frac{\lambda^2}{\alpha^*}}}{\operatorname{erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\alpha^*}}\right)} = R_{st} \frac{\alpha_{st_l} \lambda \sqrt{\pi}}{(T_h - T_f)}. \quad (3.18)$$

L'équation (3.18) devient $I(\lambda) = 0$, avec I définie par

$$I(\lambda) = \frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} - \frac{T_f - T_c}{T_h - T_f} \frac{k^*}{\sqrt{\alpha^*}} \frac{e^{-\frac{\lambda^2}{\alpha^*}}}{\operatorname{erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\alpha^*}}\right)} - R_{st} \frac{\alpha_{st_l} \lambda \sqrt{\pi}}{(T_h - T_f)}. \quad (3.19)$$

λ est finalement trouvé en résolvant $I(\lambda) = 0$ par la méthode de Newton.

Les expressions analytiques de la distribution de température à l'intérieur du matériau et de la position de l'interface en fonction du temps sont donc déterminées. Ces solutions analytiques sont des références idéales pour décrire le comportement du système. En comparant nos résultats numériques avec ces solutions analytiques, nous pouvons évaluer la précision et la validité de notre modèle.

3.3. Méthode d'enthalpie

3.3.1. Méthode numérique

Dans le but de vérifier la précision de notre modèle et de valider la position de l'interface ainsi que les distributions de température dans les phases liquide et solide, nous considérons notre approche d'enthalpie décrite dans le paragraphe 2.1. Nous considérons la même méthode numérique que celle utilisée pour résoudre notre modèle décrivant la fusion/solidification des matériaux à changement de phase. Nous utilisons donc une méthode par éléments finis qui a été implémentée à l'aide du logiciel libre FreeFem++. La température est discrétisée à l'aide d'éléments finis \mathbb{P}_2 et nous utilisons le schéma implicite du deuxième ordre en temps défini par (2.36). Les équations non linéaires qui en découlent sont résolues à l'aide d'un algorithme de Newton. En utilisant cette approche numérique, nous sommes en mesure de comparer nos résultats avec les solutions analytiques (3.2.2), ce qui nous permet de confirmer la validité et l'exactitude de notre modèle.

Pour effectuer une comparaison avec le problème de Stefan, nous considérons donc l'équation (2.8) sans le terme de convection, ce qui se traduit par

$$\frac{\partial (C(T)(T - T_f))}{\partial t_\varphi} - R_T \nabla \cdot (K(T) \nabla T) + R_s \frac{\partial \varphi_L(T)}{\partial t_\varphi} = 0. \quad (3.20)$$

Les fonctions $K(T)$, $C(T)$ sont définies par (2.5) et les constantes R_T et R_s sont décrites pour le cas physique et adimensionnées dans le tableau (2.1).

En utilisant la discrétisation implicite du deuxième ordre en temps (2.36), nous obtenons la semi-discrétisation temporelle du modèle d'enthalpie (3.20) suivante

$$\begin{aligned} & c_1(C(T^{n+1})(T^{n+1} - T_f)) - R_T \nabla \cdot (K(T^{n+1}) \nabla T^{n+1}) + c_1 R_s \varphi_L(T^{n+1}) \\ & = -c_2(C(T^n)(T^n - T_f)) - c_3(C(T^{n-1})(T^{n-1} - T_f)) - c_2 R_s \varphi_L(T^n) - c_3 R_s \varphi_L(T^{n-1}). \end{aligned} \quad (3.21)$$

La discrétisation spatiale des variables sur le domaine utilise une méthode d'éléments finis basée sur une formulation faible de l'équation (3.21). Les conditions aux limites sont des conditions homogènes de Dirichlet, nous définissons donc l'espace de Hilbert classique pour la température : $H_0^1(\Omega)$.

La formulation variationnelle de l'équation (3.21) peut être écrite comme : trouver $T^{n+1} \in H^1(\Omega)$, tel que $\forall \phi \in H_0^1(\Omega)$

$$\begin{aligned} & c_1 (C(T^{n+1})(T^{n+1} - T_f), \phi) + R_T (K(T^{n+1}) \nabla T^{n+1}, \nabla \phi) + c_1 R_s (\varphi_L(T^{n+1}), \phi) \\ & = -c_2 (C(T^n)(T^n - T_f), \phi) - c_3 (C(T^{n-1})(T^{n-1} - T_f), \phi) \\ & \quad - c_2 R_s (\varphi_L(T^n), \phi) - c_3 R_s (\varphi_L(T^{n-1}), \phi) \end{aligned} \quad (3.22)$$

où $(u, v) = \int_{\Omega} u \cdot v$ définit le produit scalaire dans $L^2(\Omega)$.

L'équation non linéaire (3.22), considéré comme une équation générale $\mathcal{F}(\omega)=0$ avec $\omega = T^{n+1}$, est résolue en utilisant une méthode de Newton. Pour faire avancer la solution du temps t_n à t_{n+1} , on part d'une estimation initiale $w_0 = T^n$ (qui est la solution à t_n), et on construit la séquence de Newton $\omega_k = T_k$ en résolvant pour chaque itération interne k :

$$D_w \mathcal{F}(w_k) w_{k+1} = D_w \mathcal{F}(w_k) w_k - \mathcal{F}(w_k). \quad (3.23)$$

$D_w \mathcal{F}$ est l'opérateur linéaire représentant la différentielle de \mathcal{F} . L'équation (3.23) peut être réécrite comme :

$$\begin{aligned} & c_1 (C'(T_k)(T_k - T_f) T_{k+1}, \phi) + c_1 (C(T_k) T_{k+1}, \phi) + c_1 (\varphi'_s(T_k) T_{k+1}, \phi) \\ & + (K'(T_k) T_{k+1} \nabla T_k, \nabla \phi) + (K(T_k) \nabla T_{k+1}, \nabla \phi) = c_1 (C'(T_k)(T_k - T_f) T_k, \phi) \\ & - c_1 (C(T_k) T_f, \phi) + c_2 (C(T^n)(T^n - T_f), \phi) + c_3 (C(T^{n-1})(T^{n-1} - T_f), \phi) \\ & + c_1 (\varphi_s(T_k) T_k, \phi) + c_1 (\varphi_s(T_k), \phi) + c_2 (\varphi_s(T^n), \phi) + c_3 (\varphi_s(T^{n-1}), \phi) \\ & + (K'(T_k) T_k \nabla T_k, \nabla \phi). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Nous soulignons le fait que la boucle de Newton (suivant k) doit être itérée jusqu'à conver-

gence pour chaque pas de temps t suivant l'algorithme

$$\left\| \begin{array}{l} \text{boucle en temps suivant } n \\ \text{définir } w_0 = T^n \\ \left\| \begin{array}{l} \text{itérations de Newton suivant } k \\ \text{résoudre Eq. (3.24) pour avoir } \mathbf{w}_{k+1} \\ \text{stop quand } \|\mathbf{w}_{k+1} - \mathbf{w}_k\| < \xi_N \\ \text{actualiser } T^{n+1} = w_{k+1}. \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (3.25)$$

En pratique, nous utilisons $\xi_N = 10^{-6}$.

3.3.2. Résultats numériques

Le problème de Stefan représente une étape initiale de validation de notre modèle, visant à évaluer sa capacité à prendre en compte les phénomènes de fusion des MCP à coefficients variables. Pour renforcer la fiabilité de notre modèle, le chapitre 5 constituera une deuxième étape de validation, axée sur des cas de fusion de MCP à coefficients variables avec convection, dans des domaines 2D. Il semble alors pertinent de considérer les propriétés physiques d'un MCP étudié dans une version plus complexe dans le chapitre 5.

Nous nous intéressons donc à l'acide dodécanoïque étudiée (Kamkari et al., 2014). Les propriétés thermophysiques de l'acide dodécanoïque utilisé sont énumérées dans le tableau 3.3.

MCP Propriétés	Acide dodécanoïque	
	Solide	Liquide
$k(W/mK)$	0.16	0.14
$\rho(kg/m^3)$	940	885
$c(J/kgK)$	2180	2390
$h_{sl}(J/kg)$	187.21×10^3	
$T_f(K)$	43.5	

TABLE 3.3. – Paramètres physiques du MCP d'acide dodécanoïque (Kamkari et al., 2014).

Avec ces paramètres physiques, les paramètres sans dimension correspondants sont calculés en utilisant comme longueur de référence $L_{ref} = 0.05$, comme temps de référence $t_{ref} = L_{ref}^2 \alpha_l$ et la température de fusion comme température de référence $T_{ref} = T_f$. Le nombre de Stefan correspondant est $Ste = 0.34$.

Le changement de phase se produit pour $T_f - \varepsilon \leq T \leq T_f + \varepsilon$. Nous utilisons $\varepsilon = 0.01$. Ce paramètre a été déterminé pour une résolution adimensionnée. Afin de maintenir la même échelle de résolution, nous le choisissons égal à $\varepsilon = 0.01\delta T$ pour la résolution physique.

Dans les simulations numériques, nous travaillons avec un domaine fini, tandis que la solution analytique est calculée sur un domaine infini. Cette différence peut entraîner une divergence entre la solution numérique et la solution analytique si le temps de simulation évolue

trop. Afin d'éviter cet effet, il est essentiel de choisir un domaine numérique suffisamment grand et un temps final approprié.

Par conséquent, la longueur du domaine est fixée à 5 cm et le temps final à 500s. La longueur du domaine a été choisie de manière à ce qu'elle corresponde à deux fois la zone affectée par la fusion pendant la simulation. Cette approche permet de conserver la nature semi-infinie du système.

Le MCP est initialement complètement solide à une température $T_c = 25$. À $t = 0$, la température de la paroi gauche est augmentée à $T_h = 70$. La frontière de droite est maintenue à la température froide T_c . Un maillage 2D est considéré avec un nombre de mailles de 500. En imposant une seule maille sur la hauteur complétée par des conditions périodiques en $y = 0$ et $y = 1$, le maillage 2D se comporte similairement à un maillage 1D. Nous utilisons les éléments finis P_1 et le pas de temps dt est pris égal à 1s.

La figure 3.1 représente l'erreur absolue entre le profil de température numérique et le profil analytique. On observe une augmentation de l'erreur absolue autour de la position d'interface. Cependant, il est important de noter que l'erreur absolue reste inférieure à 0.114 degrés pour la résolution physique et 0.0043 degrés pour la résolution adimensionnée. Ces résultats indiquent que notre approche est robuste et capable de fournir des résultats précis et cohérents pour les problèmes de fusion de MCP.

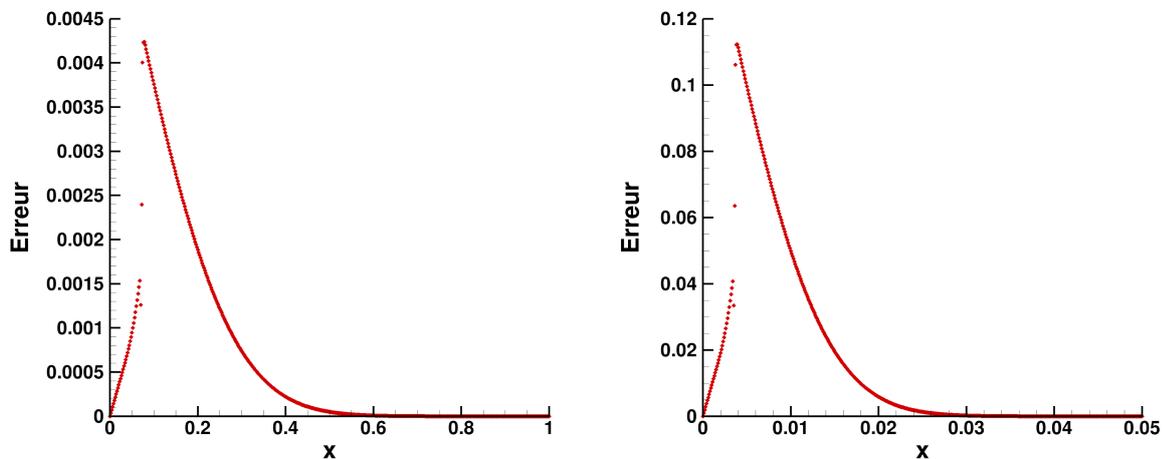


FIGURE 3.1. – Erreur absolue entre le profil de température numérique et analytique à $t = 500s$. Résolution adimensionnée (à gauche) et physique (à droite).

Les figures 3.2 et 3.3 illustrent la comparaison entre les résultats numériques et les solutions analytiques, à la fois pour la résolution adimensionnée et la résolution physique. Les résultats numériques sont représentés en rouge, tandis que les solutions analytiques sont en noir. Les sous-figures gauches correspondent aux résultats obtenus avec la résolution adimensionnée, tandis que les sous-figures droites correspondent aux résultats obtenus avec la résolution physique.

Dans la figure 3.2, nous pouvons observer le profil de température à un temps donné de 500s. La comparaison des deux profils révèle un très bon accord entre les résultats numériques

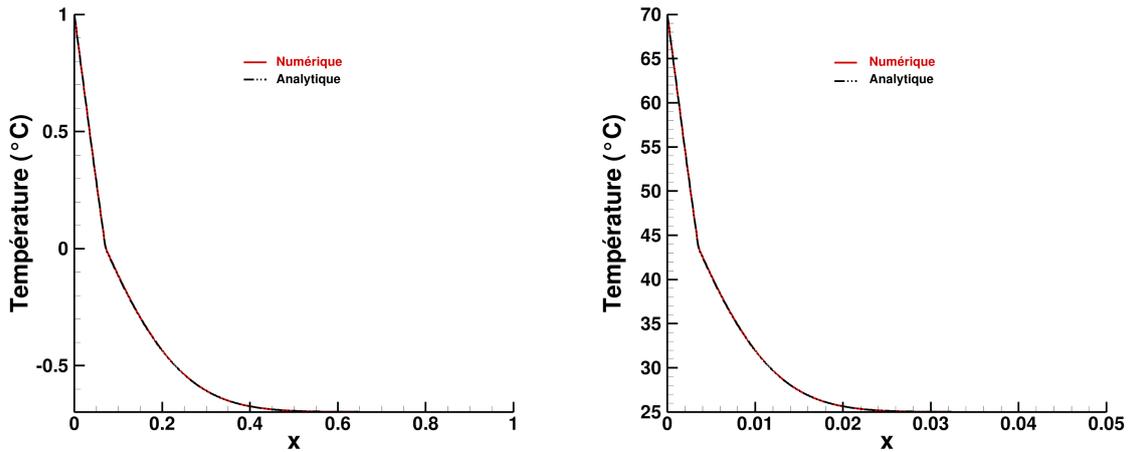


FIGURE 3.2. – Profils de températures à $t = 500s$. Résolution adimensionnée (à gauche) et physique (à droite). Comparaison avec les profils de températures analytiques.

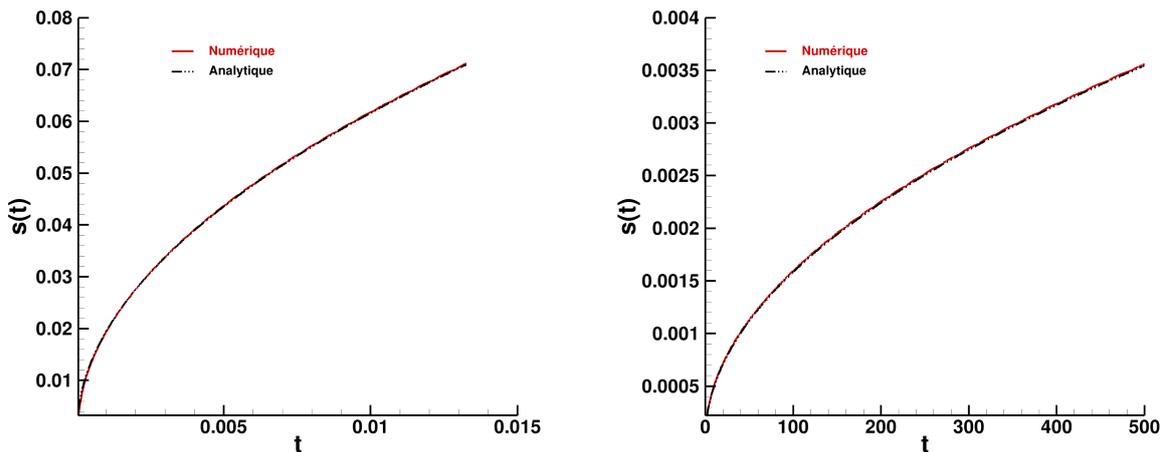


FIGURE 3.3. – Évolution temporelle de la position de l'interface liquide-solide. Résolution adimensionnée (à gauche) et physique (à droite). Comparaison avec la position de l'interface analytique.

et les solutions analytiques.

La figure 3.3 présente l'évolution temporelle des positions d'interface pour notre résolution numérique, en comparaison avec la prédiction analytique. Les résultats numériques et la solution analytique sont en accord, ce qui indique que les positions d'interface calculées numériquement suivent de près les positions d'interface prédites analytiquement au fil du temps.

L'excellent accord global entre les solutions numériques et analytiques suggère que notre modèle est robuste et précis, et qu'aucun raffinement supplémentaire du maillage ou du pas de temps n'est nécessaire. Cela indique que l'équation de formulation de l'enthalpie (3.20), utilisée avec le schéma implicite d'ordre deux en temps (2.36), est valide et peut être utilisée

avec des pas de temps relativement grands. Cette constatation renforce la confiance dans la capacité de notre modèle à capturer avec précision les phénomènes de fusion dans le problème de Stefan. De plus, l'accord entre les résultats numériques et la solution analytique dans les deux cas, adimensionné et physique, renforce la fiabilité de notre code pour traiter les deux configurations.

En conclusion, les résultats numériques concordants avec la solution analytique renforcent la confiance dans notre modèle et valident l'utilisation de notre méthode numérique pour étudier les phénomènes de fusion des MCP. Notre modèle peut être utilisé de manière fiable pour étudier d'autres problèmes plus complexes de fusion avec des matériaux à changement de phase.

3.4. Comparaison avec la méthode du C_p -modifié

La validité de notre méthode enthalpique a été démontrée sur le problème de Stefan. Cependant, une approche alternative a été présentée par [Groulx and Biwole \(2014\)](#) pour modéliser le changement de phase. Cette approche, connue sous le nom de C_p -modifié, adopte une méthode différente en modifiant la capacité thermique globale du MCP pour représenter l'énergie nécessaire à la fusion. Contrairement à la méthode d'enthalpie, qui résout l'équation de conservation de l'enthalpie, le modèle C_p -modifié utilise une modification de la capacité thermique pour calculer les flux de chaleur et les variations de température. Dans ce paragraphe, nous comparons ces deux approches, notamment en terme de robustesse, en utilisant le problème simple de changement de phase, le problème de Stefan. L'objectif est de souligner les points communs et les différences entre ces deux méthodes.

La méthode du C_p -modifié modélise l'énergie nécessaire à la fusion d'un MCP, fournie par la chaleur latente de fusion h_{sl} , en modifiant la capacité thermique globale du MCP. Cette capacité thermique modifiée prend en compte la chaleur latente de fusion sur une plage de températures de fusion $\varepsilon_{c_p}/4$ centrée sur T_f , modélisée à l'aide d'une fonction gaussienne $D(T)$:

$$D(T) = \frac{\exp\left(-\frac{T-T_f}{\varepsilon_{c_p}/4}\right)}{\sqrt{\pi}\varepsilon_{c_p}/4} \quad (3.26)$$

Cette fonction est presque nulle partout sauf sur l'intervalle $[T_f - \varepsilon_{c_p}/2, T_f + \varepsilon_{c_p}/2]$. Son intégrale sur l'intervalle de toutes les températures est égale à 1. L'équilibre énergétique à travers la transition de phase est assuré en multipliant $D(T)$ par $h_{sl}/\rho_l c_l$.

Une fonction $B(T)$ est définie comme la fraction liquide au sein de la zone de transition par

$$B(T) = \begin{cases} 0 & \text{si } T < T_f - \varepsilon_{c_p}/2 \\ \frac{T-T_f}{\varepsilon_{c_p}/4} + \frac{1}{2} & \text{si } T_f - \varepsilon_{c_p}/2 < T < T_f + \varepsilon_{c_p}/2 \\ 1 & \text{si } T > T_f + \varepsilon_{c_p}/2 \end{cases} \quad (3.27)$$

où $B(T)$ est égal à 0 dans la phase solide, 1 dans la phase liquide et varie linéairement de 0 à 1 à travers la zone de transition sur un intervalle de température de $\varepsilon_{c_p}/4$.

La fonction $B(T)$ est régularisée à l'aide d'une fonction continue du second ordre par la fonction Heaviside lissée *flc2hss* dans COMSOLMultiphysics. Cette fonction est définie de la façon suivante :

$$B_r(T) = \begin{cases} 0 & \text{si } T < T_f - \varepsilon_{c_p}/2 \\ 0.5 + 0.9375 \left(\frac{T-T_f}{\varepsilon_{c_p}/2} \right) - 0.625 \left(\frac{T-T_f}{\varepsilon_{c_p}/2} \right)^3 + 0.1875 \left(\frac{T-T_f}{\varepsilon_{c_p}/2} \right)^5 & \text{si } T_f - \varepsilon_{c_p}/2 < T < T_f + \varepsilon_{c_p}/2 \\ 1 & \text{si } T > T_f + \varepsilon_{c_p}/2 \end{cases} \quad (3.28)$$

-10mm En utilisant $\varepsilon_{c_p} = 4\varepsilon$ comme paramètre de régularisation, cette fonction se rapproche de notre régularisation par tangentes hyperboliques définie par l'équation (2.7). La figure 3.4 démontre la grande similarité entre les fonctions $B_r(T)$ et $\varphi_L(T)$ régularisée pour ce choix de ε_{c_p} . Ainsi, nous adopterons ce choix de ε_{c_p} par la suite.

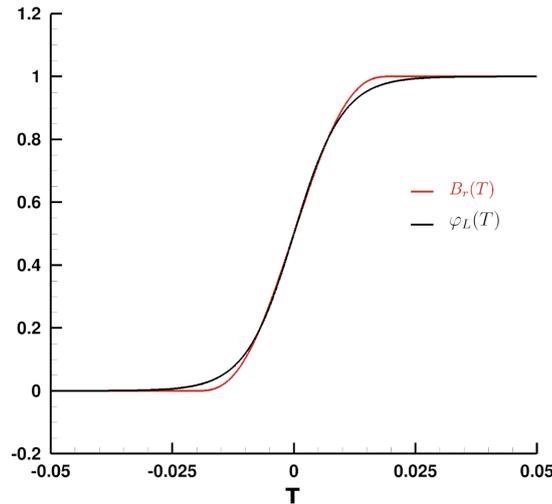


FIGURE 3.4. – Comparaison entre les fonctions régularisées $B_r(T)$ et $\varphi_L(T)$.

Cette fonction $B(T)$ est définie, pour une raison analogue à la définition de φ_L , c'est à dire, pour tenir compte du changement de la chaleur spécifique de la phase solide à la phase liquide à travers la zone de transition de phase.

La capacité thermique modifiée $C_p(T)$ est alors définie par

$$C_p(T) = C_c(T) + R_s D(T) \quad (3.29)$$

où R_s est le paramètre physique définie par (2.1) et $C(T)$ est la fonction suivante

$$C_c(T) = C_s + (C_l - C_s)B(T), \quad (3.30)$$

avec C_s et C_l des paramètres physiques définies de la même façon que dans la méthode d'enthalpie, c'est à dire par (2.1)

L'équation de conservation de l'énergie, obtenue par la méthode du C_p -modifié est ainsi définie par

$$C_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} - R_T \nabla \cdot (K_c(T) \nabla T) = 0, \quad (3.31)$$

où $K_c(T)$ est la conductivité thermique définie par

$$K_c(T) = K_s + (K_l - K_s)B(T), \quad (3.32)$$

avec K_s et K_l des paramètres physiques définis de la même façon que dans la méthode enthalpique, c'est à dire par (2.1).

En remplaçant $C_p(T)$ dans (3.31) par (3.29), on obtient

$$C_c(T) \frac{\partial T}{\partial t} + R_s D(T) \frac{\partial T}{\partial t} - R_T \nabla \cdot (K_c(T) \nabla T) = 0 \quad (3.33)$$

L'équation (3.33) est résolue à l'aide de la méthode des éléments finis, de manière similaire à celle décrite dans le chapitre 2 et utilisée pour modéliser le problème de Stefan avec la méthode enthalpique dans le paragraphe 3.3.

La formulation variationnelle de l'équation (3.33), associée à la discrétisation temporelle (2.36) est : trouver $T^{n+1} \in H^1(\Omega)$, tel que $\forall \phi \in H_0^1(\Omega)$

$$\begin{aligned} c_1 (C_c(T^{n+1})T^{n+1}, \phi) + R_T (K_c(T^{n+1})\nabla T^{n+1}, \nabla \phi) + c_1 R_s (D(T^{n+1})T^{n+1}, \phi) \\ = -c_2 (C_c(T^{n+1})T^n, \phi) - c_3 (C_c(T^{n+1})T^{n-1}\phi) - c_2 R_s (D(T^{n+1})T^n, \phi) \\ - c_3 R_s (D(T^{n+1})T^{n-1}\phi) \end{aligned} \quad (3.34)$$

La séquence de Newton T_k qui en découle est obtenue en résolvant pour chaque itération interne k l'équation :

$$\begin{aligned} (C'_c(T_k)(c_1 T_k + c_2 T_n + c_3 T_{n-1})T_{k+1}, \phi) + c_1 (C_c(T_k)T_{k+1}, \phi) \\ + c_1 (R_s D'(T_k)(c_1 T_k + c_2 T_n + c_3 T_{n-1})T_{k+1}, \phi) + c_1 R_s (D(T_k)T_{k+1}, \phi) \\ + R_T (K'_c(T_k)T_{k+1} \nabla T_k, \nabla \phi) + R_T (K_c(T_k) \nabla T_{k+1}, \nabla \phi) \\ = c_1 (C'_c(T_k)(c_1 T_k + c_2 T_n + c_3 T_{n-1})T_k, \phi) + c_1 R_s (D'(T_k)(c_1 T_k + c_2 T_n + c_3 T_{n-1})T_k, \phi) \\ + R_T (K'_c(T_k)T_k \nabla T_k, \nabla \phi) - (C_c(T_k)(c_2 T^n + c_3 T^{n+1}), \phi) - R_s (D(T_k)(c_2 T^n + c_3 T^{n+1}), \phi) \end{aligned}$$

La méthode du C_p -modifié et la méthode enthalpique présentent plusieurs similitudes. En effet, les équations de température obtenues par ces deux méthodes, respectivement définies par les équations (3.20) et (3.33), ont une structure analogue. Nous pouvons observer que les fonctions $K_c(T)$ et $C_c(T)$ présentes dans l'équation du C_p -modifié sont similaires à $K(T)$ et $C(T)$ présentes dans l'équation enthalpique. Leur unique différence réside dans l'utilisation

de fonctions de régularisation différentes.

Cependant, une différence dans le traitement de la dérivée temporelle entre ces deux méthodes est notable. En effet, la dérivée temporelle ne s'applique pas à $C_c(T)$ dans la méthode du C_p -modifié, seule la température est dérivée par rapport au temps. Ne pas tenir compte de la variation temporelle de la capacité thermique peut entraîner des instabilités numériques.

Une autre différence concerne la manière dont la dérivée temporelle est traitée dans le terme représentant l'énergie de fusion. En appliquant la règle de la chaîne, nous constatons que

$$\frac{\partial \varphi_L(T)}{\partial t} = \frac{\partial \varphi_L(T)}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.35)$$

Ainsi, $D(T)$ joue alors le même rôle que $\frac{\partial \varphi_L(T)}{\partial T}$.

Cependant, dans la méthode du C_p -modifié, la dérivée temporelle porte uniquement sur la température, tandis que dans la méthode enthalpique, la dérivée temporelle porte sur la fonction φ_L . D'un point de vue mathématique, ces deux formulations sont équivalentes, mais sur le plan numérique, un grand écart les distingue. En effet, cette écriture fait intervenir la dérivée première de $D(T)$ dans la séquence de Newton définie pour la méthode du C_p -modifié (3.35). Cette dérivée première correspond à la dérivée seconde de φ_L et présente des variations abruptes, ce qui rend la résolution de l'algorithme de Newton difficile. L'utilisation de cette dérivée peut entraîner des instabilités numériques, nécessitant ainsi une réduction du pas de temps ou de la taille des mailles pour maintenir la stabilité du calcul. Dans le modèle enthalpique, la séquence de Newton n'implique que la dérivée première de $\varphi_L(T)$, ce qui facilite les résolutions algorithmiques.

Les limitations et avantages de ces écritures sont illustrés numériquement en simulant la fusion d'un MCP étudié dans le chapitre 6. Ce MCP a fait l'objet d'une étude expérimentale et numérique utilisant la méthode du C_p -modifié (Azad and Groulx, 2021), d'où la pertinence de tester nos deux méthodes sur celui-ci.

Les propriétés de ce MCP sont données dans le tableau 3.4. Comme mentionné dans le paragraphe 3.3.2, le domaine considéré et le temps de fusion doivent être choisis minutieusement afin de conserver la validité de la solution analytique. Nous nous plaçons donc dans un domaine de longueur $L = 5\text{cm}$ avec un temps final de $t = 250\text{s}$. Le MCP est initialement solide à la température $T_c = 25$. Le domaine est chauffé à gauche à une température de $T_h = 69,7$ et il est supposé adiabatique à droite. Le maillage possède les mêmes propriétés de périodicité que celui présenté dans le paragraphe 3.3.2 et se comporte ainsi comme un maillage 1D. Le nombre de mailles considéré est de 100. La résolution numérique est réalisée avec une configuration physique.

MCP		
Propriétés	Solide	Liquide
$k(W/mK)$	0.8	0.8
$\rho(kg/m^3)$	800	800
$c(J/kg K)$	1200	1200
$h_{sl}(J/kg)$	5×10^3	
$T_f(K)$	27.5	

TABLE 3.4. – Paramètres physiques du MCP *n*-octadécane (Azad and Groulx, 2021).

Afin de comparer ces deux méthodes, ε_{c_p} est choisi égal à 4ε tandis que la masse volumique est considérée constante égale à ρ_l . Nous choisissons ici de comparer nos méthodes avec le ε que nous utilisons habituellement, soit un $\varepsilon = 10^{-2}(T_h - T_f)$.

La figure 3.5 présente les profils de température obtenus avec la méthode d'enthalpie et à la méthode du C_p -modifié, et les compare à la solution analytique. Lorsque nous utilisons le même nombre de mailles et le même pas de temps pour la méthode du C_p -modifié que ceux employés pour la méthode d'enthalpie (soit 100 mailles et un pas de temps de 1 seconde), une nette divergence apparaît entre la distribution numérique et la solution analytique. La méthode du C_p -modifié a ainsi nécessité l'utilisation d'un pas de temps plus petit ($dt = 0.01$) ainsi qu'un maillage plus fin (250 mailles) pour obtenir des résultats atteignant la même précision que notre méthode.

L'utilisation d'un pas de temps plus grand présente des avantages en termes de gain de temps de calcul et d'efficacité numérique. Elle permet d'accélérer la résolution du problème, ce qui est particulièrement avantageux lors de l'analyse de cas complexes.

Dans ce chapitre, nous avons validé notre modèle enthalpique et notre méthode numérique en résolvant le problème de Stefan. La validation de notre méthode a été réalisée en comparant les résultats numériques avec la solution analytique calculée. Les profils de température et les positions d'interfaces obtenus à partir de notre modèle ont démontré une bonne concordance avec les solutions analytiques, confirmant ainsi la validité de notre approche. Notre modèle enthalpique permet de modéliser de manière précise les phénomènes physiques associés au problème de Stefan, en prenant en compte la variation des propriétés du MCP. Cette validation permet l'utilisation de notre méthode pour des analyses plus approfondies de la fusion dans des applications plus complexes et variées.

Ce chapitre a également mis en évidence les avantages de l'approche enthalpique et de notre méthode numérique. Elles permettent d'utiliser des pas de temps plus grands tout en maintenant une bonne précision dans les résultats, ce qui constitue un avantage lors de la modélisation de MCP plus complexes.

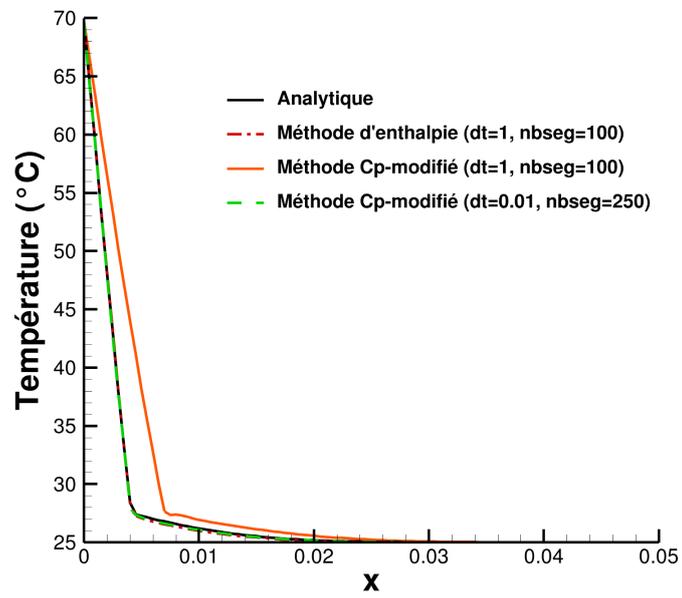


FIGURE 3.5. – Profils de température à $t = 250$ s.

4. Analyse numérique pour la simulation de la convection naturelle

Lorsqu'un MCP subit un processus de fusion ou de solidification, la convection naturelle joue un rôle essentiel. Dans le cas où la température demeure toujours supérieure à la température de fusion ($T > T_f$), les coefficients du système d'équations (2.33)-(2.35) restent constants et $\varphi_L = 1$ dans l'ensemble du domaine. Cela entraîne une simplification du système d'équations de changement de phase, le rendant équivalent au système d'équations (Navier-Stokes-Boussinesq) qui décrit la convection naturelle.

L'analyse numérique de la convection naturelle présentée dans ce chapitre est donc un pré-requis pour l'analyse numérique du MCP. Cependant, l'analyse numérique des MCP présente diverses difficultés supplémentaires, principalement du au terme source non linéaire qui complexifie l'écriture d'estimation d'erreur. Ainsi, l'analyse numérique du MCP fera l'objet de travaux futurs. Les résultats pour la convection naturelle présentés ci-dessous ont fait l'objet d'un article publié dans *Computers and Mathematics with Applications*, co-écrit avec Francky Luddens et Ionut Danaila (Cécile Legrand, 2022).

Il existe une vaste littérature sur les estimations d'erreurs pour les équations décrivant la convection naturelle, notamment des estimations d'erreur qui ont été obtenues pour une discrétisation spatiale par éléments finis satisfaisant la condition inf-sup (Zhang et al., 2014). Des estimations d'erreur utilisant les paires P_l - P_l avec ($l \geq 1$) ont également été établies avec différentes stabilisations de pression, par exemple la stabilisation par projection (Chacón Rebollo et al., 2013; de Frutos et al., 2019), la stabilisation basée sur deux intégrations locales de Gauss (Li and He, 2008; Zhang et al., 2014), la stabilisation par pression grad-div (Kashiwabara et al., 2016), la stabilisation par pression symétrique (Burman and Fernández, 2009), et bien d'autres.

Ce chapitre se concentre sur l'étude de la méthode des éléments finis stabilisés basée sur les procédures de stabilisation de la pression minimale introduites par Brezzi and Fortin (1991). Un terme de pénalisation constant est ajouté à l'équation de conservation de la masse discrétisée (2.48). L'objectif de cette étude est d'estimer l'effet du changement du problème discret (sans le terme de stabilisation) en un problème pénalisé et d'obtenir les estimations d'erreurs a priori correspondantes. Nous laissons ce terme de pénalisation varier en fonction de la taille de la maille, afin de récupérer la convergence pour les inconnues vitesse et température, même si la condition inf-sup n'est pas satisfaite, par exemple pour la paire P_1 - P_1 . En utilisant une technique similaire à celle de Aldbaissy et al. (2018), nous donnons des estimations a priori et une illustration numérique pour justifier l'utilisation de tels éléments.

4.1. Cadre et discrétisation

Dans tout ce chapitre, Ω désigne un domaine borné lisse de \mathbb{R}^2 . Afin d'utiliser des résultats de régularité connus, nous supposons que son bord $\partial\Omega$ est de classe $C^{1,1}$. Ce chapitre se concentre sur la résolution du problème de convection naturelle sous forme adimensionnée, à coefficients constants, modélisé par les équations de Navier-Stokes complétées par l'approximation de Boussinesq.

En désignant par \mathbf{u} , p et θ la vitesse sans dimension du fluide, la pression sans dimension et la température sans dimension, le système d'équations de Navier-Stokes-Boussinesq s'écrit :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{\mathcal{R}e} \nabla^2 \mathbf{u} - f_B(\theta) \mathbf{e}_y = \mathbf{F}, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta \mathbf{u}) - \nabla \cdot \left(\frac{1}{\mathcal{R}e \mathcal{P}r} \nabla \theta \right) = g. \quad (4.3)$$

Comme défini dans le chapitre 2, les notations $\mathcal{R}a$, $\mathcal{R}e$ et $\mathcal{P}r$ désignent le nombre de Rayleigh, le nombre de Reynolds et le nombre de Prandtl respectivement. f_B prend la valeur adimensionnée $\mathcal{R}a/\mathcal{R}e^2\mathcal{P}r$. Enfin, \mathbf{F} et g désignent une force extérieure et une source de chaleur. Le système (4.1)-(4.2)-(4.3) est complété par des conditions aux limites de Dirichlet sur \mathbf{u} et θ .

4.1.1. Formulation faible

Pour utiliser les approximations par éléments finis, une formulation faible du système précédent est nécessaire. En utilisant les espaces de Hilbert X , Q et \mathbf{X} définis par (2.37), ainsi que les formes bilinéaires et trinéaires définies par (2.38)-(2.42), si (\mathbf{u}, p, θ) est une solution des équations (4.1)-(4.2)-(4.3) et $(\mathbf{v}, q, \psi) \in \mathbf{X} \times L^2 \times X$, nous obtenons par intégration par parties la formulation faible suivante :

$$b(\mathbf{u}, q) = 0, \quad (4.4)$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}, \mathbf{v} \right) + \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + c(\mathbf{u}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, p) - (f_B(\theta) \mathbf{e}_y, \mathbf{v}) = (\mathbf{F}, \mathbf{v}), \quad (4.5)$$

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial t}, \psi \right) + \frac{1}{\mathcal{R}e \mathcal{P}r} \bar{a}(\theta, \psi) + \bar{c}(\mathbf{u}, \theta, \psi) = (g, \psi). \quad (4.6)$$

4.1.2. Propriétés des formes bilinéaires et trinéaires

D'après les définitions (2.38)-(2.42), les estimations classiques de coercivité et de continuité suivantes sont valables : il existe certaines constantes positives α , $\bar{\alpha}$, A , \bar{A} telles que,

$\forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbf{X}, \forall p \in Q$ et $\forall \theta, \phi \in X$,

$$|a(\mathbf{u}, \mathbf{v})| \leq A \|\mathbf{u}\|_{H^1} \|\mathbf{v}\|_{H^1}, \quad (4.7)$$

$$|a(\mathbf{v}, \mathbf{v})| \geq \alpha \|\mathbf{v}\|_{H^1}, \quad (4.8)$$

$$|\bar{a}(\theta, \phi)| \leq \bar{A} \|\theta\|_{H^1} \|\phi\|_{H^1}, \quad (4.9)$$

$$|\bar{a}(\theta, \theta)| \geq \bar{\alpha} \|\theta\|_{H^1}, \quad (4.10)$$

$$|b(\mathbf{u}, p)| \leq \|\mathbf{u}\|_{H^1} \|p\|_{L^2}. \quad (4.11)$$

Nous utilisons également la continuité des formes trilinéaires c et \bar{c} : il existe des constantes positives C et \bar{C} telles que, $\forall \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{X}$ et $\forall \theta, \psi \in X$,

$$c(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) \leq C \|\nabla \mathbf{u}\|_{L^2} \|\nabla \mathbf{v}\|_{L^2} \|\mathbf{w}\|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \|\nabla \mathbf{w}\|_{L^2}^{\frac{1}{2}}, \quad (4.12)$$

$$\bar{c}(\mathbf{u}, \theta, \psi) \leq \bar{C} \|\nabla \mathbf{u}\|_{L^2} \|\nabla \theta\|_{L^2} \|\psi\|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \|\nabla \psi\|_{L^2}^{\frac{1}{2}}. \quad (4.13)$$

En raison des propriétés de symétrie, \mathbf{v} et \mathbf{w} peuvent être intervertis dans le membre de droite de (4.12), de même pour θ et ψ dans le membre de droite de (4.13). Afin d'obtenir le meilleur taux de convergence possible pour le problème de convection naturelle, nous nous appuyons sur le résultat de continuité de la Proposition 4.1.1 suivante qui est valable en deux dimensions.

Proposition 4.1.1. *Pour tout $\sigma > 0$, il existe une constante positive C dépendante de Ω et σ uniquement tel que*

$$\forall \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{X}, \quad |c(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})| \leq C \|\mathbf{u}\|_{H^\sigma} \|\mathbf{v}\|_{H^1} \|\mathbf{w}\|_{H^1}, \quad (4.14)$$

$$\forall \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{X}, \quad |c(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})| \leq C \|\mathbf{v}\|_{H^\sigma} \|\mathbf{u}\|_{H^1} \|\mathbf{w}\|_{H^1}. \quad (4.15)$$

Démonstration. Commençons avec $0 < \sigma < 1$. Notons que si (4.14) est valable pour $0 < \sigma < 1$, alors elle est valable pour tout $\sigma' > \sigma$.

D'après les inégalités de Cauchy-Schwarz et de Holder, nous avons

$$\left| \int_{\Omega} \mathbf{u} \nabla \mathbf{v} \mathbf{w} \right| \leq \|\nabla \mathbf{v}\|_{L^2} \|\mathbf{u} \mathbf{w}\|_{L^2} \leq \|\nabla \mathbf{v}\|_{L^2} \|\mathbf{u}\|_{L^q} \|\mathbf{w}\|_{L^{q^*}},$$

où $q > 2$ est tel que $\sigma = 1 - \frac{2}{q}$ et q^* est tel que $\frac{1}{q} + \frac{1}{q^*} = \frac{1}{2}$. Les injections $L^q \subset H^\sigma$ et $L^{q^*} \subset H^1$ sont continues (voir Nezza et al. (2012)), ce qui implique que

$$\left| \int_{\Omega} \mathbf{u} \nabla \mathbf{v} \mathbf{w} \right| \leq C \|\nabla \mathbf{v}\|_{L^2} \|\mathbf{u}\|_{H^\sigma} \|\mathbf{w}\|_{H^1} \leq C \|\mathbf{u}\|_{H^\sigma} \|\mathbf{v}\|_{H^1} \|\mathbf{w}\|_{H^1}.$$

De cette inégalité, nous obtenons aussi

$$\left| \int_{\Omega} \mathbf{u} \nabla \mathbf{w} \mathbf{v} \right| \leq C \|\mathbf{u}\|_{H^\sigma} \|\mathbf{v}\|_{H^1} \|\mathbf{w}\|_{H^1}.$$

En rassemblant ces deux inégalités, avec la définition de c , on obtient le résultat souhaité (4.14).

Afin de prouver (4.15), nous utilisons le fait que

$$c(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = - \int_{\Omega} \mathbf{u} \nabla \mathbf{w} \mathbf{v} - \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{v} \mathbf{w}.$$

Nous procédons comme précédemment : le premier terme est traité avec $\|\mathbf{u}\mathbf{v}\|_{L^2}$, et le second avec $\|\mathbf{w}\mathbf{v}\|_{L^2}$.

□

Enfin, nous rappelons que $\mathbf{X} \times Q$ satisfait la condition inf-sup (également appelée condition LBB, cf Brezzi (1974)) : il existe $\beta > 0$ ne dépendant que de Ω tel que, pour tout $p \in Q$,

$$\beta \|p\|_{L^2} \leq \sup_{\mathbf{u} \in \mathbf{X} \setminus \{0\}} \frac{b(\mathbf{u}, p)}{\|\mathbf{u}\|_{H^1}}. \quad (4.16)$$

4.1.3. Approximation par éléments finis

Prenons une famille de maillages uniformes et réguliers \mathcal{T}_h , indexée par h (typiquement la taille d'un triangle). Étant donné un entier ℓ , et un élément $K \in \mathcal{T}_h$, nous désignons par $P_{\ell}(K)$ l'espace des polynômes de degré inférieur ou égal à ℓ , définis sur K . Nous introduisons les espaces d'éléments finis suivants

$$X_h := \{v_h \in C(\Omega)^d; v_h|_K \in P_{p_u}(K)^d, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h\} \quad (4.17)$$

$$Q_h := \{q_h \in C(\Omega)^d; q_h|_K \in P_{p_p}(K)^d, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h\} \quad (4.18)$$

$$W_h := \{w_h \in C(\Omega)^d; w_h|_K \in P_{p_{\theta}}(K)^d, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h\} \quad (4.19)$$

où $p_u \geq 1$, $p_p \geq 1$ et $p_{\theta} \geq 1$. Dans les applications, nous voulons utiliser $p_u = p_p = p_{\theta} = 1$.

Nous nous intéressons à l'approximation du problème de convection naturelle pour $t \in [0; t_f]$ où t_f est un temps final donné. Choisissons N_f un nombre de pas de temps, et définissons $\delta t = \frac{t_f}{N_f}$. Nous définissons t_n par $t_n = n\delta t$ pour tout entier n et notons $(\mathbf{u}_h^n, p_h^n, \theta_h^n) \in X_h \times Q_h \times W_h$ notre approximation de $(\mathbf{u}^n, p^n, \theta^n)$, où \mathbf{u}^n représente $\mathbf{u}(t_n)$ (de même pour p^n, θ^n). En introduisant les notations

$$\delta_t \mathbf{u}_h^n = \frac{\mathbf{u}_h^n - \mathbf{u}_h^{n-1}}{\delta t}, \quad \delta_t \theta_h^n = \frac{\theta_h^n - \theta_h^{n-1}}{\delta t},$$

le système discrétisé correspondant à (4.4)-(4.6) est :

Trouver $(\mathbf{u}_h^{n+1}, p_h^{n+1}, \theta_h^{n+1})$ tel que, pour tout $(\mathbf{v}_h, q_h, \psi_h) \in X_h \times Q_h \times W_h$,

$$b(\mathbf{u}_h^{n+1}, q_h) - \gamma_h(p_h^{n+1}, q_h) = 0, \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} (\delta_t \mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{v}_h) + \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{v}_h) + c(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{v}_h) \\ + b(\mathbf{v}_h, p_h^{n+1}) - (f_B(\theta_h^{n+1}) \mathbf{e}_y, \mathbf{v}_h) = (\mathbf{F}^{n+1}, \mathbf{v}_h), \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$(\delta_t \theta_h^{n+1}, \psi_h) + \frac{1}{\mathcal{R}e \mathcal{P}r} \bar{a}(\theta_h^{n+1}, \psi_h) + \bar{c}(\mathbf{u}_h^{n+1}, \theta_h^{n+1}, \psi_h) = (g^{n+1}, \psi_h). \quad (4.22)$$

Le système résultant est un problème non linéaire résolu à l'aide d'un algorithme de Newton, similaire au chapitre 2. γ_h est une constante positive qui peut dépendre de la taille du maillage. Ce paramètre de pénalisation est important dans notre analyse et requiert quelques remarques :

- l'utilisation de l'élément de Taylor-Hood pour la vitesse-pression, par exemple, permet d'utiliser $\gamma_h = 0$. Cependant, d'un point de vue numérique, cela conduit à une matrice inversible avec un bloc diagonal nul. Par conséquent, cela nécessite certaines permutations de lignes. En laissant $\gamma_h > 0$, on élimine cette nécessité.
- puisque Q_h n'est pas un sous-espace de Q (il n'y a pas de contrainte sur la valeur moyenne d'un élément de Q_h), prendre $\gamma_h > 0$ avec les conditions aux limites sur \mathbf{u}_h et la formule de Stokes garantit que la pression soit de moyenne nulle. Par conséquent, ce terme peut être considéré comme un terme de *pénalisation*.
- même si le couple $X_h \times Q_h$ ne satisfait pas une condition inf-sup, prendre $\gamma_h > 0$ (et petit) assurera le caractère bien posé du système linéarisé, permettant l'utilisation du lemme de Lax-Milgram. En ce sens, il peut également être considéré comme un terme de *stabilisation*. Pour plus de détails, voir (Girault and Raviart, 1986b, Rem. 4.3, p. 67).
- il est clair que l'utilisation d'une valeur constante pour γ_h ne peut pas conduire à la convergence lorsque h tend vers zéro. Nous allons cependant montrer qu'avec un choix approprié de γ_h , nous pouvons obtenir la convergence pour notre problème.

4.1.4. Notations et hypothèses

Nous introduisons des opérateurs de projection appropriés. Nous supposons qu'il existe une famille d'opérateurs $\mathcal{C}_h : L^2(\Omega) \rightarrow Q_h$ qui satisfait les propriétés suivantes : il existe C indépendant de h tel que, pour tout $0 \leq s < \frac{3}{2}$, $s \leq r \leq 1 + p_p$ et $q \in H^r(\Omega)$, l'inégalité suivante est vérifiée :

$$\|q - \mathcal{C}_h q\|_{H^s} \leq C h^{r-s} \|q\|_{H^r}. \quad (4.23)$$

Comme opérateurs de projection, on peut penser à l'interpolant de Clément, ou à l'interpolant de Scott-Zhang (Ciarlet Jr, 2013).

Par abus de notations, nous désignons également par \mathcal{C}_h , les projections H^1 de \mathbf{X} à X_h et de X à W_h . Pour ces opérateurs, (4.23) est également satisfaite puisqu'on peut déduire de leurs définitions que

$$a(\mathcal{C}_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h) = a(\mathbf{u}, \mathbf{v}_h) \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbf{X}, \mathbf{v}_h \in X_h, \quad (4.24)$$

$$\bar{a}(\mathcal{C}_h \theta, \psi_h) = \bar{a}(\theta, \psi_h) \quad \forall \theta \in X, \psi_h \in W_h. \quad (4.25)$$

On définit également R_u^n et R_θ^n tel que :

$$R_u^n = \partial_t \mathbf{u}^n - \delta_t \mathbf{u}^n, \quad R_\theta^n = \partial_t \theta^n - \delta_t \theta^n.$$

Nous pouvons utiliser $(\mathbf{v}_h, q_h, \psi_h) \in X_h \times Q_h \times W_h$ comme fonction test dans la formulation

faible (4.4)-(4.5)-(4.6), au temps t_{n+1} :

$$b(\mathbf{u}^{n+1}, q_h) = 0, \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} (\delta_t \mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}_h) + \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}_h) + c(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{v}_h) \\ + b(\mathbf{v}_h, p^{n+1}) - (f_B(\theta^{n+1}) \mathbf{e}_y, \mathbf{v}_h) = (\mathbf{F}^{n+1}, \mathbf{v}_h) - (R_u^{n+1}, \mathbf{v}_h) \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$(\delta_t \theta^{n+1}, \psi_h) + \frac{1}{\mathcal{R}ePr} \bar{a}(\theta^{n+1}, \psi_h) + \bar{c}(\mathbf{u}^{n+1}, \theta^{n+1}, \psi_h) = (g^{n+1}, \psi_h) - (R_\theta^{n+1}, \psi_h) \quad (4.28)$$

Terminons cette section par l'introduction d'hypothèses de régularité. Dans ce chapitre, nous nous concentrons sur les solutions qui présentent certaines propriétés de régularité. Ceci est exprimé avec les hypothèses suivantes.

Hypothèse 4.1.1. Soit $\mathcal{N} > 0$, nous supposons que la solution \mathbf{u} , θ , p est telle que

$$\forall t \in [0; t_f], \quad \|\mathbf{u}(t)\|_{H^1} + \|p(t)\|_{L^2} + \|\theta(t)\|_{H^1} \leq \mathcal{N}. \quad (4.29)$$

Hypothèse 4.1.2. Il existe $0 \leq s_u \leq p_u$, $0 \leq s_p \leq p_p$, $0 \leq s_\theta \leq p_\theta$ tel que $\mathbf{u} \in L^\infty(0, t_f; H^{1+s_u})$, $\partial_t \mathbf{u} \in L^\infty(0, t_f; H^{s_u})$, $\partial_{tt} \mathbf{u} \in L^\infty(0, t_f; L^2)$, $p \in L^\infty(0, t_f; H^{1+s_p})$, $\theta \in L^\infty(0, t_f; H^{1+s_\theta})$, $\partial_t \theta \in L^\infty(0, t_f; H^{s_\theta})$, $\partial_{tt} \theta \in L^\infty(0, t_f; L^2)$. Nous introduisons

$$\begin{aligned} M_1(\mathbf{u}, p, \theta) := & \|\partial_{tt} \mathbf{u}\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \|\partial_t \mathbf{u}\|_{L^\infty(H^{s_u})}^2 + \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^{1+s_u})}^2 + \|p\|_{L^\infty(H^{1+s_p})}^2 \\ & + \|p\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \|\partial_{tt} \theta\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \|\partial_t \theta\|_{L^\infty(H^{s_\theta})}^2 + \|\theta\|_{L^\infty(H^{1+s_\theta})}^2 \end{aligned} \quad (4.30)$$

Hypothèse 4.1.3. Il existe $0 \leq s_\theta \leq p_\theta$ tel que $\mathbf{u} \in L^\infty(0, t_f; H^2)$, $\partial_t \mathbf{u} \in L^\infty(0, t_f; H^2)$, $\partial_{tt} \mathbf{u} \in L^\infty(0, t_f; L^2)$, $p \in L^\infty(0, t_f; H^1)$, $\partial_t p \in L^\infty(0, t_f; H^1)$, $\theta \in L^\infty(0, t_f; H^{1+s_\theta})$, $\partial_t \theta \in L^\infty(0, t_f; H^{s_\theta})$, $\partial_{tt} \theta \in L^\infty(0, t_f; L^2)$. Nous introduisons

$$M_2(\mathbf{u}, p, \theta) := \|\partial_{tt} \mathbf{u}\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \|\partial_{tt} \theta\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \|\theta\|_{L^\infty(H^{1+s_\theta})}^2 \quad (4.31)$$

$$+ \|\partial_t \theta\|_{L^\infty(H^{s_\theta})}^2 + \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^2 + \|p\|_{L^\infty(H^1)}^2 \quad (4.32)$$

$$+ \|p\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^4 + \|p\|_{L^\infty(H^1)}^4 \quad (4.33)$$

$$+ \|p\|_{L^\infty(L^2)}^4 + \|\partial_t \mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^2 + \|\partial_t p\|_{L^\infty(H^1)}^2 + \|\partial_t \theta\|_{L^\infty(L^2)}^2 \quad (4.34)$$

Notons que l'hypothèse 4.1.1 est redondante avec les hypothèses 4.1.2 et 4.1.3, mais nous la gardons afin de séparer les termes qui sont bornés par \mathcal{N} de ceux bornés par M_1 ou M_2 . Tout au long de ce chapitre, nous désignerons par C une constante positive qui est indépendante de h , de M_1 et de M_2 . Sauf indication contraire, C peut dépendre de \mathcal{N} , Ω , σ et/ou des paramètres sans dimension $\mathcal{R}e$, $\mathcal{P}r$ et $\mathcal{R}a$. Sa valeur peut changer à chaque ligne.

4.2. Première estimation d'erreur pour la convection naturelle

Commençons par introduire la décomposition des erreurs de la façon suivante :

$$\begin{aligned} e_u^n &= \mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n = (\mathbf{u}^n - C_h \mathbf{u}^n) - (\mathbf{u}_h^n - C_h \mathbf{u}^n) = \eta_u^n - \varphi_u^n, \\ e_p^n &= p^n - p_h^n = (p^n - C_h p^n) - (p_h^n - C_h p^n) = \eta_p^n - \varphi_p^n, \\ e_\theta^n &= \theta^n - \theta_h^n = (\theta^n - C_h \theta^n) - (\theta_h^n - C_h \theta^n) = \eta_\theta^n - \varphi_\theta^n. \end{aligned}$$

Théorème 4.2.1. Soit (\mathbf{u}, p, θ) la solution de (4.1)-(4.2)-(4.3) telle que les hypothèses 4.1.1 et 4.1.2 soient vérifiées. Alors les estimations d'erreurs suivantes sont valables pour tout $n \leq N_f$:

$$\begin{aligned} \|\varphi_u^n\|_0^2 + \|\varphi_\theta^n\|_0^2 &\leq C \left(\delta t^2 \|\partial_{tt} \mathbf{u}\|_{L^\infty(L^2)}^2 + h^{2s_u} \|\partial_t \mathbf{u}\|_{L^\infty(H^{p_u})}^2 + \left(1 + \frac{1}{\gamma_h}\right) h^{2s_u} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^{1+s_u})}^2 \right. \\ &\quad \left. + h^{2(1+s_p)} \|p\|_{L^\infty(H^{1+s_p})}^2 + \gamma_h \|p\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \delta t^2 \|\partial_{tt} \theta\|_{L^\infty(L^2)}^2 + h^{2s_\theta} \|\partial_t \theta\|_{L^\infty(H^{s_\theta})}^2 + h^{2s_\theta} \|\theta\|_{L^\infty(H^{1+s_\theta})}^2 \right). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Démonstration. Grâce aux notations introduites dans le paragraphe 4.1.4, en soustrayant le système (4.26)-(4.27)-(4.28) au système (4.20)-(4.21)-(4.22), on obtient, pour toute fonction test discrète $(\mathbf{v}_h, q_h, \psi_h) \in X_h \times Q_h \times W_h$ le système suivant

$$\begin{aligned} b(e_u^{n+1}, q_h) - \gamma_h(e_p^{n+1}, q_h) &= -\gamma_h(p^{n+1}, q_h), \\ (\delta_t e_u^{n+1}, v_h) + \frac{1}{\mathcal{R}e} a(e_u^{n+1}, v_h) + b(v_h, e_p^{n+1}) \\ &\quad + c(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, v_h) - c(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{u}_h^{n+1}, v_h) = \frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{R}e^2 \mathcal{P}r} (e_\theta^{n+1} \mathbf{e}_y, v_h) - (R_u^{n+1}, v_h), \\ (\delta_t e_\theta^{n+1}, \psi_h) + \frac{1}{\mathcal{R}e \mathcal{P}r} \bar{a}(e_\theta^{n+1}, \psi_h) + \bar{c}(\mathbf{u}^{n+1}, \theta^{n+1}, \psi_h) - \bar{c}(\mathbf{u}_h^{n+1}, \theta_h^{n+1}, \psi_h) &= - (R_\theta^{n+1}, \psi_h). \end{aligned}$$

En utilisant les notations η . et φ ., et en fixant $\mathbf{v}_h = \varphi_u^{n+1}$, $q_h = \varphi_p^{n+1}$, $\psi_h = \varphi_\theta^{n+1}$ on obtient

$$\begin{aligned} b(\varphi_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) - \gamma_h(\varphi_p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) &= b(\eta_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) \\ &\quad - \gamma_h(\eta_p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) + \gamma_h(p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}), \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} (\delta_t \varphi_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\varphi_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + b(\varphi_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) \\ = (\delta_t \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + b(\varphi_u^{n+1}, \eta_p^{n+1}) + c(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) \\ - c(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{u}_h^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - \frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{R}e^2 \mathcal{P}r} (e_\theta^{n+1} \mathbf{e}_y, \varphi_u^{n+1}) + (R_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}), \end{aligned} \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned} (\delta_t \varphi_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) + \frac{1}{\mathcal{R}e \mathcal{P}r} \bar{a}(\varphi_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) &= (\delta_t \eta_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) + \frac{1}{\mathcal{R}e \mathcal{P}r} \bar{a}(\eta_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) \\ &\quad + \bar{c}(\mathbf{u}^{n+1}, \theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) - \bar{c}(\mathbf{u}_h^{n+1}, \theta_h^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) + (R_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}). \end{aligned} \quad (4.38)$$

Si l'équation (4.37) est soustraite à l'équation (4.36), nous obtenons l'égalité suivante

$$\begin{aligned}
 (\delta_t \varphi_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\varphi_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + \gamma_h(\varphi_p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) & \quad (4.39) \\
 &= (\delta_t \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + b(\varphi_u^{n+1}, \eta_p^{n+1}) \\
 &+ c(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - c(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{u}_h^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - \frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{R}e^2 \mathcal{P}r} (\epsilon_\theta^{n+1} \mathbf{e}_y, \varphi_u^{n+1}) \\
 &+ (R_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - b(\eta_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) + \gamma_h(\eta_p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) - \gamma_h(p^{n+1}, \varphi_p^{n+1})
 \end{aligned}$$

L'objectif est de minorer le membre de gauche et majorer le membre de droite de (4.39) et de (4.38).

Les membres de gauche de (4.39) et de (4.38) sont minorés grâce à la définition de δ_t , à la coercivité de a et de \bar{a} , et à l'identité habituelle $(x - y)x = \frac{1}{2}(x^2 - y^2 + (x - y)^2)$. Les inégalités qui en résultent sont :

$$(\delta_t \varphi_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\varphi_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + \gamma_h(\varphi_p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) \quad (4.40)$$

$$\geq \frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 + \|\delta \varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2) + \frac{\alpha}{\mathcal{R}e} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \gamma_h \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2,$$

$$(\delta_t \varphi_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) + \frac{1}{\mathcal{R}e \mathcal{P}r} \bar{a}(\varphi_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) \quad (4.41)$$

$$\geq \frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_\theta^n\|_{L^2}^2 + \|\delta \varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2) + \frac{\bar{\alpha}}{\mathcal{R}e \mathcal{P}r} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2.$$

où $\delta \varphi_u^{n+1} = \varphi_u^{n+1} - \varphi_u^n$ et $\delta \varphi_\theta^{n+1} = \varphi_\theta^{n+1} - \varphi_\theta^n$.

Nous donnons désormais une borne supérieure du membre de droite de (4.39). En utilisant une inégalité de Young et la définition de $\mathcal{C}_h \mathbf{u}$, on obtient les inégalités suivantes :

$$|a(\eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| = 0, \quad (4.42)$$

$$|b(\varphi_u^{n+1}, \eta_p^{n+1})| \leq \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \|\eta_p^{n+1}\|_{L^2} \leq \kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \frac{1}{4\kappa_u} \|\eta_p^{n+1}\|_{L^2}^2, \quad (4.43)$$

$$|b(\eta_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1})| \leq \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2} \leq \frac{1}{4\kappa_p \gamma} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \gamma_h \kappa_p \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2, \quad (4.44)$$

$$|\gamma_h(\eta_p^{n+1}, \varphi_p^{n+1})| \leq \gamma_h \|\eta_p^{n+1}\|_{L^2} \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2} \leq \frac{\gamma_h}{4\kappa_p} \|\eta_p^{n+1}\|_{L^2}^2 + \kappa_p \gamma_h \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2, \quad (4.45)$$

$$|\gamma_h(p^{n+1}, \varphi_p^{n+1})| \leq \gamma_h \|p^{n+1}\|_{L^2} \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2} \leq \frac{\gamma_h}{4\kappa_p} \|p^{n+1}\|_{L^2}^2 + \gamma_h \kappa_p \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2 \quad (4.46)$$

$$|(\delta_t \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| \leq \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2} \leq \frac{1}{2} \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 \quad (4.47)$$

$$|(R_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| \leq \|R_u^{n+1}\|_{L^2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2} \leq \frac{1}{2} \|R_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2, \quad (4.48)$$

où κ_u et κ_p sont des constantes positives, indépendantes de h , à choisir.

Le terme de Boussinesq est traité en utilisant la décomposition de e_θ^{n+1} :

$$\begin{aligned}
 |(e_\theta^{n+1} \mathbf{e}_y, \varphi_u^{n+1})| &\leq \|e_\theta^{n+1}\|_{L^2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2} \\
 &\leq (\|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2} + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}) \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2} \\
 &\leq \frac{1}{2} \|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

Les termes trilineaires sont traités en utilisant $\mathbf{u}_h^{n+1} = \mathbf{u}^{n+1} - \eta_u^{n+1} + \varphi_u^{n+1}$ et la antisymétrie de c par rapport aux 2 dernières variables :

$$\begin{aligned}
 &c(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - c(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{u}_h^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) \\
 = &c(\mathbf{u}^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + c(\eta_u^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - c(\eta_u^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) \\
 - &c(\varphi_u^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + c(\varphi_u^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})
 \end{aligned} \tag{4.50}$$

Les trois premiers sont traités en utilisant (4.14)-(4.15) et une inégalité de Young, pour $0 < \sigma < 1$ (rappelons que σ est petit) :

$$\begin{aligned}
 |c(\mathbf{u}^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| &\leq C \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \\
 &\leq \frac{C^2}{4\kappa_u} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1}^2 \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma}^2 + \kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

$$\begin{aligned}
 |c(\eta_u^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| &\leq C \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \\
 &\leq \frac{C^2}{4\kappa_u} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1}^2 \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma}^2 + \kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2
 \end{aligned} \tag{4.52}$$

$$\begin{aligned}
 |c(\eta_u^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| &\leq C \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^2 \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}, \\
 &\leq \frac{C^2}{4\kappa_u} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^4 + \kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2
 \end{aligned} \tag{4.53}$$

Les deux derniers termes sont traités avec (4.12) et l'inégalité de Young $xy \leq \frac{x^4}{4} + \frac{3y^{4/3}}{4}$:

$$\begin{aligned}
 |c(\varphi_u^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| &\leq C \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^{1/2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^{1/2} \\
 &\leq C \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^{3/2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^{1/2} \\
 &\leq \frac{C^4}{4\kappa_u^3} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1}^4 \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{3\kappa_u}{4} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2
 \end{aligned} \tag{4.54}$$

$$\begin{aligned}
 |c(\varphi_u^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| &\leq C \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^{1/2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^{1/2} \\
 &\leq C \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^{3/2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^{1/2} \\
 &\leq \frac{C^4}{4\kappa_u^3} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1}^4 \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{3\kappa_u}{4} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2
 \end{aligned} \tag{4.55}$$

En rassemblant les estimations (4.42) à (4.48), (4.49) et (4.51) à (4.55) ainsi que la limite

inférieure (4.40) on obtient

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1} - \varphi_u^n\|_{L^2}^2) + \frac{\alpha}{\mathcal{R}e} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \gamma_h \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2 \\ & \leq \frac{1}{2} \|R_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma_h}{4\kappa_p} \|p^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{11\kappa_u}{2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 \end{aligned} \quad (4.56)$$

$$+ 3\gamma_h \kappa_p \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2 + C'_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + C_p \|\eta_p^{n+1}\|_{L^2}^2 + C_u \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \frac{C^2}{2\kappa_u} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma}^2, \quad (4.57)$$

où les "constantes" C_u , C_p et C'_u sont donnés par :

$$\begin{aligned} C'_u &= 2 + \frac{1}{2\kappa_u^3} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1}^4 \leq 2 + \frac{C^4}{2\kappa_u^3} \mathcal{N}^4, \\ C_p &= \frac{1}{4\kappa_u} + \frac{\gamma_h}{4\kappa_p}, \\ C_u &= \frac{1}{4\gamma_h \kappa_p} + \frac{C^2}{2\kappa_u} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^2 \leq C \left(1 + \frac{1}{\gamma_h}\right). \end{aligned}$$

Nous choisissons $\kappa_u = \frac{\alpha}{11\mathcal{R}e}$ et $\kappa_p = \frac{1}{6}$ et il existe C indépendant de h tel que

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1} - \varphi_u^n\|_{L^2}^2) + \frac{\alpha}{2\mathcal{R}e} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \frac{\gamma_h}{2} \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2 \\ & \leq C \left(\|R_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \left(1 + \frac{1}{\gamma_h}\right) \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^2 \right. \\ & \quad \left. + \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma}^2 + \|\eta_p^{n+1}\|_{L^2}^2 + \gamma_h \|p^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 \right). \end{aligned} \quad (4.58)$$

Tous les détails ont été donnés afin de s'assurer que les constantes du membre de droite ne dépendent pas de h ou de γ_h .

Concernant (4.38), nous avons cinq termes à borner. Le deuxième est nul en raison de la définition de $C_h \theta$, le premier et le dernier terme sont bornés en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz ainsi que l'inégalité de Young :

$$|(\delta_t \eta_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1})| \leq \frac{1}{2} \|\delta_t \eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2, \quad (4.59)$$

$$|(R_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1})| \leq \frac{1}{2} \|R_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2. \quad (4.60)$$

Pour traiter la forme trilinéaire \bar{c} , nous soustrayons et ajoutons des termes de la même manière que dans (4.50).

$$\begin{aligned} \bar{c}(u^{n+1}, \theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) - \bar{c}(u_h^{n+1}, \theta_h^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) &= \bar{c}(u^{n+1}, \eta_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) + \bar{c}(\eta_u^{n+1}, \theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) \\ &\quad - \bar{c}(\eta_u^{n+1}, \eta_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) - \bar{c}(\varphi_u^{n+1}, \theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) + \bar{c}(\varphi_u^{n+1}, \eta_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1}) \end{aligned}$$

À nouveau, cinq termes sont à borner, ce qui se fait de la même manière que pour (4.51)-

(4.55) :

$$|\bar{c}(u^{n+1}, \eta_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1})| \leq \frac{C^2}{4\kappa_\theta} \|u^{n+1}\|_{H^1}^2 \|\eta_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 + \kappa_\theta \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 \quad (4.61)$$

$$|\bar{c}(\eta_u^{n+1}, \theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1})| \leq \frac{C^2}{4\kappa_\theta} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^2 \|\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 + \kappa_\theta \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 \quad (4.62)$$

$$|\bar{c}(\eta_u^{n+1}, \eta_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1})| \leq \frac{C^2}{4\kappa_\theta} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^2 \|\eta_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 + \kappa_\theta \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 \quad (4.63)$$

$$\begin{aligned} |\bar{c}(\varphi_u^{n+1}, \theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1})| &\leq \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \|\theta^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1}^{1/2} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^{1/2} \\ &\leq \kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \frac{1}{4\kappa_u} \|\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2} \\ &\leq \kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \kappa_\theta \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 + \frac{1}{64\kappa_\theta \kappa_u^2} \|\theta^{n+1}\|_{H^1}^4 \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 \end{aligned} \quad (4.64)$$

$$|\bar{c}(\varphi_u^{n+1}, \eta_\theta^{n+1}, \varphi_\theta^{n+1})| \leq \kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \kappa_\theta \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 + \frac{1}{64\kappa_\theta \kappa_u^2} \|\eta_\theta^{n+1}\|_{H^1}^4 \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2. \quad (4.65)$$

Ici, κ_θ est une nouvelle constante. Notons que $\|\eta_\theta^{n+1}\|_{H^1}^4 \leq C\mathcal{N}^4$ et $\|\theta^{n+1}\|_{H^1}^4 \leq C\mathcal{N}^4$.

Enfin, en rassemblant les estimations (4.59)-(4.60) et (4.61) à (4.65), en utilisant la borne inférieure (4.41), et en fixant $\kappa_\theta = \frac{\bar{\alpha}}{5\mathcal{R}e\mathcal{P}r}$, on obtient

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_\theta^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_\theta^{n+1} - \varphi_\theta^n\|_{L^2}^2) + \frac{\bar{\alpha}K}{2\mathcal{R}e\mathcal{P}r} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 \\ &\leq C (\|R_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\delta_t \eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\eta_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 + \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^2) \\ &\quad + 2\kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + C \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Avant d'appliquer le lemme de Gronwall, nous définissons $\kappa_u = \frac{\alpha}{8\mathcal{R}e}$ et additionnons (4.58) et (4.66)

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_\theta^n\|_{L^2}^2) \\ &\quad + \frac{\alpha}{4\mathcal{R}e} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} + \frac{\bar{\alpha}K}{2\mathcal{R}e\mathcal{P}r} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1} + \frac{\gamma h}{2} \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2\delta t} (\|\delta \varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\delta \varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2) \\ &\leq C \left(\|R_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \left(1 + \frac{1}{\gamma}\right) \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^2 \right. \\ &\quad + \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma}^2 + \|\eta_p^{n+1}\|_{L^2}^2 + \gamma \|p^{n+1}\|_{L^2}^2 \\ &\quad + \|R_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\delta_t \eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\eta_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 + \|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 \\ &\quad \left. + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 \right) \end{aligned} \quad (4.67)$$

Rappelons que $\eta_u = \mathbf{u} - C_h \mathbf{u}$ et nous avons

$$\begin{aligned} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma} &\leq Ch^{1+s_u-\sigma} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^{1+s_u}} \leq Ch^{1+s_u-\sigma} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^{1+s_u})}, \\ \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1} &\leq Ch^{s_u} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^{1+s_u}} \leq Ch^{s_u} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^{1+s_u})}. \end{aligned}$$

En utilisant la régularité de \mathbf{u} , on a aussi

$$\|R_u^{n+1}\|_{L^2} \leq C\delta t \|\partial_{tt} \mathbf{u}\|_{L^\infty(L^2)}, \quad (4.68)$$

$$\|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2} = \|\delta_t \mathbf{u}^{n+1} - C_h \delta_t \mathbf{u}^{n+1}\|_{L^2} \leq Ch^{s_u} \|\delta_t \mathbf{u}^{n+1}\|_{L^\infty(H^{s_u})} \leq Ch^{s_u} \|\partial_t \mathbf{u}\|_{L^\infty(H^{s_u})}. \quad (4.69)$$

En utilisant des bornes similaires pour p et θ , nous introduisons la quantité

$$\begin{aligned} E(\mathbf{u}, p, \theta, \delta t, h, \gamma) &:= \delta t^2 \|\partial_{tt} \mathbf{u}\|_{L^\infty(L^2)}^2 + h^{2s_u} \|\partial_t \mathbf{u}\|_{L^\infty(H_u^s)}^2 + \left(1 + \frac{1}{\gamma}\right) h^{2s_u} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^{1+s_u})}^2 \\ &\quad + h^{2(1+s_p)} \|p\|_{L^\infty(H^{1+s_p})}^2 + \gamma_h \|p\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \delta t^2 \|\partial_{tt} \theta\|_{L^\infty(L^2)}^2 \\ &\quad + h^{2s_\theta} \|\partial_t \theta\|_{L^\infty(H_\theta^s)}^2 + h^{2s_\theta} \|\theta\|_{L^\infty(H^{1+s_\theta})}^2 \end{aligned} \quad (4.70)$$

Notons qu'il devrait y avoir un terme dans $h^{2(1+s_u-\sigma)} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^{1+s_u})}^2$ que nous éliminons car il est plus petit que le terme h^{2s_u} puisque de $0 < \sigma < 1$.

En enlevant quelques termes positifs dans le membre de gauche de (4.67), l'estimation obtenue est la suivante

$$\frac{1}{\delta t} (\|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_\theta^n\|_{L^2}^2) \quad (4.71)$$

$$\leq C (E(\mathbf{u}, p, \theta, \delta t, h, \gamma) + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2). \quad (4.72)$$

En utilisant le lemme de Gronwall discret, nous pouvons écrire, pour tout $0 \leq n \leq N_f$:

$$\|\varphi_\theta^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 \leq C (\|\varphi_\theta^0\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^0\|_{L^2}^2 + E(\mathbf{u}, p, \theta, \delta t, h, \gamma)). \quad (4.73)$$

Ici, C dépend de t_f , mais pas de δt , h ou γ_h .

Enfin, on choisit \mathbf{u}_h^0 et θ_h^0 tels que $\varphi_u^0 = 0$ et $\varphi_\theta^0 = 0$ afin d'obtenir le résultat souhaité. □

Corollaire 4.2.1. *Sous l'hypothèse du théorème 4.2.1, l'estimation d'erreur suivante est vérifiée :*

$$\|e_u^n\|_0^2 + \|e_\theta^n\|_0^2 \leq C \left(\delta t^2 + h^{2s_u} + \frac{h^{2s_u}}{\gamma_h} + h^{2(1+s_p)} + \gamma_h + h^{2s_\theta} \right) M_1(\mathbf{u}, p, \theta). \quad (4.74)$$

Démonstration. En utilisant l'inégalité triangulaire, nous avons

$$\|e_u^n\|_0^2 + \|e_\theta^n\|_0^2 \leq 2\|\varphi_u^n\|_0^2 + 2\|\varphi_\theta^n\|_0^2 + 2\|\eta_u^n\|_0^2 + 2\|\eta_\theta^n\|_0^2.$$

Les deux premiers termes correspondent au membre de gauche de (4.35), de sorte que

$$\|\varphi_u^n\|_0^2 + \|\varphi_\theta^n\|_0^2 \leq C \left(\delta t^2 + h^{2s_u} + \frac{h^{2s_u}}{\gamma_h} + h^{2(1+s_p)} + \gamma_h + h^{2s_\theta} \right) M_1(\mathbf{u}, p, \theta).$$

Pour les deux derniers termes, nous utilisons les propriétés de \mathcal{C}_h :

$$\begin{aligned} \|\varphi_u^n\|_0^2 &= \|\mathbf{u}^n - \mathcal{C}_h \mathbf{u}^n\|_0^2 \leq C^2 h^{2+2p_u} \|\mathbf{u}^n\|_{H^{1+p_u}}^2 \leq C^2 h^{2+2p_u} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^{1+p_u})}^2, \\ \|\varphi_\theta^n\|_0^2 &= \|\theta^n - \mathcal{C}_h \theta^n\|_0^2 \leq C^2 h^{2+2p_\theta} \|\theta^n\|_{H^{1+p_\theta}}^2 \leq C^2 h^{2+2p_\theta} \|\theta\|_{L^\infty(H^{1+p_\theta})}^2. \end{aligned}$$

Les derniers termes à droites sont bornés par h^2 multipliés par le membre de droite de (4.74). Pour un h suffisamment petit, on obtient alors le résultat souhaité. \square

Dans nos applications, nous voulons utiliser $p_u = p_p = p_\theta = 1$. Ainsi, nous pouvons utiliser $s_u = s_\theta = 1$ et $s_p = 0$ dans l'estimation précédente, et nous avons :

$$\|\mathbf{e}_u^n\|_0^2 + \|e_\theta^n\|_0^2 \leq C \left(\delta t^2 + h^2 + \frac{h^2}{\gamma_h} + \gamma_h \right) M_1(\mathbf{u}, p, \theta).$$

Les termes dominants sont δt^2 , $\frac{h^2}{\gamma_h}$ et γ_h , dont nous déduisons le choix de $\gamma_h = h$. En conséquence, nous obtenons une convergence d'ordre 1 en temps, et 1/2 en espace. Les simulations numériques suggèrent que cet ordre n'est pas optimal (voir le paragraphe 4.5), nous cherchons donc à améliorer notre estimation. Le point clé est d'éliminer le terme $b(\eta_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1})$ dans la preuve du théorème (4.2.1).

4.3. Projection de Stokes modifiée

L'objectif de cette section est de proposer une projection de Stokes modifiée qui permet d'améliorer le taux de convergence. Nous l'appelons *projection de Stokes modifiée* puisque, à proprement parler, ce n'est pas une projection.

4.3.1. Définition d'une famille d'opérateurs

Définition 4.3.1. Pour tout $0 \leq \lambda < 1$, nous définissons la forme bilinéaire a_λ sur $\mathbf{X} \times L^2$ par

$$a_\lambda((\mathbf{u}, p), (\mathbf{v}, q)) := \frac{1}{Re} a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, p) - b(\mathbf{u}, q) + \lambda(p, q).$$

Nous introduisons une norme adaptée à cette forme bilinéaire, à savoir

$$\|\mathbf{u}, p\|_\lambda := \frac{1}{\sqrt{Re}} \|\mathbf{u}\|_{H^1} + \sqrt{\lambda} \|p\|_{L^2}.$$

Dans la suite, nous supposons toujours que $0 < \lambda < 1$ et que $Re > 1$.

Proposition 4.3.1. a_λ est coercive et continue par rapport à la norme $\|\cdot\|_\lambda$. Plus précisément, il existe C, C' indépendants de λ et de $\mathcal{R}e$ tels que, pour tout $(\mathbf{u}, p) \in \mathbf{X} \times L^2$ et $(\mathbf{v}, q) \in \mathbf{X} \times L^2$,

$$C' \|\mathbf{u}, p\|_\lambda^2 \leq a_\lambda((\mathbf{u}, p), (\mathbf{u}, p)), \quad (4.75)$$

$$|a_\lambda((\mathbf{u}, p), (\mathbf{v}, q))| \leq \frac{C\sqrt{\mathcal{R}e}}{\sqrt{\lambda}} \|\mathbf{u}, p\|_\lambda \|\mathbf{v}, q\|_\lambda. \quad (4.76)$$

La coercivité de a_λ découle directement de celle de la forme bilinéaire a , tandis que la continuité est obtenue à partir de la continuité de a et b et des inégalités de Cauchy-Schwarz. En utilisant cette forme bilinéaire, nous définissons une famille d'opérateurs de la manière suivante :

Definition 4.3.2. Soit \mathcal{X} un sous-ensemble fermé de \mathbf{X} et \mathcal{Q} un sous-ensemble fermé de L^2 . Pour tout $0 < \lambda < 1$ et $0 \leq \gamma < 1$, on définit l'opérateur $\mathbb{P}_{\lambda, \gamma}^{\mathcal{X}, \mathcal{Q}} : \mathbf{X} \times L^2 \rightarrow \mathcal{X} \times \mathcal{Q}$ sous une forme variationnelle. Pour tout $(\mathbf{u}, p) \in \mathbf{X} \times L^2$, $\mathbb{P}_{\lambda, \gamma}^{\mathcal{X}, \mathcal{Q}}(\mathbf{u}, p) = (\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Q}$ est tel que :

$$\forall (\mathbf{v}, q) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Q}, \quad a_\lambda((\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\mathbf{v}, q)) = a_\gamma((\mathbf{u}, p), (\mathbf{v}, q)). \quad (4.77)$$

En raison de la coercivité et de la continuité de a_λ , les opérateurs $\mathbb{P}_{\lambda, \gamma}^{\mathcal{X}, \mathcal{Q}}$ sont bien définis. Nous voulons utiliser l'opérateur $\mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{X_h, Q_h}$ pour établir des résultats de convergence pour le problème de convection naturelle. Notez que, d'après la définition (4.77), pour $(\mathbf{u}, p) \in \mathbf{X} \times L^2$, si nous définissons $(\mathbf{u}_h, p_h) = \mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{X_h, Q_h}(\mathbf{u}, p)$ et $(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}) = \mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{\mathbf{X}, L^2}(\mathbf{u}, p)$, alors nous avons

$$(\mathbf{u}_h, p_h) = \mathbb{P}_{\gamma_h, \gamma_h}^{X_h, Q_h}(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}). \quad (4.78)$$

La projection de Stokes modifiée est définie comme $\tilde{\mathbb{P}}_{\gamma_h, 0}^{X_h, Q_h}$. Par conséquent, ses propriétés peuvent être établies par les propriétés de $\mathbb{P}_{\gamma_h, \gamma_h}^{X_h, Q_h}$ et de $\mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{\mathbf{X}, L^2}$. Afin d'étudier ces deux opérateurs, nous utiliserons à plusieurs reprises le théorème 1.3 de [da Veiga \(1997\)](#) qui peut être présenté par

Théorème 4.3.1. Soit $\mathbf{f} \in L^2$ et $g \in H^1 \cap Q$. Soit $(\mathbf{u}, p) \in \mathbf{X} \times Q$ tel que

$$\begin{cases} -\mu \Delta \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} + \lambda p &= g, \end{cases} \quad (4.79)$$

où μ, λ sont des constantes positives. Alors $\mathbf{u} \in H^2$ et $p \in H^1$, et il existe une constante C qui ne dépend que de Ω tel que

$$\mu \|\mathbf{u}\|_{H^2} + (1 + \mu\lambda) \|p\|_{H^1} \leq C (\|\mathbf{f}\|_{L^2} + \mu \|g\|_{H^1}). \quad (4.80)$$

4.3.2. Analyse des opérateurs

4.3.2.1. L'opérateur de pénalisation $\mathbb{P}_{\gamma_h,0}^{\mathbf{X},L^2}$

Dans cette sous-section, nous établissons des estimations de convergence pour différentes normes.

Proposition 4.3.2. *Soit $\mathbf{u} \in \mathbf{X}$ et $p \in Q$. Introduisons $(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}) = \mathbb{P}_{\gamma_h,0}^{\mathbf{X},L^2}(\mathbf{u}, p)$. Alors il existe une constante C indépendante de γ_h et de Re tel que*

$$\frac{1}{\sqrt{Re}} \|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}\|_{H^1} + \sqrt{Re} \|p - \tilde{p}\|_{L^2} \leq \frac{C\gamma_h}{\sqrt{Re}} \|p\|_{L^2}. \quad (4.81)$$

Démonstration. De la définition de $\mathbb{P}_{\gamma_h,0}^{\mathbf{X},L^2}$, pour tout $(\mathbf{v}, q) \in \mathbf{X} \times L^2$, on déduit que

$$a_{\gamma_h}((\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}), (\mathbf{v}, q)) = a_{\gamma_h}((\mathbf{u}, p), (\mathbf{v}, q)) - \gamma_h(p, q).$$

En utilisant la coercivité de a_{γ_h} , on obtient

$$\begin{aligned} C' \|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}, p - \tilde{p}\|_{\gamma_h}^2 &\leq a_{\gamma_h}((\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}, \tilde{p} - p), (\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}, \tilde{p} - p)) \\ &\leq \gamma_h |(p, \tilde{p} - p)| \leq \gamma_h \|p\|_{L^2} \|\tilde{p} - p\|_{L^2}. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Au lieu d'appliquer directement l'inégalité de Young, nous voulons remplacer la norme de $(\tilde{p} - p)$ par celle de $(\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u})$. En utilisant $(\mathbf{v}, 0)$ comme fonction test dans la définition de $\mathbb{P}_{\gamma_h,0}^{\mathbf{X},L^2}$ on obtient :

$$\forall \mathbf{v} \in \mathbf{X}, \quad \frac{1}{Re} a(\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, \tilde{p} - p) = 0.$$

En utilisant la condition LBB (4.16), nous déduisons que

$$\beta \|\tilde{p} - p\|_{L^2} \leq \sup_{\mathbf{v} \in \mathbf{X} \setminus \{0\}} \frac{b(\mathbf{v}, \tilde{p} - p)}{\|\mathbf{v}\|_{H^1}} = \sup_{\mathbf{v} \in \mathbf{X} \setminus \{0\}} \frac{a(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v})}{\|\mathbf{v}\|_{H^1}} \leq \frac{A}{Re} \|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}\|_{H^1}. \quad (4.83)$$

En utilisant cette inégalité dans (4.82) on obtient

$$\|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}, p - \tilde{p}\|_{\gamma_h}^2 \leq \frac{C\gamma_h}{Re} \|p\|_{L^2} \|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}\|_{H^1} \leq \frac{C\gamma_h}{\sqrt{Re}} \|p\|_{L^2} \|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}, p - \tilde{p}\|_{\gamma_h}, \quad (4.84)$$

ce qui implique à son tour que

$$\|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}, p - \tilde{p}\|_{\gamma_h} \leq \frac{C\gamma_h}{\sqrt{Re}} \|p\|_{L^2}.$$

De cette inégalité, on obtient

$$\frac{1}{\sqrt{Re}} \|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}\|_{H^1} \leq \frac{C\gamma_h}{\sqrt{Re}} \|p\|_{L^2}. \quad (4.85)$$

En insérant cette inégalité (4.85) dans (4.83) on obtient

$$\sqrt{\mathcal{R}e}\|\tilde{p} - p\|_{L^2} \leq \frac{A}{\beta\sqrt{\mathcal{R}e}}\|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}\|_{H^1} \leq \frac{C\gamma_h}{\sqrt{\mathcal{R}e}}\|p\|_{L^2}, \quad (4.86)$$

et le résultat souhaité est finalement obtenu à partir de (4.85) et (4.86). \square

Proposition 4.3.3. Soit $\mathbf{u} \in \mathbf{X} \cap H^2$ et $p \in H^1 \cap Q$. Introduisons $(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}) = \mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{\mathbf{X}, L^2}(\mathbf{u}, p)$. Alors $\tilde{\mathbf{u}} \in H^2$, $\tilde{p} \in H^1 \cap Q$ et les estimations suivantes tiennent, pour C ne dépendant que de Ω :

$$\|\tilde{\mathbf{u}}\|_{H^2} \leq C(\|\mathbf{u}\|_{H^2} + \gamma_h\|p\|_{H^1}), \quad (4.87)$$

$$\|\tilde{p}\|_{H^1} \leq C\|p\|_{H^1}, \quad (4.88)$$

$$\mathcal{R}e\|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}\|_{H^2} + \left(1 + \frac{\gamma_h}{\mathcal{R}e}\right)\|\tilde{p} - p\|_{H^1} \leq \frac{C\gamma_h}{\mathcal{R}e}\|p\|_{H^1}. \quad (4.89)$$

Démonstration. Nous commençons par prouver (4.89). Grâce à la définition de $\mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{\mathbf{X}, L^2}$, nous avons

$$\begin{cases} -\frac{1}{\mathcal{R}e}\Delta(\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}) + \nabla(\tilde{p} - p) & = 0, \\ \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}) + \gamma_h(\tilde{p} - p) & = -\gamma_h p. \end{cases} \quad (4.90)$$

En appliquant le théorème 4.3.1 avec $\mu = \frac{1}{\mathcal{R}e}$ et $\lambda = \gamma_h$ on obtient (4.89).

De cette inégalité, on déduit que

$$\begin{aligned} \|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}\|_{H^2} &\leq C\gamma_h\|p\|_{H^1}, \\ \|\tilde{p} - p\|_{H^1} &\leq C\|p\|_{H^1}. \end{aligned}$$

Ensuite, (4.88) et (4.88) sont obtenus en utilisant des inégalités triangulaires. \square

4.3.2.2. L'opérateur de projection $\mathbb{P}_{\gamma_h, \gamma_h}^{\mathbf{X}_h, Q_h}$

Portons maintenant notre attention sur l'opérateur de projection $\mathbb{P}_{\gamma_h, \gamma_h}^{\mathbf{X}_h, Q_h}$.

Proposition 4.3.4. Soit $0 \leq s \leq p_u$ et $0 \leq s' \leq p_p$. Soit $\mathbf{u} \in \mathbf{X} \cap H^{1+s}$ et $p \in H^{1+s'} \cap Q$. Introduisons $(\mathbf{u}_h, p_h) = \mathbb{P}_{\gamma_h, \gamma_h}^{\mathbf{X}_h, Q_h}(\mathbf{u}, p)$. Alors les estimations suivantes sont vérifiées, pour C dépendant uniquement de Ω :

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h}^2 \leq \frac{C\mathcal{R}e}{\gamma_h} \left(\frac{h^{2s}}{\mathcal{R}e} \|\mathbf{u}\|_{H^{1+s}}^2 + h^{2(1+s')} \gamma_h \|p\|_{H^{1+s'}}^2 \right), \quad (4.91)$$

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}^2 \leq \frac{C\mathcal{R}e^3}{\gamma_h^2} \left(\frac{h^{2(s+1)}}{\mathcal{R}e} \|\mathbf{u}\|_{H^{1+s}}^2 + h^{4+2s'} \gamma_h \|p\|_{H^{1+s'}}^2 \right). \quad (4.92)$$

Démonstration. De la définition de la projection, pour tout $(\mathbf{v}_h, q_h) \in X_h \times Q_h$, on déduit que

$$a_{\gamma_h}((\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h), (\mathbf{v}_h, q_h)) = 0.$$

En utilisant l'orthogonalité de Galerkin et la continuité de a_{γ_h} , on obtient

$$a_{\gamma_h}((\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h), (\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h)) = a_{\gamma_h}((\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h), (\mathbf{u} - \mathcal{C}_h \mathbf{u}, p - \mathcal{C}_h p)) \quad (4.93)$$

$$\leq \frac{C\sqrt{\mathcal{R}e}}{\sqrt{\gamma_h}} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h} \|\mathbf{u} - \mathcal{C}_h \mathbf{u}, p - \mathcal{C}_h p\|_{\gamma_h}. \quad (4.94)$$

En utilisant les définitions de la norme et de a_{γ_h} , nous déduisons également que

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h}^2 \leq C a_{\gamma_h}((\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h), (\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h)).$$

Par conséquent, nous obtenons

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h}^2 \leq \frac{C\sqrt{\mathcal{R}e}}{\sqrt{\gamma_h}} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h} \|\mathbf{u} - \mathcal{C}_h \mathbf{u}, p - \mathcal{C}_h p\|_{\gamma_h}.$$

L'utilisation de l'inégalité de Young donne

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h}^2 \leq \frac{C\mathcal{R}e}{\gamma_h} \|\mathbf{u} - \mathcal{C}_h \mathbf{u}, p - \mathcal{C}_h p\|_{\gamma_h}^2.$$

ce qui implique à son tour que :

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h}^2 \leq \frac{2C\mathcal{R}e}{\gamma_h} \left(\frac{1}{\mathcal{R}e} \|\mathbf{u} - \mathcal{C}_h \mathbf{u}\|_{H^1}^2 + \gamma_h \|p - \mathcal{C}_h p\|_{L^2}^2 \right). \quad (4.95)$$

En utilisant les propriétés (4.23) de \mathcal{C}_h , on obtient (4.91).

L'estimation de L^2 est obtenue en utilisant un argument à la Nitsche-Aubin. Définissons $\mathbf{w} \in \mathbf{X}$ et $r \in Q$ tels que

$$\begin{cases} -\frac{1}{\mathcal{R}e} \Delta \mathbf{w} + \nabla r &= \mathbf{u} - \mathbf{u}_h, \\ \nabla \cdot \mathbf{w} + \gamma_h r &= 0. \end{cases} \quad (4.96)$$

Comme $\mathbf{u} - \mathbf{u}_h \in L^2$, nous pouvons appliquer le théorème 4.3.1 et nous obtenons que $\mathbf{w} \in H^2$, $r \in H^1$ ainsi que l'estimation

$$\frac{1}{\mathcal{R}e} \|\mathbf{w}\|_{H^2} + \|r\|_{H^1} \leq C \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}. \quad (4.97)$$

D'après la définition de \mathbf{w} et r , on a, pour tout $\mathbf{v} \in \mathbf{X}$ et $q \in L^2$, l'équation suivante

$$a_{\gamma_h}((\mathbf{w}, r), (\mathbf{v}, q)) = (\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, \mathbf{v}).$$

Utilisons cette identité pour $\mathbf{v} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_h$ et $q = p_h - p$. Nous obtenons alors

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}^2 &= a_{\gamma_h}((\mathbf{w}, r), (\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p_h - p)) \\ &= a_{\gamma_h}((\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h), (\mathbf{w}, -r)) \\ &= a_{\gamma_h}((\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h), (\mathbf{w} - \mathcal{C}_h \mathbf{w}, \mathcal{C}_h r - r)). \end{aligned}$$

Par continuité de a_{γ_h} , nous déduisons que

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}^2 \leq \frac{C\sqrt{\mathcal{R}e}}{\sqrt{\gamma_h}} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h} \|\mathbf{w} - \mathcal{C}_h \mathbf{w}, r - \mathcal{C}_h r\|_{\gamma_h} \quad (4.98)$$

Estimons le terme $\|\mathbf{w} - \mathcal{C}_h \mathbf{w}, r - \mathcal{C}_h r\|_{\gamma_h}$. D'après la définition de la norme et des propriétés de \mathcal{C}_h (voir (4.23)), nous déduisons que

$$\|\mathbf{w} - \mathcal{C}_h \mathbf{w}, r - \mathcal{C}_h r\|_{\gamma_h} \leq Ch \left(\frac{1}{\sqrt{\mathcal{R}e}} \|\mathbf{w}\|_{H^2} + \sqrt{\gamma_h} \|r\|_{H^1} \right).$$

En utilisant l'estimation (4.97) et $\mathcal{R}e > 1$ on obtient

$$\|\mathbf{w} - \mathcal{C}_h \mathbf{w}, r - \mathcal{C}_h r\|_{\gamma_h} \leq Ch\sqrt{\mathcal{R}e} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}.$$

En insérant cette inégalité dans (4.98), cela donne

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2} \leq \frac{C\mathcal{R}e h}{\sqrt{\gamma_h}} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h}.$$

En prenant le carré de cette inégalité, et en utilisant (4.91), on obtient (4.92). \square

Remarque 4.3.1. D'après (4.91) et (4.92), on peut noter qu'il existe une constante C indépendante de h , mais dépendant de Ω et $\mathcal{R}e$ telle que, pour tout \mathbf{u} dans $\mathbf{X} \cap H^2$ et p dans $H^1 \cap Q$,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{H^1} &\leq C \frac{h}{\sqrt{\gamma_h}} (\|\mathbf{u}\|_{H^2} + \|p\|_{H^1}), \\ \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2} &\leq C \frac{h^2}{\gamma_h} (\|\mathbf{u}\|_{H^2} + \|p\|_{H^1}). \end{aligned}$$

D'après la théorie de l'interpolation (Tartar, 2007), nous obtenons l'estimation, pour $0 \leq s \leq 1$:

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{H^s} \leq C \left(\frac{h}{\sqrt{\gamma_h}} \right)^{2-s} (\|\mathbf{u}\|_{H^2} + \|p\|_{H^1}). \quad (4.99)$$

4.3.3. Estimations d'erreurs pour l'opérateur $\mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{X_h, Q_h}$

Nous avons maintenant tous les outils en main pour prouver un résultat d'approximation pour l'opérateur que nous voulons utiliser.

Théorème 4.3.2. Soit $\mathbf{u} \in \mathbf{X} \cap H^2$ et $p \in H^1 \cap Q$. Introduisons $(\mathbf{u}_h, p_h) = \mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{X_h, Q_h}(\mathbf{u}, p)$.

Alors les estimations suivantes tiennent, pour C ne dépendant que de Ω :

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h}^2 \leq C \left(\frac{h^2}{\gamma_h} \|\mathbf{u}\|_{H^2}^2 + h^2 \gamma_h \|p\|_{H^1}^2 + \mathcal{R}e h^2 \|p\|_{H^1}^2 + \frac{\gamma_h^2}{\mathcal{R}e} \|p\|_{L^2}^2 \right), \quad (4.100)$$

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}^2 \leq C \left(\frac{\mathcal{R}e^2 h^4}{\gamma_h^2} \|\mathbf{u}\|_{H^2}^2 + \frac{\mathcal{R}e^3 h^4}{\gamma_h} \|p\|_{H^1}^2 + \gamma_h^2 \|p\|_{L^2}^2 \right). \quad (4.101)$$

Démonstration. Introduisons $(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}) = \mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{\mathbf{X}, L^2}(\mathbf{u}, p)$ de sorte que nous ayons $(\mathbf{u}_h, p_h) = \mathbb{P}_{\gamma_h, \gamma_h}^{\mathbf{X}_h, Q_h}(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p})$. Nous partons des inégalités triangulaires pour obtenir

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h}^2 \leq 2\|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}, p - \tilde{p}\|_{\gamma_h}^2 + 2\|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_h, \tilde{p} - p_h\|_{\gamma_h}^2.$$

Bornons maintenant chaque terme séparément. D'après la proposition 4.3.2, nous avons l'estimation suivante

$$\|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}, p - \tilde{p}\|_{\gamma_h}^2 \leq \frac{C\gamma_h^2}{\mathcal{R}e} \|p\|_{L^2}^2.$$

Pour le second terme, nous utilisons la proposition 4.3.4 avec $s = 1$ et $s' = 0$ pour obtenir

$$\|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_h, \tilde{p} - p_h\|_{\gamma_h}^2 \leq \frac{C\mathcal{R}e h^2}{\gamma_h} \left(\frac{1}{\mathcal{R}e} \|\tilde{\mathbf{u}}\|_{H^2}^2 + \gamma_h \|\tilde{p}\|_{H^1}^2 \right).$$

De (4.87), nous déduisons que

$$\|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_h, \tilde{p} - p_h\|_{\gamma_h}^2 \leq \frac{C\mathcal{R}e h^2}{\gamma_h} \left(\mathfrak{R} \|\mathbf{u}\|_{H^2}^2 + \frac{\gamma_h^2}{\mathcal{R}e} \|p\|_{H^1}^2 + \gamma_h \|p\|_{H^1}^2 \right).$$

Ainsi, nous avons l'estimation souhaitée

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h, p - p_h\|_{\gamma_h}^2 \leq C \left(\frac{h^2}{\gamma_h} \|\mathbf{u}\|_{H^2}^2 + h^2 \gamma_h \|p\|_{H^1}^2 + \mathcal{R}e h^2 \|p\|_{H^1}^2 + \frac{\gamma_h^2}{\mathcal{R}e} \|p\|_{L^2}^2 \right).$$

Nous procédons de manière similaire pour l'estimation L^2 , en bornant $\|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}$ en utilisant la proposition 4.3.4 et l'estimation de l'erreur (4.89), et en bornant $\|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}\|_{L^2}$ par $\sqrt{\mathcal{R}e} \|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}, \tilde{p} - p\|_{\gamma_h}$ et en utilisant (4.81). \square

Remarque 4.3.2. Notons que les équations (4.100)-(4.101) donnent un résultat de convergence seulement si $\gamma_h \rightarrow 0$. Les termes principaux dans (4.101) suggèrent de prendre $\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2} h$, ce qui donnerait un ordre 1 pour la norme L^2 , est cohérent avec les résultats des simulations numériques présentées dans la section 4.5.

Remarque 4.3.3. Nous pouvons avoir besoin de résultats d'approximation pour la norme H^s , pour $0 < s < 1$. Il existe une constante C dépendant de Ω et de $\mathcal{R}e$, mais pas de h , telle que

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{H^s}^2 \leq C \left(\frac{h^{4-2s}}{\gamma_h^{2-s}} (\|\mathbf{u}\|_{H^2}^2 + \|p\|_{H^1}^2) + \gamma_h^2 \|p\|_{L^2}^2 \right). \quad (4.102)$$

On l'obtient en utilisant la même décomposition que précédemment, avec (4.99).

Terminons cette section par un résultat de stabilité.

Proposition 4.3.5. Soit (\mathbf{u}, p) dans $\mathbf{X} \times Q$ tel que $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. Introduisons $(\mathbf{u}_h, p_h) = \mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{\mathbf{X}_h, Q_h}(\mathbf{u}, p)$. Il existe C indépendant de \mathbf{u} et p tel que

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{H^1} \leq C (\|\mathbf{u}\|_{H^1} + \|p\|_{L^2}). \quad (4.103)$$

Démonstration. D'après la définition de (\mathbf{u}_h, p_h) et du fait que $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, on déduit que

$$a_{\gamma_h}((\mathbf{u}_h, p_h), (\mathbf{u}_h, p_h)) = a_0((\mathbf{u}, p), (\mathbf{u}_h, p_h)) = \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\mathbf{u}, \mathbf{u}_h) + b(\mathbf{u}_h, p).$$

D'après la coercivité de a_{γ_h} et la continuité de a et b , nous déduisons que

$$\frac{\alpha}{\mathcal{R}e} \|\mathbf{u}_h\|_{H^1}^2 \leq C \|\mathbf{u}_h\|_{H^1} (\|\mathbf{u}\|_{H^1} + \|p\|_{L^2}).$$

En utilisant l'inégalité triangulaire, on obtient

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{H^1} \leq \|\mathbf{u}\|_{H^1} + \|\mathbf{u}_h\|_{H^1} \leq C (\|\mathbf{u}\|_{H^1} + \|p\|_{L^2}).$$

□

4.4. Nouvelle estimation d'erreur

Soit $0 < \sigma < 1$ (proche de 0) et définissons $\tilde{\theta}_h^n = C_h \theta^n$. On définit $(\tilde{\mathbf{u}}_h^n, \tilde{p}_h^n) = \mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{\mathbf{X}_h, Q_h}(\mathbf{u}^n, p^n)$, c'est-à-dire : pour tout $\mathbf{v}_h \in X_h$ et pour tout $q_h \in Q_h$,

$$\frac{1}{\mathcal{R}e} a(\tilde{\mathbf{u}}_h^n, \mathbf{v}_h) + b(\mathbf{v}_h, \tilde{p}_h^n) - b(\tilde{\mathbf{u}}_h^n, q_h) + \gamma_h(\tilde{p}_h^n, q_h) = \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\mathbf{u}^n, \mathbf{v}_h) + b(\mathbf{v}_h, p^n) - b(\mathbf{u}^n, q_h).$$

Les propriétés d'approximation de cet opérateur viennent d'être détaillées dans la section 4.3. Les erreurs sont décomposées comme :

$$\begin{aligned} e_u^n &= \mathbf{u}^n - \mathbf{u}_h^n = (\mathbf{u}^n - \tilde{\mathbf{u}}_h^n) - (\mathbf{u}_h^n - \tilde{\mathbf{u}}_h^n) = \eta_u^n - \varphi_u^n, \\ e_p^n &= p^n - p_h^n = (p^n - \tilde{p}_h^n) - (p_h^n - \tilde{p}_h^n) = \eta_p^n - \varphi_p^n, \\ e_\theta^n &= \theta^n - \theta_h^n = (\theta^n - \tilde{\theta}_h^n) - (\theta_h^n - \tilde{\theta}_h^n) = \eta_\theta^n - \varphi_\theta^n. \end{aligned}$$

Théorème 4.4.1. Soit (\mathbf{u}, p, θ) la solution de (4.1)-(4.2)-(4.3) telle que les hypothèses 4.1.1 et 4.1.3 soient satisfaites. Soit $0 < \sigma < 1$ un nombre réel petit. Alors les estimations d'erreur

suivantes sont valables pour tout $n \leq N_f$:

$$\begin{aligned}
 \|\varphi_u^n\|_0^2 + \|\varphi_\theta^n\|_0^2 &\leq C \left(\delta t^2 \|\partial_{tt} \mathbf{u}\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \delta t^2 \|\partial_{tt} \theta\|_{L^\infty(L^2)}^2 + h^{2s_\theta} \|\theta\|_{L^\infty(H^{1+s_\theta})}^2 \right. \\
 &+ h^{2s_\theta} \|\partial_t \theta\|_{L^\infty(H^{s_\theta})}^2 + \frac{h^{4-2\sigma}}{\gamma_h^{2-\sigma}} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^2 + \frac{h^{4-\sigma}}{\gamma_h^{2-\sigma}} \|p\|_{L^\infty(H^1)}^2 \\
 &+ \gamma_h^2 \|p\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \frac{h^4}{\gamma_h^2} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^4 + \frac{h^4}{\gamma_h^2} \|p\|_{L^\infty(H^1)}^4 \\
 &\left. + \gamma_h^4 \|p\|_{L^\infty(L^2)}^4 + \frac{h^4}{\gamma_h^2} \|\partial_t \mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^2 + \frac{h^4}{\gamma_h^2} \|\partial_t p\|_{L^\infty(H^1)}^2 + \gamma_h^2 \|\partial_t p\|_{L^\infty(L^2)}^2 \right) \quad (4.104)
 \end{aligned}$$

Démonstration. Nous sommes maintenant en mesure de prouver le théorème 4.4.1, en utilisant l'opérateur $\mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{X_h, Q_h}$ défini précédemment. Grâce à la définition de φ_p^{n+1} , φ_u^{n+1} , η_p^{n+1} , η_u^{n+1} , en additionnant (4.20)-(4.22) et en soustrayant (4.26)-(4.27) avec les fonctions de test correspondantes φ_p^{n+1} , φ_u^{n+1} , on obtient :

$$\begin{aligned}
 (\delta_t \varphi_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) &+ \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\varphi_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + \gamma_h(\varphi_p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) \\
 &= (\delta_t \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + b(\varphi_u^{n+1}, \eta_p^{n+1}) \\
 &+ c(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - c(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{u}_h^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - \frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{R}e^2 \mathcal{P}r} (e_\theta^{n+1} \mathbf{e}_y, \varphi_u^{n+1}) \\
 &+ (R_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - b(\eta_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) + \gamma_h(\eta_p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) - \gamma_h(p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) \\
 &= (\delta_t \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + a_{\gamma_h}((\eta_u^{n+1}, \eta_p^{n+1}), (\varphi_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1})) \\
 &+ c(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - c(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{u}_h^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - \frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{R}e^2 \mathcal{P}r} (e_\theta^{n+1} \mathbf{e}_y, \varphi_u^{n+1}) \\
 &+ (R_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - \gamma_h(p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) \quad (4.105)
 \end{aligned}$$

Grâce à la définition de $\tilde{\mathbf{u}}_h^{n+1}$ et \tilde{p}_h^{n+1} , on obtient

$$\begin{aligned}
 &a_{\gamma_h}((\eta_u^{n+1}, \eta_p^{n+1}), (\varphi_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1})) - \gamma_h(p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) \\
 &= a_0((\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}), (\varphi_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1})) - a_{\gamma_h}((\tilde{\mathbf{u}}_h^{n+1}, \tilde{p}_h^{n+1}), (\varphi_u^{n+1}, \varphi_p^{n+1})) = 0.
 \end{aligned}$$

Ainsi, (4.105) donne

$$\begin{aligned}
 (\delta_t \varphi_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) &+ \frac{1}{\mathcal{R}e} a(\varphi_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + \gamma_h(\varphi_p^{n+1}, \varphi_p^{n+1}) \\
 &= (\delta_t \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + (R_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - \frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{R}e^2 \mathcal{P}r} (e_\theta^{n+1} \mathbf{e}_y, \varphi_u^{n+1}) \\
 &+ c(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - c(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{u}_h^{n+1}, \varphi_u^{n+1}). \quad (4.106)
 \end{aligned}$$

Le membre de gauche de (4.106) est minoré par

$$\frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1} - \varphi_u^n\|_{L^2}^2) + \frac{\alpha}{\mathcal{R}e} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \gamma_h \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2$$

Il nous reste donc le membre de droite à majorer. En utilisant l'inégalité de Young, nous obtenons

$$|(\delta_t \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| \leq \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2} \leq \frac{1}{2} \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 \quad (4.107)$$

$$|(R_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| \leq \|R_u^{n+1}\|_{L^2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2} \leq \frac{1}{2} \|R_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2, \quad (4.108)$$

où κ_u et κ_p sont des constantes positives, indépendantes de h , à choisir.

Le terme de Boussinesq est traité en utilisant la décomposition de e_θ^{n+1} :

$$\begin{aligned} |(e_\theta^{n+1} e_y, \varphi_u^{n+1})| &\leq \|e_\theta^{n+1}\|_{L^2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2} \leq (\|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2} + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}) \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2} \\ &\leq \frac{1}{2} \|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 \end{aligned} \quad (4.109)$$

Les termes trilineaires sont traités en utilisant

$$\begin{aligned} &c(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - c(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{u}_h^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) \\ &= c(\mathbf{u}^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + c(\eta_u^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) - c(\eta_u^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) \\ &- c(\varphi_u^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) + c(\varphi_u^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1}) \end{aligned} \quad (4.110)$$

Les trois premiers termes sont traités avec (4.14)-(4.15) et une inégalité de Young, pour $0 < \sigma < 1$, et les deux derniers sont traités avec (4.12) et l'inégalité de Young $xy \leq \frac{x^4}{4} + \frac{3y^{4/3}}{4}$:

$$\begin{aligned} |c(\mathbf{u}^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| &\leq C \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \\ &\leq \frac{C^2}{4\kappa_u} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1}^2 \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma}^2 + \kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2, \end{aligned} \quad (4.111)$$

$$\begin{aligned} |c(\eta_u^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| &\leq C \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \\ &\leq \frac{C^2}{4\kappa_u} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1}^2 \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma}^2 + \kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2, \end{aligned} \quad (4.112)$$

$$\begin{aligned} |c(\eta_u^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| &\leq C \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^2 \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \\ &\leq \frac{C^2}{4\kappa_u} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^4 + \kappa_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2, \end{aligned} \quad (4.113)$$

$$\begin{aligned} |c(\varphi_u^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| &\leq C \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^{1/2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^{1/2} \\ &\leq C \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^{3/2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^{1/2} \\ &\leq \frac{C^4}{4\kappa_u^3} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1}^4 \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{3\kappa_u}{4} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2, \end{aligned} \quad (4.114)$$

$$\begin{aligned} |c(\varphi_u^{n+1}, \eta_u^{n+1}, \varphi_u^{n+1})| &\leq C \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^{1/2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^{1/2} \\ &\leq C \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^{3/2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^{1/2} \\ &\leq \frac{C^4}{4\kappa_u^3} \mathcal{N}^4 \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{3\kappa_u}{4} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2. \end{aligned} \quad (4.115)$$

Notons que pour le dernier terme, nous avons utilisé (4.103) pour borner $\|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}$. La réunion de toutes ces estimations conduit à

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1} - \varphi_u^n\|_{L^2}^2) + \frac{\alpha}{\mathcal{R}e} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \gamma_h \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2 \\ & \leq \frac{1}{2} \|R_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\mathcal{R}e}{2\mathcal{R}e^2 \mathcal{P}r} \|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\mathcal{R}a}{2\mathcal{R}e^2 \mathcal{P}r} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 \end{aligned} \quad (4.116)$$

$$+ \frac{9\kappa_u}{2} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + C'_u \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{C^2}{4\kappa_u} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^4 + \frac{C^2}{2\kappa_u} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^1} \|\mathbf{u}^{n+1}\|_{H^\sigma}^2, \quad (4.117)$$

où $C'_u = 1 + \frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{R}e^2 \mathcal{P}r} + \frac{C^4}{2\kappa_u^3} \mathcal{N}^4$.

En choisissant $\kappa_u = \frac{\alpha}{9\mathcal{R}e}$, il existe C indépendant de h , tel que

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1} - \varphi_u^n\|_{L^2}^2) + \frac{\alpha}{2\mathcal{R}e} \|\varphi_u^{n+1}\|_{H^1}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\varphi_p^{n+1}\|_{L^2}^2 \\ & \leq C (\|R_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma}^2 + \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^4 \\ & \quad + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2). \end{aligned} \quad (4.118)$$

Nous procédons de manière similaire pour obtenir une estimation pour la température, basée sur les propriétés d'approximation de \mathcal{C}_h .

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_\theta^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_\theta^{n+1} - \varphi_\theta^n\|_{L^2}^2) + \frac{\bar{\alpha}K}{2\mathcal{R}e \mathcal{P}r} \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 \\ & \leq C (\|R_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\delta_t \eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\eta_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2). \end{aligned} \quad (4.119)$$

En additionnant les deux dernières estimations et en retirant quelques termes positifs du côté gauche, on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\delta t} (\|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_\theta^n\|_{L^2}^2) \\ & \leq C \left(\|R_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma}^2 + \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^4 \right. \\ & \quad \left. + \|R_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\delta_t \eta_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\eta_\theta^{n+1}\|_{H^1}^2 + \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 \right). \end{aligned} \quad (4.120)$$

Avant d'appliquer le lemme de Gronwall, nous voulons borner tous les termes du membre de droite (sauf les deux derniers), en utilisant les propriétés de $\mathcal{C}_h \theta$, $\tilde{\mathbf{u}}_h$, \tilde{p}_h . Nous remarquons d'abord que

$$\begin{aligned} \|R_u^{n+1}\|_{L^2} & \leq C\delta t \|\partial_{tt} \mathbf{u}\|_{L^\infty(L^2)}, & \|R_\theta^{n+1}\|_{L^2} & \leq C\delta t \|\partial_{tt} \theta\|_{L^\infty(L^2)}, \\ \|\eta_\theta^{n+1}\|_{L^2} & \leq \|\eta_\theta^{n+1}\|_{H^1} \leq Ch^{s_\theta} \|\theta\|_{L^\infty(H^{1+s_\theta})}, & \|\delta_t \eta_\theta^{n+1}\|_{L^2} & \leq Ch^{s_\theta} \|\partial_t \theta\|_{L^\infty(H^{s_\theta})}. \end{aligned}$$

Ensuite, en utilisant la linéarité de l'opérateur $\mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{X_h, Q_h}$ ainsi que les estimations (4.102) et

(4.100), nous déduisons que

$$\begin{aligned} \|\eta_u^{n+1}\|_{H^\sigma}^2 &\leq C \left(\frac{h^{4-2\sigma}}{\gamma_h^{2-\sigma}} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^2 + \frac{h^{4-\sigma}}{\gamma_h^{2-\sigma}} \|p\|_{L^\infty(H^1)}^2 + \gamma_h^2 \|p\|_{L^\infty(L^2)}^2 \right), \\ \|\eta_u^{n+1}\|_{H^1}^4 &\leq C \left(\frac{h^4}{\gamma_h^2} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^4 + \frac{h^4}{\gamma_h^2} \|p\|_{L^\infty(H^1)}^4 + \gamma_h^4 \|p\|_{L^\infty(L^2)}^4 \right), \\ \|\delta_t \eta_u^{n+1}\|_{L^2}^2 &\leq C \left(\frac{h^2}{\gamma_h} \|\delta_t \mathbf{u}^{n+1}\|_{H^2}^2 + \frac{h^2}{\gamma_h} \|\delta_t p^{n+1}\|_{H^1}^2 + \gamma_h^2 \|\delta_t p^{n+1}\|_{L^2}^2 \right), \\ &\leq C \left(\frac{h^2}{\gamma_h} \|\partial_t \mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^2 + \frac{h^2}{\gamma_h} \|\partial_t p\|_{L^\infty(H^1)}^2 + \gamma_h^2 \|\partial_t p\|_{L^\infty(L^2)}^2 \right). \end{aligned}$$

Grâce à ces estimations, nous introduisons la nouvelle quantité

$$\begin{aligned} E(\mathbf{u}, p, \theta, \delta t, h, \gamma) &:= \delta t^2 \|\partial_{tt} \mathbf{u}\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \delta t^2 \|\partial_{tt} \theta\|_{L^\infty(L^2)}^2 + h^{2s_\theta} \|\theta\|_{L^\infty(H^{1+s_\theta})}^2 \\ &+ h^{2s_\theta} \|\partial_t \theta\|_{L^\infty(H^{s_\theta})}^2 + \frac{h^{4-2\sigma}}{\gamma_h^{2-\sigma}} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^2 + \frac{h^{4-\sigma}}{\gamma_h^{2-\sigma}} \|p\|_{L^\infty(H^1)}^2 \\ &+ \gamma_h^2 \|p\|_{L^\infty(L^2)}^2 + \frac{h^4}{\gamma_h^2} \|\mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^4 + \frac{h^4}{\gamma_h^2} \|p\|_{L^\infty(H^1)}^4 \\ &+ \gamma_h^4 \|p\|_{L^\infty(L^2)}^4 + \frac{h^2}{\gamma_h} \|\partial_t \mathbf{u}\|_{L^\infty(H^2)}^2 + \frac{h^2}{\gamma_h} \|\partial_t p\|_{L^\infty(H^1)}^2 + \gamma_h^2 \|\partial_t p\|_{L^\infty(L^2)}^2, \end{aligned}$$

de sorte que (4.120) donne

$$\frac{1}{\delta t} (\|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_u^n\|_{L^2}^2 + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 - \|\varphi_\theta^n\|_{L^2}^2) \quad (4.121)$$

$$\leq C (E(\mathbf{u}, p, \theta, \delta t, h, \gamma) + \|\varphi_\theta^{n+1}\|_{L^2}^2 + \|\varphi_u^{n+1}\|_{L^2}^2). \quad (4.122)$$

Enfin, nous utilisons le lemme de Gronwall discret, et nous obtenons l'estimation souhaitée, à condition de choisir \mathbf{u}_h^0 et θ_h^0 tels que φ_u^0 et $\varphi_\theta^0 = 0$.

□

Pour obtenir un résultat de convergence, nous avons besoin du corollaire découlant de ce résultat.

Corollaire 4.4.1. *Sous les hypothèses du théorème 4.4.1, l'estimation d'erreur suivante est définie, pour $h^2 < \gamma_h < 1$:*

$$\|e_u^n\|_0^2 + \|e_\theta^n\|_0^2 \leq C \left(\delta t^2 + h^{2s_\theta} + \frac{h^{4-2\sigma}}{\gamma_h^{2-\sigma}} + \gamma_h^2 \right) M_2(\mathbf{u}, p, \theta). \quad (4.123)$$

Démonstration. En utilisant l'inégalité triangulaire, on obtient

$$\|e_u^n\|_0^2 + \|e_\theta^n\|_0^2 \leq 2\|\varphi_u^n\|_0^2 + 2\|\varphi_\theta^n\|_0^2 + 2\|\eta_u^n\|_0^2 + 2\|\eta_\theta^n\|_0^2.$$

Les deux premiers termes correspondent au membre de gauche de (4.104), de sorte que

$$\|\varphi_u^n\|_0^2 + \|\varphi_\theta^n\|_0^2 \leq \left(\delta t^2 + h^{2s_\theta} + \frac{h^{4-2\sigma}}{\gamma_h^{2-\sigma}} + \gamma_h^2 \right) M_2(\mathbf{u}, p, \theta).$$

Pour les deux derniers termes, nous utilisons les propriétés de \mathcal{C}_h et de $\tilde{\mathbf{u}}_h$, voir (4.23) et (4.101)

$$\begin{aligned} \|\eta_u^n\|_0^2 = \|\mathbf{u}^n - \tilde{\mathbf{u}}_h^n\|_0^2 &\leq C \left(\frac{h^4}{\gamma_h^2} \|\mathbf{u}^n\|_{H^2}^2 + \frac{h^4}{\gamma_h} \|p^n\|_{H^1}^2 + \gamma_h^2 \|p^n\|_{L^2}^2 \right) \\ &\leq C \left(\frac{h^4}{\gamma_h^2} + \frac{h^4}{\gamma_h} + \gamma_h^2 \right) M_2(\mathbf{u}, p, \theta), \\ \|\eta_\theta^n\|_0^2 = \|\theta^n - \mathcal{C}_h \theta^n\|_0^2 &\leq Ch^{2+2s_\theta} \|\theta^n\|_{H^{1+s_\theta}}^2 \leq Ch^{2+2p_\theta} M_2(\mathbf{u}, p, \theta). \end{aligned}$$

En raison des hypothèses sur γ_h , les derniers membres de droite sont bornés par le membre de droite de (4.123). \square

Remarque 4.4.1. *Le taux de convergence n'est pas limité par s_θ , nous pouvons donc fixer $s_\theta = 1$ (par exemple, $p_\theta = 1$ signifie que nous utilisons également des éléments P_1 pour θ). L'estimation devient alors*

$$\|\mathbf{e}_u^n\|_0^2 + \|\mathbf{e}_\theta^n\|_0^2 \leq C \left(\delta t^2 + h^2 + \frac{h^{4-2\sigma}}{\gamma_h^{2-\sigma}} + \gamma_h^2 \right) M_2(\mathbf{u}, p, \theta).$$

Si nous choisissons $\gamma_h = h$, alors nous obtenons

$$\|\mathbf{e}_u^n\|_0^2 + \|\mathbf{e}_\theta^n\|_0^2 \leq C (\delta t^2 + h^{2-\sigma}) M_2(\mathbf{u}, p, \theta)$$

et nous obtenons une précision presque du premier ordre en h , confirmée par nos résultats numériques, voir la section 4.5.

Remarque 4.4.2. *Dans le théorème 4.4.1 et son corollaire, la constante C dépend de σ et tend vers l'infini lorsque $\sigma \rightarrow 0$. Par conséquent, nous ne retrouvons pas l'ordre de convergence maximal, mais nous pouvons nous en approcher aussi près que souhaité.*

4.5. Résultats numériques

Dans cette section, nous présentons des résultats numériques pour illustrer les estimations théoriques. Il est utile de mentionner que nous avons effectué les tests sur des domaines qui ne sont pas de classe $C^{1,1}$. Nous commençons par illustrer (4.100) et (4.101) avant de porter notre attention sur le problème de convection naturelle. Nous présentons également le gain en coût de calcul permis par l'utilisation de l'élément linéaire au lieu des éléments standards de Taylor-Hood. Toutes les simulations sont effectuées à l'aide du logiciel libre FreeFem++ (Hecht, 2012; Hecht et al., 2007).

4.5.1. La projection modifiée $\mathbb{P}_{\gamma_h, 0}^{X_h, Q_h}$

Étant donné (\mathbf{u}, p) , nous calculons $(\tilde{\mathbf{u}}_h, \tilde{p}_h) \in X_h \times Q_h$ tel que

$$\forall (\mathbf{v}_h, q_h) \in X_h \times Q_h, \quad a_{\gamma_h}((\tilde{\mathbf{u}}_h, \tilde{p}_h), (\mathbf{v}_h, q_h)) = a_0((\mathbf{u}, p), (\mathbf{v}_h, q_h)). \quad (4.124)$$

Nous voulons illustrer les résultats du théorème 4.3.2. Les résultats pour les éléments P_1 - P_1 (c'est-à-dire $p_u = p_p = 1$) sont meilleurs que prévu. Par conséquent, nous avons également effectué des simulations en utilisant des éléments P_1 - P_0 , afin d'illustrer la précision de nos estimations d'erreur (4.100)-(4.101). Le choix de γ_h modifie les estimations et par conséquent l'ordre de convergence. Différentes valeurs de γ_h sont testées pour atteindre la meilleure estimation. Nous présentons quelques résultats numériques pour les valeurs suivantes de γ_h :

- $\gamma_h = 10^{-7}$, qui n'est pas censé donner lieu à une quelconque convergence, ni pour la vitesse ni pour la pression ;
- $\gamma_h = \mathcal{R}e^{1/3} h^{2/3}$, qui est le meilleur choix pour la convergence de la vitesse en norme H^1 : cela devrait donner une convergence d'ordre $2/3$ pour la vitesse (normes L^2 et H^1) et d'ordre $1/3$ pour la pression ;
- $\gamma_h = \mathcal{R}e^{1/2} h$, qui est le meilleur choix pour la convergence de la vitesse en norme L^2 : cela devrait donner une convergence pour la vitesse d'ordre 1 en L^2 , d'ordre $1/2$ en norme H^1 , mais aucune convergence pour la pression ;
- $\gamma_h = \mathcal{R}e h^2$, ce qui n'est pas censé donner une quelconque convergence, et même une explosion pour la pression.

4.5.1.1. Solution manufacturée (cas MP-Bur)

Nous nous concentrons d'abord sur la solution manufacturée par Burggraf, voir (Rakotondrandisa et al., 2020). Ce cas est un écoulement de recirculation indépendant du temps à l'intérieur d'une cavité carrée $[0, 1] \times [0, 1]$. Il est similaire à l'écoulement bien connu dans une cavité entraînée, mais la singularité de la vitesse aux coins supérieurs de la cavité est évitée. La solution exacte de l'écoulement est :

$$\begin{aligned} u_1(x, y) &= \chi g'(x) h'(y), \\ u_2(x, y) &= -\chi g''(x) h(y), \\ p(x, y) &= \tilde{p}(x, y) - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \tilde{p}(x, y), \end{aligned} \quad (4.125)$$

avec $\chi > 0$ un paramètre d'échelle et les fonctions \tilde{p} , g et h définies par :

$$\begin{aligned}\tilde{p}(x, y) &= \frac{\chi}{\mathcal{R}e} (h^{(3)}(y)g(x) + g''(x)h'(y)) + \frac{\chi^2}{2}g'(x)^2 (h(y)h''(y) - h'(y)^2) \quad (4.126) \\ g(x) &= \frac{x^5}{5} - \frac{x^4}{2} + \frac{x^3}{3}, \\ h(y) &= y^4 - y^2.\end{aligned}$$

Notons que la vitesse à la limite supérieure de la cavité est :

$$u_1(x, 1) = 2\chi(x^4 - 2x^3 + x^2), \quad u_2(x, 1) = 0, \quad (4.127)$$

qui assure la continuité de la vitesse aux coins ($\mathbf{u}(0, 1) = \mathbf{u}(1, 1) = 0$), puisque des parois non glissantes sont imposées pour les autres frontières : $\mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}(0, y) = \mathbf{u}(1, y) = 0$. Le nombre de Reynolds $\mathcal{R}e$ est pris égal à 1 et χ égal à 8.

Dans tous les tableaux, la colonne "taux" indique l'ordre de convergence calculé sur la base des erreurs calculées. Les cellules vides signifient que le solveur itératif n'a pas convergé.

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	4.42E-03		5.27E-02		2.32E-02		3.92E-03	
1/40	1.14E-03	1.95	3.63E-02	0.54	1.21E-02	0.94	1.01E-03	1.96
1/80	2.93E-04	1.96	2.44E-02	0.57	6.25E-03	0.96	2.58E-04	1.97
1/160	7.44E-05	1.98	1.61E-02	0.60	3.17E-03	0.98	6.55E-05	1.98
1/200	4.78E-05	1.98	1.40E-02	0.62	2.54E-03	0.99	4.21E-05	1.98

TABLE 4.1. – Cas MP-Bur : $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_1 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	2.09E+05		4.38E-01		5.01E-01		8.45E+00	
1/40	5.49E+04	1.93	2.97E-01	0.56	2.82E-01	0.83	8.91E+00	-0.08
1/80	1.41E+04	1.96	2.00E-01	0.57	1.56E-01	0.85	9.15E+00	-0.04
1/160	3.56E+03	1.98	1.32E-01	0.59	8.57E-02	0.86	9.27E+00	-0.02
1/200	2.29E+03	1.99	1.16E-01	0.61	7.08E-02	0.86	9.30E+00	-0.01

TABLE 4.2. – Cas MP-Bur : $\|\mathbf{p} - \mathbf{p}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_1 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	3.11E-01		3.57E-01		2.79E-01		2.85E-01	
1/40	1.59E-01	0.97	2.16E-01	0.72	1.41E-01	0.98	1.45E-01	0.97
1/80	8.09E-02	0.98	1.35E-01	0.68	7.09E-02	0.99	7.37E-02	0.98
1/160	4.08E-02	0.99	8.48E-02	0.67	3.55E-02	1.00	3.71E-02	0.99
1/200	3.27E-02	0.99	7.32E-02	0.66	2.84E-02	1.00	2.97E-02	0.99

TABLE 4.3. – Cas MP-Bur : $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{H^1}$ pour les éléments P_1 - P_1 .

Nous constatons, à partir des tableaux 4.1-4.2-4.3 que les éléments (P_1 - P_1) donnent le comportement attendu pour $\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$ et $\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$. Néanmoins, nous trouvons une meilleure performance que prévu pour $\gamma_h \sim 10^{-7}$ et $\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$. Cependant, le comportement prédit par la proposition 4.3.2 est retrouvé avec des éléments (P_1 - P_0), voir les tableaux 4.4-4.5-4.6.

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	1.52E-01		5.39E-02		2.88E-02		9.09E-02	
1/40	1.53E-01	-0.01	3.66E-02	0.56	1.45E-02	0.99	9.10E-02	0.00
1/80	1.53E-01	0.00	2.45E-02	0.58	7.30E-03	0.99	9.11E-02	0.00
1/160	1.53E-01	0.00	1.61E-02	0.60	3.67E-03	0.99	9.11E-02	0.00
1/200			1.40E-02	0.62	2.94E-03	1.00		

TABLE 4.4. – Cas MP-Bur : $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_0 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	1.27E+06		1.22E+00		3.06E+00		5.26E+01	
1/40	6.39E+05	0.99	9.76E-01	0.32	3.15E+00	-0.04	1.06E+02	-1.01
1/80	3.20E+05	1.00	7.72E-01	0.34	3.19E+00	-0.02	2.12E+02	-1.00
1/160	1.60E+05	1.00	6.09E-01	0.34	3.22E+00	-0.01	4.24E+02	-1.00
1/200			5.64E-01	0.34	3.22E+00	-0.01		

TABLE 4.5. – Cas MP-Bur : $\|\mathbf{p} - \mathbf{p}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_0 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	1.46E+00		3.60E-01		3.07E-01		9.04E-01	
1/40	1.47E+00	0.00	2.17E-01	0.73	1.58E-01	0.96	8.93E-01	0.02
1/80	1.47E+00	0.00	1.35E-01	0;69	8.04E-02	0.98	8.91E-01	0.00
1/160	1.46E+00	0.00	8.49E-02	0.67	4.05E-02	0.99	8.90E-01	0.00
1/200			7.32E-02	0.66	3.24E-02	0.99		

TABLE 4.6. – Cas MP-BUR : $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{H^1}$ pour les éléments P_1 - P_0 .

4.5.1.2. Convection naturelle dans un carré (cas MP-NC)

Le premier cas test MP-BUR est une validation académique, sur une solution régulière fabriquée. Nous évaluons également la précision de la projection de Stokes modifiée sur un cas plus réaliste.

Pour ce faire, nous considérons le problème classique de la cavité carrée différentiellement chauffée $[0, 1] \times [0, 1]$, remplie d'air, décrite par le système d'équations (4.1)-(4.3). La paroi gauche est maintenue à une température chaude constante $\theta_h = 0,5$ et la paroi droite est maintenue à une température froide constante $\theta_c = -0,5$. Les parois supérieure et inférieure sont adiabatiques. L'écoulement par convection naturelle est calculé pour le nombre de Rayleigh $\mathcal{R}a = 10^4$. Le nombre de Prandtl est fixé à $\mathcal{P}r = 0.71$ et le nombre de Reynolds à $\mathcal{R}e = \sqrt{\frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{P}r}}$.

Nous calculons une solution de référence avec les éléments finis (P_2 - P_1 - P_2) pour la vitesse, la pression et la température sur une grille fine fixe avec une taille de maille $h = 1/500$. γ_h est pris égal à 0 pour la solution de référence. Le système non linéaire (4.20)-(4.22) est résolu en utilisant un algorithme de Newton. L'état initial est constitué d'air immobile ($\mathbf{u} = 0$), avec une distribution linéaire de la température. Pour l'intégration temporelle, nous utilisons un schéma de Gear du second ordre (BDF2) et fixons $\delta t = h$. Il a été prouvé par Aldbaissy et al. (2018) que ce choix assure la convergence. Par conséquent, nous utilisons ce résultat comme solution de référence.

Les calculs sont effectués jusqu'à ce qu'un état stationnaire soit atteint. Ensuite, nous utilisons les (\mathbf{u}, p) calculés dans le membre de droite de (4.124). Les résultats sont similaires à ceux du cas MP-BUR et toujours en accord avec les estimations théoriques. Puisque les résultats sont similaires, nous présentons seulement l'erreur L^2 sur la vitesse et l'erreur L^2 sur la pression dans les tableaux 4.7-4.8 (P_1 - P_1) et les tableaux 4.9-4.10 (P_1 - P_0).

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	6.86E-03		4.19E-02		3.51E-02		6.31E-03	
1/40	1.72E-03	2.00	2.77E-02	0.59	1.86E-02	0.92	1.60E-03	1.98
1/80	4.28E-04	2.00	1.81E-02	0.62	9.56E-03	0.96	4.01E-04	2.00
1/160	1.07E-04	2.00	1.16E-02	0.64	4.85E-03	0.98	1.00E-04	2.00
1/320			7.42E-03	0.65	2.44E-03	0.99		

TABLE 4.7. – Cas MP-NC : $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_1 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	7.33E+00		6.94E-03		6.53E-03		1.43E-02	
1/40	2.31E+00	1.66	4.15E-03	0.74	3.50E-03	0.90	1.36E-02	0.08
1/80	1.25E+00	0.89	2.51E-03	0.73	1.84E-03	0.93	1.33E-02	0.03
1/160	1.25E+00	0.00	1.54E-03	0.71	9.58E-04	0.94	1.31E-02	0.01
1/320			9.49E-04	0.69	5.01E-04	0.93		

TABLE 4.8. – Cas MP-NC : $\|\mathbf{p} - \mathbf{p}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_1 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	1.35E-01		4.27E-02		3.71E-02		8.78E-02	
1/40	1.35E-01	0.00	2.80E-02	0.61	1.99E-02	0.90	8.78E-02	0.00
1/80	1.35E-01	0.00	1.81E-02	0.63	1.03E-02	0.95	8.78E-02	0.00
1/160	1.35E-01	0.00	1.16E-02	0.64	5.23E-03	0.97	8.78E-02	0.00
1/320			7.43E-03	0.65	2.64E-03	0.99		

TABLE 4.9. – Cas MP-NC : $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_0 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	7.49E+01		1.33E-02		1.49E-02		9.23E-02	
1/40	4.44E+01	0.75	1.05E-02	0.34	1.48E-02	0.00	1.88E-01	-1.03
1/80	3.58E+01	0.31	8.32E-03	0.33	1.53E-02	-0.05	3.79E-01	-1.01
1/160	1.43E+01	1.32	6.62E-03	0.33	1.58E-02	-0.04	7.59E-01	-1.00
1/320			5.26E-03	0.33	1.60E-02	-0.02		

TABLE 4.10. – Cas MP-NC : $\|\mathbf{p} - \mathbf{p}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_0 .

γ_1	γ_2	\bar{P}	$\bar{\theta}$	δP_0	$\delta\theta_0$	δU_0	α_p	α_u	α_t
0.1	0.1	0	1.0	0.1	1.0	1.0	0.05	0.4	0.1

TABLE 4.12. – Paramètres pour le cas NC–Nour (4.128).

Par conséquent, même si les éléments (P_1-P_1) donnent de meilleurs résultats que prévu, les résultats numériques sont conformes à nos estimations d’erreur. Ces estimations semblent être précises puisque les taux prédits sont observés pour les éléments (P_1-P_0) .

4.5.2. Convection naturelle en 2D

La convergence de notre opérateur étant évaluée, nous pouvons illustrer les propriétés de convergence pour le problème de convection naturelle. Notons que dans les simulations numériques, nous avons utilisé une discrétisation du second ordre en temps, ce qui n’améliore la précision que par rapport à δt . Le reste de l’estimation (4.123) est toujours valable.

Comme pour la projection modifiée, nous illustrons le corollaire 4.123 sur deux exemples. Le premier consiste en une solution fabriquée, voir Nourgaliev et al. (2016). Le second exemple est un cas physique de convection naturelle, comparé à la solution de référence décrite dans la section 4.5.1.1. Une deuxième validation est obtenue en comparant le profil vertical de vitesse au milieu du domaine ($y = 0.5$) au résultat obtenu par une méthode spectrale (Le Queré, 1991).

Termes dominants	γ_h	Ordre attendu
$\delta t, h^2, \frac{h^{4-\sigma}}{\gamma_h^{2-\sigma}}, \gamma_h^2$	10^{-7}	Stabilité
	$\mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$	Convergence avec un ordre 2/3
	$\mathcal{R}e^{1/2}h$	Convergence avec un ordre 1
	$\mathcal{R}e h^2$	Stabilité

TABLE 4.11. – Ordre de convergence attendu pour $\|u - u_h\|_{L^2}$ et $\|\theta - \theta_h\|_{L^2}$.

4.5.2.1. Solution manufacturée (cas NC–Nour)

Nous considérons d’abord la solution manufacturée dépendante du temps suggérée dans Nourgaliev et al. (2016) :

$$\begin{aligned}
 u_1(x, y, t) &= (\delta U_0 + \alpha_u \sin(t)) \cos(x + \gamma_1 t) \sin(y + \gamma_2 t), \\
 u_2(x, y, t) &= -(\delta U_0 + \alpha_u \sin(t)) \sin(x + \gamma_1 t) \cos(y + \gamma_2 t), \\
 \theta(x, y, t) &= \bar{\theta} + (\delta\theta_0 + \alpha_t \sin(t)) \cos(x + \gamma_1 t) \sin(y + \gamma_2 t), \\
 p(x, y, t) &= \bar{P} + (\delta P_0 + \alpha_p \sin(t)) \sin(x + \gamma_1 t) \cos(y + \gamma_2 t),
 \end{aligned} \tag{4.128}$$

Les valeurs des constantes sont reportées dans le tableau 4.12. Les termes sources correspon-

dants sont :

$$\begin{aligned}
 f_{u_1} &= \alpha_u \cos(t) \cos(a) \sin(b) - U_c \gamma_1 \sin(a) \sin(b) + U_c \gamma_2 \cos(a) \cos(b) & (4.129) \\
 &\quad - U_c u_1(x, y, t) \sin(a) \sin(b) + U_c u_2(x, y, t) \cos(a) \cos(b) + P_c \cos(a) \cos(b) \\
 &\quad + \frac{2}{\mathcal{R}e} u_1(x, y, t), \\
 f_{u_2} &= -\alpha_u \cos(t) \sin(a) \cos(b) - U_c \gamma_1 \cos(a) \cos(b) + U_c \gamma_2 \sin(a) \sin(b) \\
 &\quad - U_c u_1(x, y, t) \cos(a) \cos(b) + U_c u_2(x, y, t) \sin(a) \sin(b) - P_c \sin(a) \sin(b) \\
 &\quad + \frac{2}{\mathcal{R}e} u_2(x, y, t) - \frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{P}r \mathcal{R}e^2} T(x, y, t), \\
 f_\theta &= \alpha_t \cos(t) \cos(a) \sin(b) - \theta_c \gamma_1 \sin(a) \sin(b) + \theta_c \gamma_2 \cos(a) \cos(b) \\
 &\quad - \theta_c u_1(x, y, t) \sin(a) \sin(b) + \theta_c u_2(x, y, t) \cos(a) \cos(b) + \frac{2K}{\mathcal{R}e \mathcal{P}r} \theta_c \cos(a) \sin(b),
 \end{aligned}$$

where $a = (x + \gamma_1 t)$, $b = (y + \gamma_2 t)$ and $U_c = (\delta U_0 + \alpha_u \sin(t))$, $\theta_c = (\delta \theta_0 + \alpha_u \sin(t))$, $P_c = (\delta P_0 + \alpha_u \sin(t))$.

Nous voulons évaluer la précision de nos estimations par rapport à h . Comme nous utilisons un schéma du second ordre en temps, nous choisissons $\delta t \simeq h$. Les paramètres adimensionnels sont choisis pour simuler la convection de l'air, avec un nombre de Rayleigh $\mathcal{R}a = 10^6$, un nombre de Prandtl $\mathcal{P}r = 0.71$ et un nombre de Reynolds $\mathcal{R}e = \sqrt{\mathcal{R}a/\mathcal{P}r}$. Les erreurs sont calculées au temps final $t_f = \pi/2$.

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3} h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2} h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	8.79E-04		1.49E-02		1.71E-02		2.48E-02	
1/40	2.15E-04	2.03	9.89E-03	0.59	9.48E-03	0.85	8.31E-03	1.58
1/80	5.25E-05	2.03	6.48E-03	0.61	4.99E-03	0.93	2.22E-03	1.90
1/160	1.30E-05	2.01	4.19E-03	0.63	2.56E-03	0.96	5.64E-04	1.98
1/320			2.69E-03	0.64	1.30E-03	0.98	1.42E-04	1.99

TABLE 4.13. – Cas NC–Nour : $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_1 - P_1 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3} h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2} h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	1.38E-03		4.57E-03		5.25E-03		8.16E-03	
1/40	3.37E-04	2.03	2.41E-03	0.92	2.31E-03	1.19	2.03E-03	2.01
1/80	8.47E-05	1.99	1.47E-03	0.71	1.14E-03	1.02	5.31E-04	1.94
1/160	2.12E-05	2.00	9.34E-04	0.66	5.75E-04	0.99	1.35E-04	1.98
1/320			5.93E-04	0.65	2.88E-04	0.99	3.38E-05	2.00

TABLE 4.14. – Cas NC–Nour : $\|\theta - \theta_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_1 - P_1 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	1.51E+04		6.81E-03		8.07E-03		1.44E-02	
1/40	3.81E+03	1.99	4.71E-03	0.53	4.51E-03	0.84	3.96E-03	1.87
1/80	9.52E+02	2.00	2.81E-03	0.74	2.17E-03	1.06	1.09E-03	1.86
1/160	2.38E+02	2.00	1.70E-03	0.73	1.04E-03	1.06	5.27E-04	1.05
1/320			1.05E-03	0.70	5.11E-04	1.03	5.25E-04	0.01

TABLE 4.15. – Cas NC-Nour : $\|\mathbf{p} - \mathbf{p}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_1 - P_1 .

Comme l'estimation d'erreur de convection naturelle fait intervenir les estimations d'erreur de la projection modifiée, nous observons le même comportement que précédemment, c'est-à-dire que les éléments finis (P_1 - P_1) semblent donner un meilleur taux de convergence que prévu. Cependant, ces résultats sont en bon accord avec nos estimations. En particulier, les taux de convergence attendus sont observés pour la vitesse et la température pour $\gamma_h = \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$ et $\gamma_h = \mathcal{R}e^{1/2}h$ et le cas $\gamma_h = 10^{-7}$ pose des problèmes de calcul pour les petites valeurs de h .

4.5.2.2. Convection naturelle dans un carré (cas NC-Sq)

Nous nous intéressons maintenant à un cas physique. Nous considérons ici la solution de référence décrite dans la section 4.5.1.1. Nous résolvons numériquement les équations décrivant la convection naturelle classique avec un schéma d'éléments finis (P_1 - P_1 - P_1) et nous comparons nos résultats à cette solution de référence. Le nombre de Rayleigh est pris comme $\mathcal{R}a = 10^4$, le nombre de Prandtl $\mathcal{P}r = 0.71$ et le nombre de Reynolds est $\mathcal{R}e = \sqrt{\mathcal{R}a/\mathcal{P}r}$. Les résultats sont présentés dans les tableaux 4.16-4.17-4.18.

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	5.57E-03		1.15E-02		6.08E-03		5.28E-03	
1/40	1.39E-03	2.00	7.00E-03	0.71	2.34E-03	1.38	1.34E-03	1.98
1/80	3.47E-04	2.00	4.43E-03	0.66	1.08E-03	1.12	3.36E-04	1.99
1/160	8.68E-05	2.00	2.81E-03	0.66	5.30E-04	1.03	8.50E-05	1.98
1/320	3.23E-05	1.43	8.09E-04	1.80	2.65E-04	1.00	3.21E-05	1.40

TABLE 4.16. – Cas NC-Sq : $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_1 - P_1 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	4.33E-03		1.76E-02		8.86E-03		6.59E-03	
1/40	1.08E-03	2.01	1.04E-02	0.76	3.65E-03	1.28	1.67E-03	1.98
1/80	2.74E-04	1.97	6.42E-03	0.69	1.66E-03	1.14	4.24E-04	1.98
1/160	1.00E-04	1.45	4.06E-03	0.66	8.21E-04	1.01	1.41E-04	1.58
1/320	5.54E-05	0.86	1.20E-03	1.76	4.25E-04	0.95	6.70E-05	1.08

 TABLE 4.17. – Cas NC-Sq : $\|\theta - \theta_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_1 - P_1 .

h	$\gamma_h \sim 10^{-7}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h \sim \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	2.34E-02		7.73E-03		1.15E-02		1.46E-02	
1/40	2.17E-02	0.11	4.05E-03	0.93	7.22E-03	0.67	1.36E-02	0.10
1/80	2.10E-02	0.04	2.13E-03	0.93	4.32E-03	0.74	1.33E-02	0.04
1/160	2.08E-02	0.02	1.15E-03	0.89	2.51E-03	0.78	1.31E-02	0.01
1/320	2.07E-02	0.01	7.13E-04	0.69	1.46E-03	0.79	1.31E-02	0.01

 TABLE 4.18. – Cas NC-Sq : $\|\mathbf{p} - \mathbf{p}_h\|_{L^2}$ pour les éléments P_1 - P_1 - P_1 .

Une fois encore, les résultats sont en accord avec les résultats théoriques, même si le cas $\gamma_h = \mathcal{R}e h^2$ présente des résultats légèrement meilleurs que prévu.

Nous renforçons la validation de notre code en comparant l'état final avec un profil obtenu par un code spectral (Le Queré, 1991). Le profil vertical de vitesse v_{FE} est extrait au milieu du domaine ($y = 0.5$) et tracé dans la figure 4.1 pour la paire (P_1 - P_1) et les différentes valeurs de γ_h et comparé à la solution de référence v_{LQ} . La différence $\|v_{FE} - v_{LQ}\|_{L^2}$ est reportée dans le tableau 4.19.

h	$\gamma_h = 10^{-7}$		$\gamma_h = \mathcal{R}e^{1/3}h^{2/3}$		$\gamma_h = \mathcal{R}e^{1/2}h$		$\gamma_h = \mathcal{R}e h^2$	
	err	taux	err	taux	err	taux	err	taux
1/20	5.08E-03		7.76E-03		5.14E-03		4.85E-03	
1/40	6.01E-04	3.08	1.55E-03	2.32	6.32E-04	3.02	5.57E-04	3.12
1/80	7.09E-05	3.08	4.29E-04	1.85	8.30E-05	2.93	6.43E-05	3.11
1/160	7.36E-06	3.27	1.42E-04	1.60	1.09E-05	2.93	6.59E-06	3.29
1/320	7.34E-07	3.33	1.01E-05	3.82	1.24E-06	3.13	6.29E-07	3.39

 TABLE 4.19. – Cas NC-Sq : erreur sur le profil de vitesse vertical $\|v_{FE} - v_{LQ}\|_{L^2}$.

Les différences diminuent lorsque la résolution du maillage est augmentée. Notre comparaison avec le code spectral garantit que notre code donne une solution finale correcte. Les résultats numériques pour ces différents cas démontrent la validité du corollaire 4.123. Les

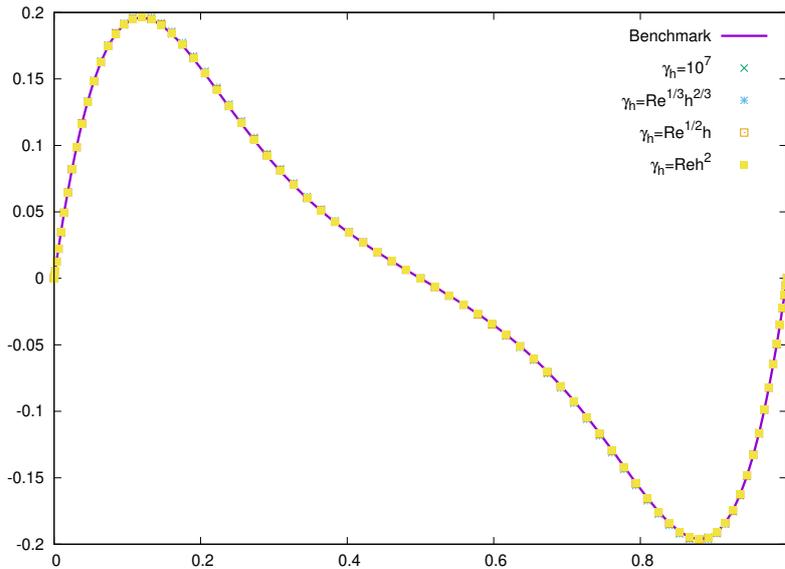


FIGURE 4.1. – Cas NC-Sq : profil de vitesse verticale à $y = 0.5$; comparaison avec les résultats de [Le Queré \(1991\)](#). La taille de la maille est $h = 1/80$.

résultats numériques confirment que le choix $\gamma_h = \mathcal{R}e^{1/3} h^{2/3}$ est approprié pour obtenir une convergence à la fois sur la vitesse et la pression, mais avec un taux non optimal de $2/3$ pour la vitesse. Si l'on s'intéresse uniquement à la précision de la vitesse, alors le choix $\gamma_h = \mathcal{R}e^{1/2} h$ donne le meilleur taux de convergence sur la vitesse, tout en perdant la convergence sur la pression. En résumé, ces deux choix ainsi que les éléments finis P_1 - P_1 sont adaptés à la simulation des problèmes de convection naturelle.

4.5.2.3. Convection naturelle de Rayleigh-Bénard dans un carré (cas NC-RB)

Enfin, nous démontrons le bon comportement des éléments finis d'ordre inférieur sur le modèle de Rayleigh-Bénard. Dans cette configuration, nous examinons une cavité carrée où une température est imposée en haut (température froide) et en bas (température chaude). Nous effectuons des simulations pour obtenir un état stable avec différentes valeurs du nombre de Rayleigh, et calculons le nombre de Nusselt (moyenné) au niveau de la paroi chaude de la manière suivante :

$$\mathcal{N}u = \int_0^1 (-\partial_y \theta)|_{y=0} dx.$$

Nous comparons nos résultats à ceux rapportés dans [Ouertatani et al. \(2008\)](#) (méthode de volumes finis) et [Deteix et al. \(2014\)](#) (méthode des éléments finis de Taylor-Hood avec schéma de prédiction) et présentons les résultats dans le tableau 4.20.

Ra	$\gamma_h = Re^{1/2}h$	$\gamma_h = Re^{1/3}h^{2/3}$	ref. Ouertatani et al. (2008)	ref. Deteix et al. (2014)
10^4	2.1591	2.1615	2.1581	2.1585
10^5	3.9167	3.9252	3.9103	3.9150
10^6	6.3059	6.2894	6.3092	6.3094

TABLE 4.20. – Cas NC–RB : nombre de Nusselt moyen au niveau de la paroi chaude pour différentes valeurs de Ra . Calculs (P_1 - P_1 - P_1) avec une résolution de maillage $h = 1/256$ (identique aux calculs de référence)..

Malgré l’ordre bas (P_1 - P_1 - P_1), nos résultats concordent bien avec les résultats publiés, obtenus avec la même résolution de maillage. La plus grande différence est observée pour $Ra = 10^5$ et est inférieure à 0.4%.

4.5.3. Coût de calcul

4.5.3.1. Convection naturelle 2D

Comme indiqué précédemment, le système non linéaire (4.20)-(4.21)-(4.22) est résolu à l’aide d’un algorithme de Newton. Le nombre d’itérations de Newton ne change pas lorsque l’on change l’ordre des polynômes. Ainsi, l’utilisation d’un solveur direct pour les systèmes linéaires concernés assure un gain de calcul pour les éléments linéaires par rapport aux éléments quadratiques. Toutefois, il convient de mentionner que l’utilisation d’un solveur itératif (par exemple GMRES comme dans nos simulations) permet de réduire le coût de calcul, même si les systèmes résultants sont plus mal conditionnés.

Nous comparons le temps de calcul entre les éléments finis (P_1 - P_1 - P_1) et (P_2 - P_1 - P_2) pour certains des cas testés précédemment. En parallèle, nous comparons le nombre de degrés de liberté pour les deux paires en fonction de la taille du maillage h . Comme nous observons des comportements similaires pour différentes valeurs de h , nous reportons dans le tableau 4.21 les valeurs pour $h = 1/160$. Le nombre de degrés de liberté pour les éléments (P_2 - P_1 - P_2) est environ trois fois celui des éléments (P_1 - P_1 - P_1).

γ_h	Case NC–Nour			Case NC–Sq		
	P_1 - P_1 - P_1	P_2 - P_1 - P_2	ratio	P_1 - P_1 - P_1	P_2 - P_1 - P_2	ratio
10^{-7}	40 683	8 641	0.21	84 282	16 607	0.20
$Re^{1/3}h^{2/3}$	2 465	8 371	3.40	3 432	12 438	3.62
$Re^{1/2}h$	2 419	8 424	3.48	4 499	12 714	2.83
$Re h^2$	2 470	8 575	3.47	13 951	14 591	1.05
ndof	103 684	335 044	3.23	103 684	335 044	3.23

TABLE 4.21. – CPU-time (s) pour les différents choix de γ_h , avec $h = 1/160$. Les colonnes ”ratio” contiennent le rapport entre le CPU-time pour le calcul $P_2 - P_1 - P_2$ et le temps CPU pour le calcul $P_1 - P_1 - P_1$.

Il est intéressant de noter que le choix de γ_h avec des éléments de Taylor-Hood (P_2-P_1) pour la vitesse et la pression, et P_2 pour la température n'affecte pas le temps de calcul, alors qu'il a un impact visible pour les calculs ($P_1-P_1-P_1$). Les choix $\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/3} h^{2/3}$ et $\gamma_h \sim \mathcal{R}e^{1/2} h$, pour lesquels nous avons prouvé la convergence du schéma, donnent les plus petits temps de calcul. Ces choix apportent également un gain notable par rapport aux calculs avec $P_2 - P_1$.

En conclusion de cette section, nous examinons le choix de γ_h lorsqu'il est utilisé avec les éléments finis de Taylor-Hood. En particulier, le choix $\gamma_h \simeq h$ entraîne une réduction de l'ordre de convergence attendu. Pour une sélection optimale de γ_h , il est possible d'établir des estimations d'erreur en contrepartie d'une régularité accrue de la solution, ou en évitant l'utilisation de la projection modifiée. Dans ce dernier cas, l'ordre de convergence sera limité par γ_h . Dans la Figure 4.2, nous présentons les erreurs calculées sur la vitesse pour le cas NC-NOUR en fonction du temps CPU nécessaire pour les calculs.

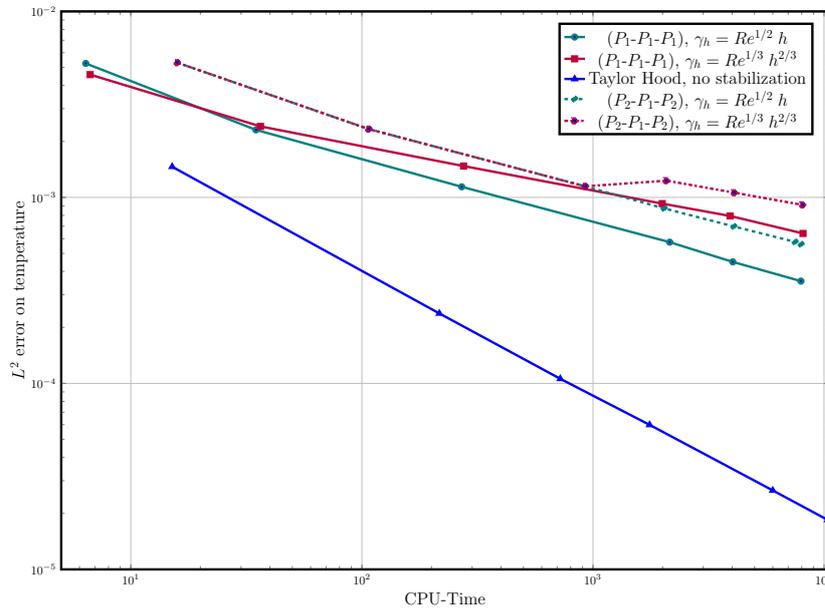


FIGURE 4.2. – Cas NC-NOUR : erreur L^2 sur la température en fonction du temps CPU.

Nous constatons que l'utilisation d'éléments finis d'ordre inférieur est équivalente à l'élément de Taylor-Hood avec le même terme de stabilisation. Pour plus de précision, nous fournissons également des résultats pour les calculs de Taylor-Hood sans stabilisation, qui présentent (comme prévu) un meilleur comportement en raison de leur ordre de précision supérieur. Cela est également dû à la discrétisation d'ordre deux en temps utilisée dans notre Toolbox. Avec un schéma d'ordre un, l'ordre de convergence des éléments de Taylor-Hood serait affecté, réduisant ainsi la précision globale.

4.5.3.2. Convection naturelle 3D

Nous considérons maintenant le même cas de convection naturelle de l'air décrit dans 4.5.1.2 et ajoutons la troisième dimension dans l'espace. Nous simulons donc la cavité cubique chauffée $[0, 1]^3$, remplie d'air. La température est fixée sur la surface de la paroi gauche

(chaude) et sur la surface de la paroi droite (froide). Toutes les autres surfaces latérales sont adiabatiques. Des parois sans glissement sont appliquées pour la vitesse sur toutes les surfaces de bord. Les simulations sont effectuées pour $\mathcal{Ra} = 10^4$ sur un maillage fixe et uniforme avec $h = 1/40$ pour les paires d'éléments finis $(P_1-P_1-P_1)$ et $(P_2-P_1-P_2)$. Le temps CPU pour différentes valeurs de γ_h est donné dans le tableau 4.22.

γ_h	$P_1-P_1-P_1$	$P_2-P_1-P_2$	ratio
10^{-7}	7 761	20 059	2.62
$\mathcal{Re}^{1/3}h^{2/3}$	5 476	17699	3.23
$\mathcal{Re}^{1/2}h$	5 713	17 964	3.14
$\mathcal{Re}h^2$	6 043	19 084	3.16
ndof	344 605	2 194 685	6.37

TABLE 4.22. – CPU-time (en seconde) pour la convection naturelle 3D.

Comme pour le cas 2D, nous observons une réduction non négligeable du temps de calcul, ce qui conforte l'utilisation d'éléments finis d'ordre inférieur.

4.6. Conclusion

L'introduction d'un nouvel opérateur de projection a permis d'établir une estimation d'erreur pour l'approximation du problème de convection naturelle avec des éléments linéaires. A l'aide de cet opérateur, associé à un choix optimal du paramètre de stabilisation γ_h , nous avons obtenu une précision d'ordre un en espace. Les estimations d'erreurs pour la projection et pour le problème de convection naturelle ont été validées à travers de nombreux exemples, ce qui indique que le taux de convergence déterminé théoriquement est optimal. De plus, le choix du paramètre de stabilisation peut se faire de deux manières. L'utilisation de $\gamma_h \sim \mathcal{Re}^{1/2}h$ améliore la convergence pour la vitesse, mais ne permet pas d'obtenir une convergence pour la pression. L'utilisation de $\gamma_h \sim \mathcal{Re}^{1/3}h^{2/3}$ réduit la précision de la vitesse mais assure une convergence lente de la pression. Ces deux choix permettent une réduction du temps de calcul par rapport à l'utilisation des éléments de Taylor-Hood (qui sont le standard pour les équations des fluides), ce qui rend le schéma proposé utilisable pour des applications, même pour des problèmes en 3D.

Des simulations préliminaires suggèrent que l'approximation par éléments finis d'ordre inférieur pourrait également être utilisée pour des applications plus complexes, comme la simulation de MCP. Ce résultat reste à prouver en utilisant des techniques similaires. Cependant, l'analyse de la convergence est plus complexe, en raison du changement de phase qui ajoute des termes non linéaires dans l'équation de l'énergie.

5. Simulation numérique du changement de phase avec coefficients variables

Dans le chapitre 2, nous avons présenté en détail le modèle mathématique pour les systèmes à changement de phase, ainsi que la méthode numérique employée pour le résoudre. Nous passons désormais à l'implémentation de notre approche.

Une première étape de validation a été réalisée dans le chapitre 3. Les résultats ont démontré la capacité de la méthode d'enthalpie à capturer de manière précise les phénomènes physiques associés au changement de phase d'un matériau à coefficients variables, en l'absence de convection, dans un domaine unidimensionnel. La méthode numérique que nous avons développée s'est également avérée très efficace pour résoudre ce type de problème.

Nous souhaitons à présent valider le modèle mathématique complet, qui modélise le changement de phase d'un matériau à coefficients variables, avec des effets de convection naturelle dans un domaine bidimensionnel, et confirmer les performances de la méthode numérique utilisée.

Le code est conçu pour traiter à la fois des coefficients variables et constants. Il semble donc judicieux de commencer par valider le code sur des cas présentant des coefficients constants. Pour ce faire, nous nous appuyons sur des cas de référence bien établis dans la littérature, en particulier sur ceux répertoriés par [Sadaka et al. \(2020\)](#). Nous simulons la fusion du n-octadécane dans différentes configurations, et nous comparons nos résultats numériques à des données expérimentales et à des résultats publiés afin d'évaluer la précision et l'exactitude de notre méthode.

Ce travail d'implémentation s'inscrit dans la continuité du travail réalisé au LMRS. La ToolBox présentée ci-dessous reprend la structure développée par [Sadaka et al. \(2020\)](#).

5.1. Paramètres numériques

5.1.1. Architecture des programmes

Nous avons adopté une architecture similaire à celle présentée par [Sadaka et al. \(2020\)](#). Nous avons suivi la même structure de fichiers et de dossiers. Toutefois, quelques modifications ont été apportées au fichier "param_phys.inc". Désormais, ce fichier définit les paramètres physiques spécifiques à chaque cas d'étude. Un nouveau fichier, appelé

”param_phys_commun.inc”, a été créé pour définir les paramètres physiques communs à tous les cas test. Cela permet d’organiser de manière plus claire les paramètres et de faciliter les modifications spécifiques à chaque cas.

Le fichier *param_phys.inc* est structuré en utilisant trois macros distinctes, permettant de choisir entre une résolution physique ou adimensionnée. Les données physiques requises pour la résolution sont définies spécifiquement pour l’une de ces configurations. Voici une description de ces trois modes :

- **FromPhysics** : cette macro permet de spécifier les données physiques du problème ainsi que les grandeurs utilisées pour l’adimensionnement,
- **Physics** : cette macro permet d’entrer les valeurs physiques spécifiques au problème,
- **Adim** : cette macro permet de définir les grandeurs adimensionnées utilisées dans le modèle.

Grâce à cette organisation, il est possible de choisir le mode de résolution approprié en fonction des besoins, en définissant les paramètres correspondants.

Le fichier *param_phys_commun.inc* contient les calculs et choix de paramètres physiques communs du problème :

- le calcul des différents paramètres adimensionnés à partir des paramètres physiques (\mathcal{Ra} , \mathcal{Re} , \mathcal{Pr} , \mathcal{St}) pour le cas FromPhysics,
- le calcul des paramètres définis dans le tableau 2.1 pour le cas Physics et FromPhysics/Adim.

Une description complète de l’architecture des programmes et des différents paramètres du code est présentée en annexe A.

5.1.2. Conditions initiales

Pour le processus de fusion, le MCP est initialement solide, fixé à une température froide T_c , inférieure à la température de fusion T_f . Cependant, en raison du fort gradient de température, il est numériquement compliqué d’augmenter brusquement la température sur une des parois à une température chaude T_h . Le processus de fusion est, en conséquence, initié de diverses manières dans la littérature. Une première approche habituelle consiste à mettre en place une couche fluide très mince à température isotherme au voisinage de la paroi chaude (voir (Dainaila et al., 2014; Belhamadia et al., 2004)). Une autre approche consiste à augmenter progressivement sur un petit intervalle de temps la température à la paroi chaude et le nombre de Rayleigh pour atteindre les valeurs souhaitées de T_h et \mathcal{Ra} (voir (Rakotondrandisa et al., 2020)).

Nous proposons une approche pour les configurations complexes (que nous appelons ”smooth”), pour lesquelles il n’existe pas de solution analytique. Elle se base sur l’approche habituelle, qui consiste à mettre en place une couche fluide très mince à température isotherme au voisinage de la paroi chaude. La mise en place de cette couche est faite en résolvant l’équation

suivante

$$-a_{smooth}\Delta T_{init} + T_{init} - T_c = 0 \quad (5.1)$$

$$T_{init}(p_{T_h}, t) = T_h \quad (5.2)$$

où a_{smooth} est un paramètre de lissage choisi numériquement. p_{T_h} désigne les coordonnées de la paroi chaude.

On résout cette équation par la méthode des éléments finis, la formulation variationnelle de l'équation (5.2) s'écrit : trouver $T_{init}^{n+1} \in V$ tel que

$$a_{smooth} (\nabla T_{init}, \nabla \Psi) + (T_{init}, \Psi) - (T_c, \Psi) = 0 \quad (5.3)$$

T_{init} est alors une fonction qui vaut T_c presque partout et monte graduellement sur une couche mince vers T_h .

La figure 5.1 illustre la distribution initiale de température dans un domaine cylindrique, avec une température chaude de 69.7° et une température froide de 25° pour un paramètre a_{smooth} de 10^{-9} . On observe la présence d'une fine couche de liquide, avec une température qui diminue graduellement jusqu'à atteindre la température froide. Cette configuration initie le processus de fusion et favorise une résolution numérique précise.

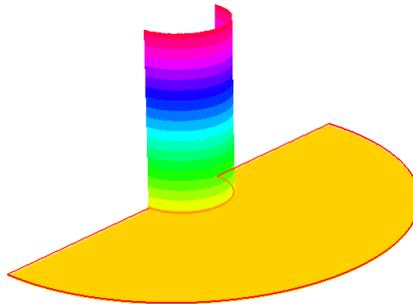


FIGURE 5.1. – Distribution de température initiale : méthode "smooth".

Nous proposons également une nouvelle approche de mise en place d'une fine couche fluide à température isotherme près de la paroi chaude pour les géométries rectangulaires. La température initiale est déterminée en utilisant la distribution de température analytique du problème de Stefan pour les cavités rectangulaires. En partant d'un MCP solide, le transfert de chaleur se produit d'abord par conduction. Ce mode de transfert de chaleur prévaut tant que la force visqueuse s'oppose au mouvement du fluide, ce qui entraîne la fusion du MCP de manière rectiligne par rapport à la paroi chaude. Au fur et à mesure que la quantité de MCP liquide augmente, la force de flottaison devient suffisamment importante pour surmonter la force visqueuse. La forme de l'interface solide-liquide change alors pour devenir courbe. Le

transfert de chaleur par convection prend alors le dessus sur la conduction. L'identification du début de la convection naturelle a été étudiée pour les MCP cylindrique par [Azad et al. \(2021\)](#) et il a été démontré que ce phénomène n'est pas dominant dans les premiers instants de fusion. De même, [Rakondrandisa \(2019\)](#) (chap 6.1.1) a mis en avant la forme verticale du front de fusion pour des temps petits, ce qui indique que le transfert de chaleur est dominé uniquement par la conduction. En utilisant la distribution de température analytique du problème de Stefan, nous reproduisons donc les comportements observés expérimentalement au début de la fusion.

De plus, le chapitre 3 a confirmé la concordance entre notre solution numérique et les solutions analytiques sur des problèmes de changement de phase sans convection. Ainsi, la température initiale est définie par :

$$T_{init} = \begin{cases} \frac{T_f - T_h}{\operatorname{erf}(\lambda)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_{st_l} t}}\right) + T_h, & x < s_i, \\ -\frac{T_c - T_f}{\operatorname{erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\alpha^*}}\right)} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_{st_s} t}}\right) + T_c, & x > s_i, \end{cases} \quad (5.4)$$

où s_i est la position d'interface initiale choisie et $\alpha_{st_l}, \alpha_{st_s}$ sont définis dans le tableau 3.1.

La figure 5.2 présente la distribution initiale de température dans un domaine rectangulaire de largeur $L = 0.05m$, avec une température chaude de 70° et une température froide de 25° . Nous comparons la distribution initiale calculée à partir de la solution analytique du problème de Stefan avec celle obtenue en utilisant notre méthode "smooth". Au-delà de $0.002m$, la température reste constante et égale à la température froide pour les deux cas, nous avons donc effectué un zoom sur la partie de la distribution de température qui présente les changements significatifs et qui nous intéresse particulièrement. Nous observons que pour obtenir une concordance avec la solution analytique du problème de Stefan en utilisant la méthode "smooth", nous devons sélectionner un paramètre a_{smooth} de 5×10^{-8} .

5.2. Validation pour les MCP à coefficients constants

Une première étape de validation a été réalisée en modélisant le problème de Stefan dans le chapitre 3. Nous validons désormais notre méthode numérique sur des cas tests bien établis dans la littérature, recensés par [Sadaka et al. \(2020\)](#), en modélisant la fusion de MCP à coefficient constants. Nous commençons la validation de notre modèle en simulant la fusion du MCP n-octadécane dans une cavité carrée chauffée de façon différentielle. Deux simulations sont réalisées pour démontrer la précision et la robustesse de notre méthode. Le premier cas de validation reproduit l'étude expérimentale de [Okada \(1984\)](#), et le deuxième considère les calculs numériques présentés dans [Bertrand et al. \(1999\)](#). Nous validons ensuite notre code en simulant la fusion d'un MCP dans une géométrie plus complexe, cylindrique avec des tubes intérieurs chauffés, comme dans [Luo et al. \(2015\)](#). Nous simulons trois configurations avec un, quatre et neuf tubes chauffants.

Les trois cas étudiés sont répertoriés de la façon suivante :

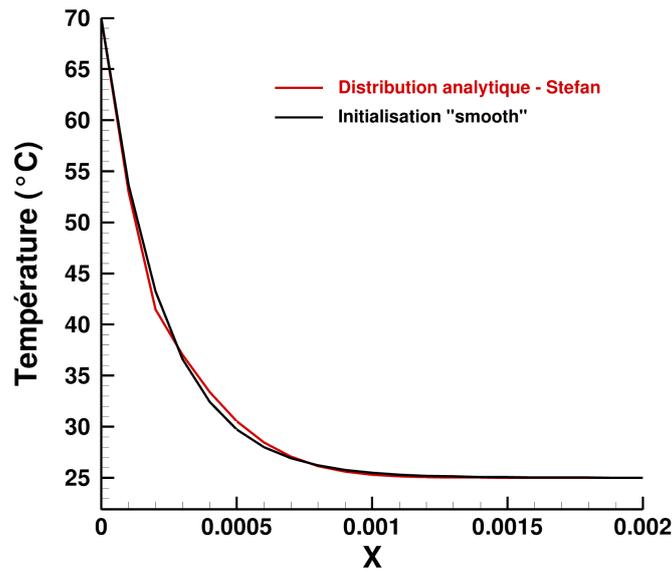


FIGURE 5.2. – Distribution de température initiale : solution analytique et méthode ”smooth”.

- Case MCP-Okada : Étude expérimentale par [Okada \(1984\)](#) de la fusion du MCP n-octadécane.
- Case MCP-Bertrand : Comparaison numérique avec diverses méthodes numériques, présentées par [Bertrand et al. \(1999\)](#), pour la fusion d’un MCP à haut \mathcal{Ra} .
- Case MCP-Luo : Simulation de la fusion d’un MCP cylindrique avec des tubes intérieurs chauffés, comme dans [Luo et al. \(2015\)](#).

5.2.1. Cas MCP-Okada

[Okada \(1984\)](#) a étudié expérimentalement la fusion d’un MCP n-octadécane dans une cavité carrée chauffée de dimensions $1,5 \text{ cm} \times 1,5 \text{ cm}$, initialement à la température solide $T_0 = 300.947K$. Des conditions aux limites de Dirichlet homogènes ($\mathbf{u} = 0$) sont imposées sur la vitesse sur l’ensemble de $\partial\Omega$. Les parois supérieures et inférieures sont adiabatiques, tandis que la paroi de gauche est maintenue à la température chaude $T_h = 306.3K$ et la paroi de droite à la températures froide $T_c = 300.947K$, inférieure à la température de fusion $T_f = 301$. Cette configuration de température a permis d’initier la fusion du matériau à partir de la paroi gauche. Numériquement, la fusion est initiée par une fine couche de fluide induite par le démarrage avec la solution analytique du problème de Stefan.

Les propriétés thermiques du MCP sont considérés constantes tout au long du processus de changement de phase ([Wang et al., 2010a](#); [Danaila et al., 2014](#); [Rakotondrandisa et al., 2020](#)). Ainsi, la chaleur spécifique c et la conductivité thermique k ont les mêmes valeurs dans le liquide et dans le solide. Les paramètres physiques du n-octadécane sont donnés dans le tableau 5.1.

MCP Propriétés	n-octadécane	
	Solide	Liquide
$k(W/mK)$	0.152	
$\rho(kg/m^3)$	774	774
$c(J/kgK)$	2180	2180
$\mu(Pas)$	-	3.9×10^{-3}
$\beta(K^{-1})$	-	8.5×10^{-4}
$h_{sl}(J/kg)$	244×10^3	
$T_f(K)$	301	

TABLE 5.1. – Paramètres physique du MCP n-octadécane (Okada, 1984).

Nous simulons la fusion du MCP dans les deux configurations suivantes : une configuration physique en utilisant les valeurs réelles des paramètres physiques et une configuration adimensionnée, où les grandeurs physiques sont adimensionnées par rapport à des grandeurs de référence appropriées. En effectuant la simulation de la fusion du MCP dans ces deux configurations, nous nous assurons que les résultats obtenus sont identiques, indépendamment de la configuration choisie. Les paramètres adimensionnés sont donnés dans le tableau 5.2. Ils ont été calculés à partir des paramètres physiques donnés dans le tableau 5.1 et des grandeurs caractéristiques suivantes : $L_{ref} = 0.015m$, soit la hauteur de la boîte, $T_{ref} = T_f$, soit la température de fusion et U_{ref} suit le premier choix d'échelle (2.30), donc $U_{ref} = 3.36 \times 10^{-4} m/s$, de sorte que $Re = 1$.

MCP Propriétés	Acide dodécanoïque Adimensionnés
Ra	3.27×10^5
Pr	56.2
Ste	0.045
V_{ref}	3.36×10^{-4}

TABLE 5.2. – Paramètres adimensionnés du MCP n-octadécane (Okada, 1984).

En utilisant la température de fusion comme référence, nous obtenons la température chaude adimensionnée $T_h = 1$ et la température froide adimensionnée $T_c = -0.01$. La transition de phase s'effectue à la température adimensionnée $T_f = 0$, correspondant à l'interface entre le liquide et le solide.

Les résultats numériques obtenus pour la résolution des équations dans les configurations physique et adimensionnée sont présentés dans la figure 5.3. Les données de référence dont nous disposons sont adimensionnées, nous représentons donc l'ensemble des résultats sur un même graphique dans un domaine adimensionné. Lors de l'enregistrement des données avec FreeFem++, les solutions physiques ont été adimensionnées en utilisant les grandeurs de références données précédemment.

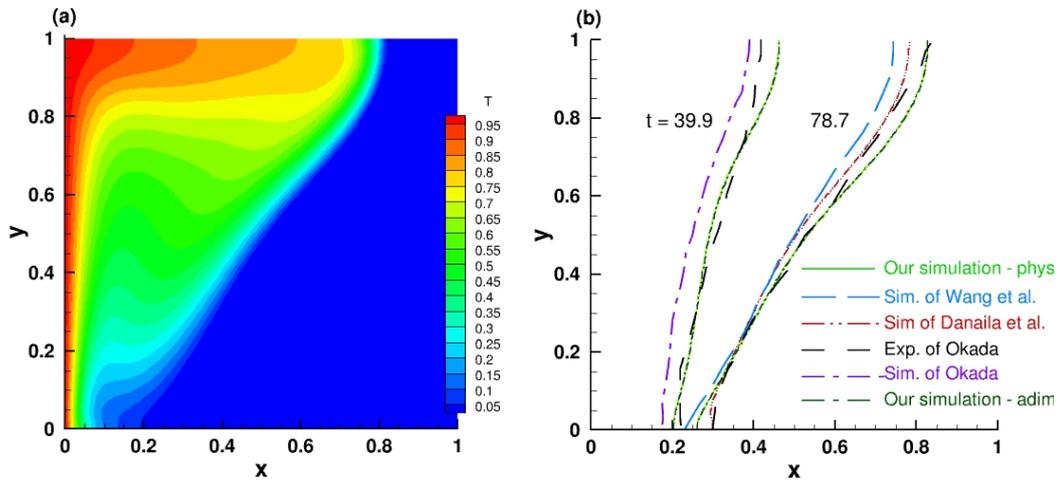


FIGURE 5.3. – Case MCP–Okada : (a) Isoligne de température à $t = 78.8$. (b) Localisation de l’interface. Comparaison avec les données expérimentales de Okada (1984) et les solutions numériques de Danaila et al. (2014) et Wang et al. (2010a) pour deux instants ($t = 39.9$ et 78.8).

Le panneau (a) de la figure montre la distribution de température du MCP à un temps adimensionné de $t = 78.8s$. La cavité chauffée à gauche entraîne la fusion du MCP, qui se propage de gauche à droite. Nous observons le transfert de chaleur par convection naturelle dans la phase liquide du MCP, ce qui se traduit par une forme courbe de l’interface de changement de phase.

Dans le panneau (b) de la figure, nous comparons les positions de l’interface solide-liquide aux instants particuliers $t = 39.9s$ et $t = 78.8s$ entre les configurations physique et adimensionnée, ainsi qu’avec les données expérimentales (Okada, 1984) et les résultats numériques publiés précédemment (Okada, 1984; Wang et al., 2010a; Danaila et al., 2014).

Nos résultats concordent avec les données expérimentales de Okada (1984). La position de l’interface solide-liquide est en bon accord avec les observations expérimentales, démontrant ainsi la capacité de notre modèle à reproduire les phénomènes physiques liés à la fusion d’un MCP avec convection. Nos résultats surestiment légèrement l’emplacement du front dans la partie supérieure de la cavité, cela peut être attribué à la perte de chaleur expérimentale mentionnée par l’auteur. De plus, la comparaison avec d’autres simulations réalisées par différentes méthodes confirme que nos résultats sont similaires à ceux obtenus par d’autres approches de modélisation.

Par ailleurs, nous constatons une superposition parfaite des positions de l’interface obtenues avec la résolution physique et adimensionnée. Cela démontre la capacité de notre code numérique à traiter efficacement ces deux configurations. Par conséquent, le modèle que nous avons développé peut être utilisé avec une configuration physique ou adimensionnée pour de futures simulations de changement de phase.

5.2.2. Cas MCP–Bertrand

Le deuxième cas de validation que nous considérons est la fusion d’un MCP pur de n-octadécane dans une cavité carrée avec une valeur élevée du nombre de Rayleigh, $\mathcal{Ra} = 10^8$. Cette valeur élevée du nombre de Rayleigh conduit à une convection naturelle plus intense dans l’écoulement du fluide. L’objectif de ce test est de déterminer si notre méthode numérique est capable de gérer efficacement cette convection naturelle intense et de capturer les phénomènes physiques complexes associés. Nous regardons notamment la position de l’interface solide-liquide et le nombre de Nusselt.

Pour cela, nous considérons une cavité bidimensionnelle carrée initialement remplie de n-octadécane solide à la température froide ($T_c = -0.01$). A $t = 0$, la température de la paroi gauche est augmentée à $T_h = 1$, tandis que l’autre paroi est maintenue à la température initiale froide T_c . Les autres parois sont considérées adiabatiques et sans glissement. Les paramètres du problème sont donnés dans le tableau 5.3.

Nous comparons nos résultats numériques à ceux obtenus par [Sadaka et al. \(2020\)](#) et ceux de [Bertrand et al. \(1999\)](#), qui compile les résultats de cinq auteurs différents (Lacroix, Le Quéré, Gobin-Vieira, Delannoy et Binnet-Lacroix). Nous effectuons donc une comparaison détaillée entre nos résultats numériques et ceux obtenus par ces auteurs.

MCP	Acide dodécanoïque
Propriétés	Adimensionnés
\mathcal{Ra}	10^8
\mathcal{Pr}	50
Ste	0.1

TABLE 5.3. – Paramètres adimensionnés du MCP [Bertrand et al. \(1999\)](#).

La figure 5.4 présente une comparaison de la position du front de fusion et de l’évolution temporelle du nombre de Nusselt \mathcal{Nu} à la paroi gauche ($x = 0$), avec les cinq simulations compilées dans [Bertrand et al. \(1999\)](#) et les résultats de simulations de [Sadaka et al. \(2020\)](#). Nous donnons la position de l’interface de changement de phase pour trois instants différents, à savoir $t = 1$, $t = 3$ et $t = 5$.

Lorsque nous utilisons notre nouveau code dans des situations impliquant des coefficients constants, il revoie des résultats identiques à ceux obtenus précédemment avec l’ancien code. En effet, comme observé sur ce cas test, nos résultats concordent avec ceux présentés dans l’article de référence [Sadaka et al. \(2020\)](#). De plus, l’étude de nos résultats de simulations montre que, tout comme avec l’ancien code, nos résultats sont en étroite correspondance avec ceux obtenus par Gobin-Vieira et Le Quéré. Les positions de l’interface et l’évolution temporelle du nombre de Nusselt dans notre modèle sont en accord avec leurs résultats. Toutes ces constatations renforcent la validité de notre approche.

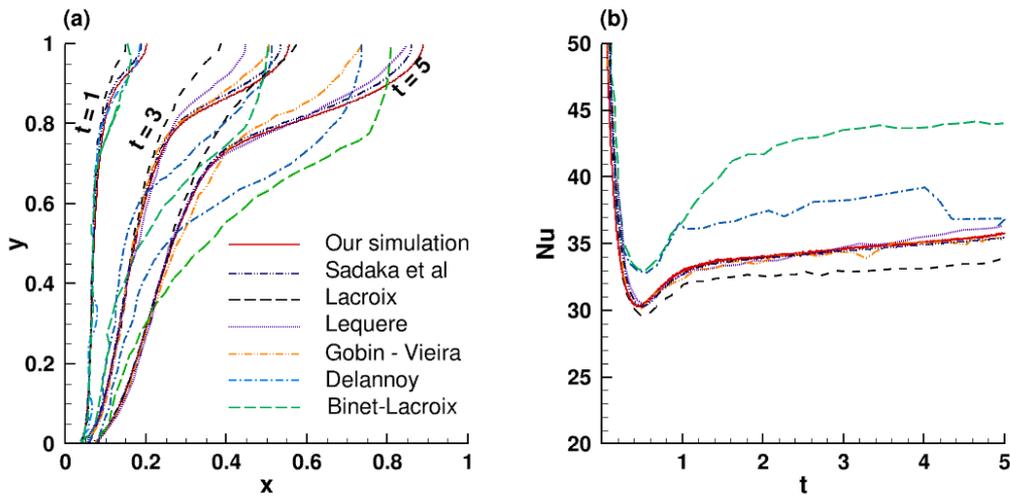


FIGURE 5.4. – Évolution temporelle de la position de l'interface à gauche et du Nusselt à la paroi gauche à droite. Comparaison avec les résultats numériques de [Bertrand et al. \(1999\)](#) et de [Sadaka et al. \(2020\)](#).

5.2.3. Cas MCP–Luo

On s'intéresse désormais à une géométrie plus complexe, suggérée par [Luo et al. \(2015\)](#). On considère un MCP cylindrique de rayon $R = 1$ avec des inclusions tubulaires de différentes dispositions. Trois configurations avec un, quatre et neuf tubes chauffés, sont simulées dans cette section. Des conditions aux limites de Dirichlet $u = 0$ sont imposées sur la vitesse sur l'ensemble de $\partial\Omega$. Une condition limite de Dirichlet $T_h = 1$ est appliquée aux tubes internes, et une condition limite de Neumann $\partial T/\partial n = 0$ est utilisée pour le tube extérieur. La taille des tubes est ajustée pour avoir la même surface de contact pour toutes les configurations. Le rayon R_i du tube interne est $R_i = R/4$ pour le cas avec un tube, $R_i = R/8$ pour le cas avec quatre tubes chauffés et $R_i = R/12$ pour le cas avec neuf tubes. Toutes les configurations sont symétriques par rapport à l'axe vertical, donc seule la moitié du domaine est simulée. A $t = 0$, le MCP est complètement solide avec une température isotherme $T_0 = -0.01$ inférieure à la température de fusion $T_f = 0$. Les chaleurs spécifiques des phases solide et liquide sont considérées constantes et égales, ainsi que les deux conductivités thermiques. Les paramètres du problème sont donnés dans le tableau 5.4.

MCP	Acide dodécanoïque
Propriétés	Adimensionnés
Ra	5×10^4
Pr	0.2
Ste	0.02

TABLE 5.4. – Paramètres adimensionnés du MCP ([Luo et al., 2015](#)).

La figure 5.5 présente le champ de température lié aux trois configurations pour des instants correspondant à la même fraction liquide de 80%. L'agencement des tubes intérieurs influence

directement le comportement du fluide. Plus le nombre de tubes augmente, plus l'intensité de la convection naturelle dans le MCP fondu augmente, entraînant des motifs complexes dans l'interface de fusion.

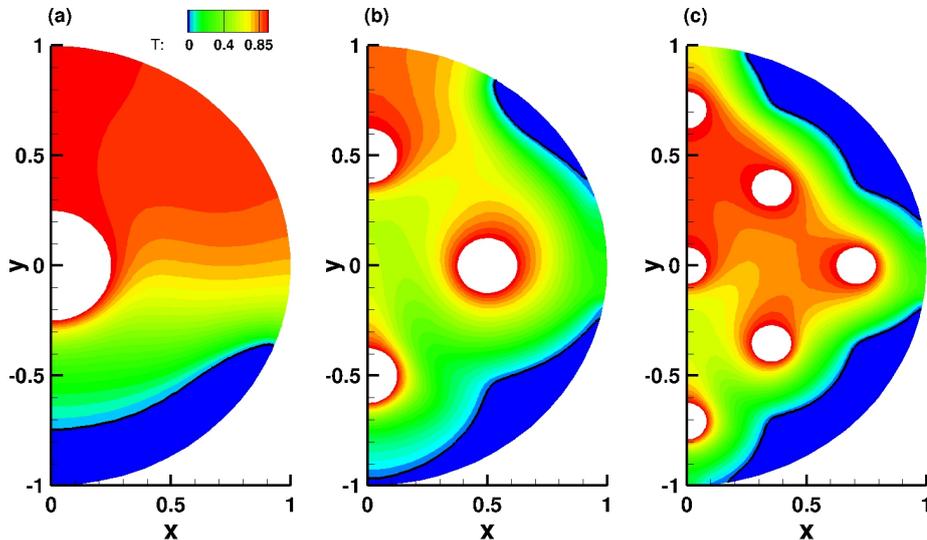


FIGURE 5.5. – Champs de température pour la fusion d'un MCP cylindrique avec des inclusions tubulaires. Les instants de temps correspondent à la même fraction de liquide ($L_f = 80\%$). Configurations avec (a) un tube ($t = 2,5$), (b) quatre tubes ($t = 0,99$) et (c) neuf tubes ($t = 0,4$).

Afin de confronter nos résultats à ceux rapportés par [Luo et al. \(2015\)](#), nous traçons dans la figure 5.6 l'évolution temporelle de la fraction liquide L_f pour les trois configurations. Nous constatons un bon accord entre nos résultats numériques et ceux publiés par [Luo et al. \(2015\)](#).

Ces résultats indiquent que notre méthode numérique est capable de reproduire l'évolution temporelle de la fraction liquide L_f de manière précise dans des configurations géométriques complexes. Cela confirme la validité de notre modèle et de notre approche pour simuler la fusion des MCP dans ces configurations.

5.3. Validation avec les expériences de Kamkari

Après avoir validé notre code sur des exemples de fusion de MCP à coefficients constants, nous nous intéressons désormais à la fusion de MCP à coefficient variables. Dans cette section, l'ensemble des simulations sont réalisées avec la configuration physique.

Nous nous penchons sur l'étude expérimentale menée par [Kamkari et al. \(2014\)](#), qui porte sur la fusion d'un MCP d'acide dodécanoïque pur à 99% dans une cavité rectangulaire dont les dimensions ont été fixées à 50 mm de largeur, 120 mm de hauteur et 120 mm de profondeur. La paroi droite de l'enceinte est maintenue à une température chaude constante grâce à un échangeur de chaleur. Dans le montage expérimental, la paroi droite est scellée avec une plaque d'aluminium hautement conductrice de 35 mm d'épaisseur dans laquelle circule de

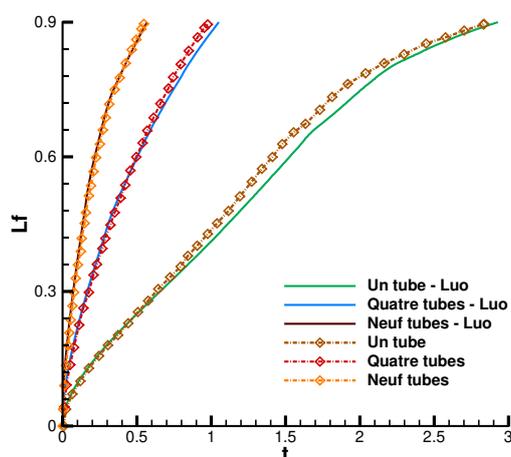


FIGURE 5.6. – Évolution temporelle de la fraction liquide pour un, quatre et neuf tubes chauffés. Comparaison avec les résultats numériques de Luo et al. (2015).

l'eau afin de maintenir des températures de paroi constantes. Les cinq autres parois de l'enceinte étaient constituées de feuilles de plexiglas transparent de 25 mm d'épaisseur, ce qui minimise la perte de chaleur de l'enceinte grâce à leur faible conductivité thermique.

Bien que la troisième dimension soit assez grande pour influencer les phénomènes physiques dans la cavité, nous utilisons un modèle numérique bidimensionnel. Ce choix est motivé par la volonté de comparer nos résultats avec ceux de la littérature, et donc de respecter les mêmes hypothèses de travail. Dans ce modèle, la paroi droite est maintenue à une température chaude, tandis que les trois autres parois de la cavité sont considérées comme adiabatiques. Cette simplification a été faite pour nous permettre de comparer nos résultats numériques aux données de la littérature existante. Les expériences ont été réalisées pour des angles d'inclinaisons de 90°, 45° et 0°C, en utilisant trois températures de paroi différentes de 70°, 60° et 55°C. Le MCP est initialement à une température uniforme de 25°C. Les propriétés thermophysiques de l'acide dodécanoïque utilisé sont énumérées dans le tableau 5.5.

MCP Propriétés	Acide dodécanoïque	
	Solide	Liquide
$k(W/mK)$	0.16	0.14
$\rho(kg/m^3)$	940	885
$c(J/kgK)$	2180	2390
$\nu(Pas)$	-	6.7×10^{-6}
$\beta(K^{-1})$	-	8×10^{-4}
$h_{sl}(J/kg)$	187.21×10^3	
$T_f(K)$	319 ± 2.35	

TABLE 5.5. – Paramètres physiques du MCP d'acide dodécanoïque (Kamkari et al., 2014).

Il a été démontré par Kamkari et al. (2014) qu'il n'y a pas de changements distincts dans la

forme de l'interface lorsque la température de la paroi chaude varie entre 55°, 60° et 70°.

Dans notre étude, nous nous concentrons donc spécifiquement sur l'enceinte chauffée à 70°, dans laquelle nous modélisons deux configurations différentes. La première enceinte est inclinée à un angle de 0°, tandis que la deuxième configuration est inclinée à un angle de 90°.

La température à la surface de l'échangeur de chaleur ne démarre pas dès le début de l'expérience à la température chaude T_h . La température augmente progressivement depuis la température ambiante du laboratoire (25°C) jusqu'à la température souhaitée. Cette phase de transition initiale dure 240 secondes pour un T_h de 70°C. Afin de tenir compte de ce décalage thermique dans nos simulations, nous utilisons une fonction de température T_h qui dépend du temps et qui est définie de la façon suivante :

$$T_h(t) = \begin{cases} T_{in} + \frac{T_h - T_{in}}{t_{in}} t & \text{si } t < t_{in}, \\ T_h & \text{si } t \geq t_{in}, \end{cases} \quad (5.5)$$

où $T_{in} = T_f + 1e - 2$ et $t_{in} = 240$, ce qui représente le temps nécessaire pour atteindre la température chaude souhaitée.

Pour ce cas test, la constante de Carman-Kozeny est prise selon les recommandations de [Kabbara et al. \(2016\)](#). En effet, il y est rapporté qu'un $C_{CK} = 10^8$ donne la plus grande ressemblance en terme de position d'interface avec les résultats expérimentaux publiés.

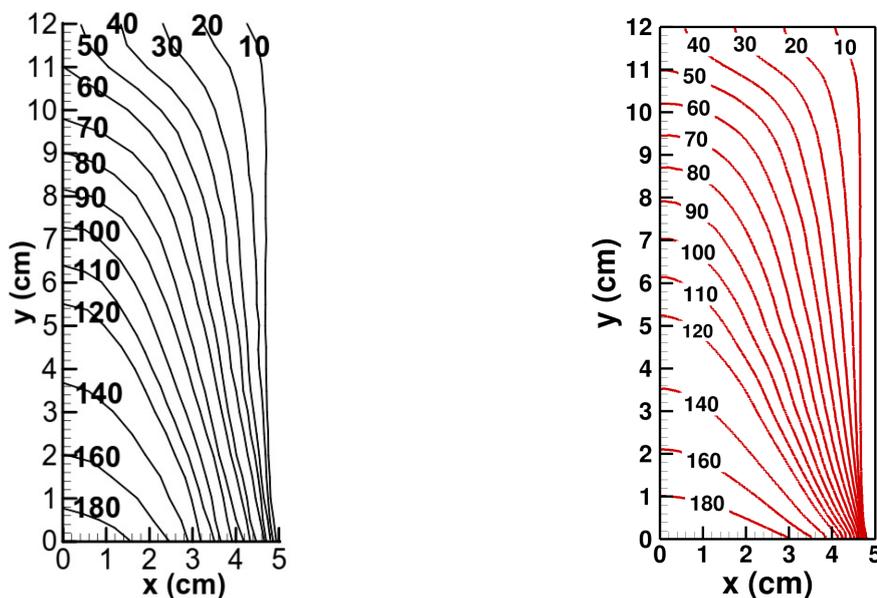


FIGURE 5.7. – Évolution temporelle de l'interface liquide solide, angle de 90° : résultats expérimentaux de [Kamkari et al. \(2014\)](#) à gauche et résultats numériques à droite.

Les figures 5.7 et 5.8 présentent l'évolution de l'interface solide-liquide à différents moments du processus de fusion, pour une température de paroi chaude de 70°C, pour les angles d'inclinaison de 90° et de 0°. Les sous-figures gauche correspondent aux résultats expérimentaux obtenus par [Kamkari et al. \(2014\)](#) et les sous-figures droites correspondent à nos résultats

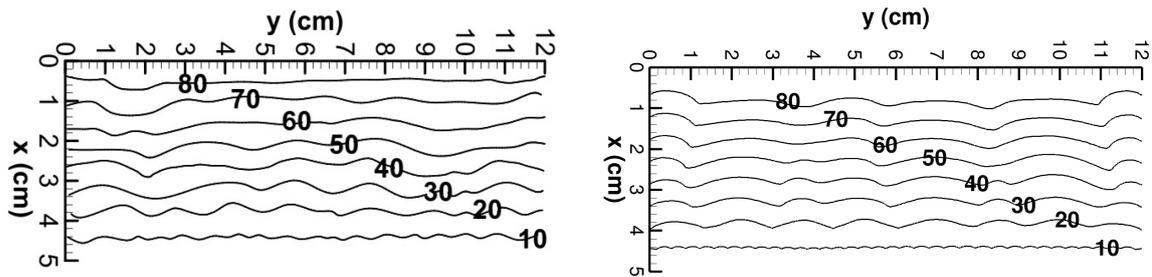


FIGURE 5.8. – Évolution temporelle de l'interface liquide solide, angle de 0° : résultats expérimentaux de Kamkari et al. (2014) à gauche et résultats numériques à droite.

numériques.

Au début de la fusion, dans la figure 5.7, l'interface solide-liquide est presque parallèle à la paroi chauffée, ce qui suggère que la conduction thermique est le principal mécanisme de transfert de chaleur. Au fil du temps, on observe l'apparition d'une courbure dans la forme de l'interface solide-liquide, ce qui indique l'émergence du flux de convection naturelle dans le MCP liquide. Dans la figure 5.8, on observe la formation de cellules de convection, marquées par un changement de la forme de l'interface, passant d'une ligne droite à une forme ondulée et irrégulière.

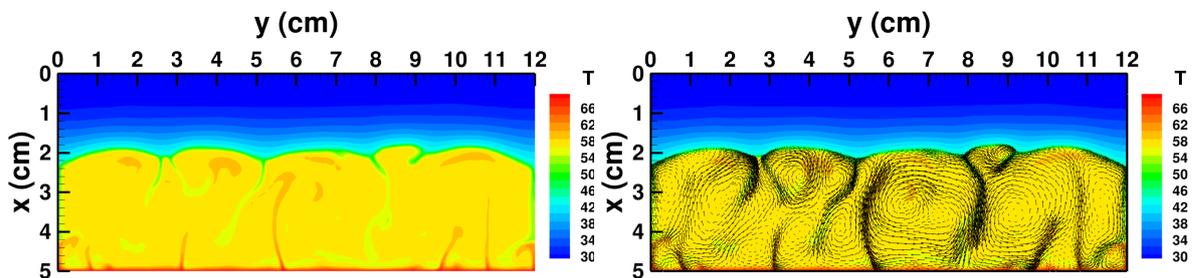


FIGURE 5.9. – Champs de température et de vitesse pour la fusion de l'acide dodécanoïque à 50min : angle de 0° .

Le champ de température et de vitesse présentés dans la figure 5.9 donne un aperçu de ces cellules de convection et de la dynamique complexe qui se produit dans ce MCP lors du chauffage par le bas.

Nos résultats numériques sont en accord avec ces observations expérimentales. Nous retrouvons les mêmes caractéristiques et comportements que ceux observés dans l'expérience. Nos résultats présentent une forme d'interface solide-liquide qualitativement similaire à celle relevées expérimentalement. Nous observons une légère différence au niveau du temps de fusion, mais cette différence peut être expliquée de différentes manières.

Tout d'abord, nous notons que notre modèle numérique ne prend pas en compte la présence du plexiglas dans l'expérience. Bien que l'expérience ait utilisé un matériau réduisant la perte de chaleur, une certaine quantité de chaleur est susceptible d'avoir été perdue par les parois.

Cette absence de modélisation peut conduire à une fusion plus rapide dans nos simulations. De plus, nous avons simplifié le système expérimental en un modèle bidimensionnel. Par conséquent, la profondeur, qui est aussi importante que la largeur, n'est pas prise en compte. Également, les conditions initiales pour nos simulations diffèrent légèrement de celles utilisées dans l'expérience. Ces différences peuvent contribuer à l'écart observé dans les temps de fusion. Enfin, des incertitudes de mesure ont été signalées dans les résultats expérimentaux, ce qui peut également contribuer à un écart de temps entre nos résultats numériques et les résultats expérimentaux.

Malgré ces différences de temps observées entre nos résultats numériques et les résultats expérimentaux, la forme de l'interface solide-liquide dans nos résultats numériques est en accord qualitatif avec les résultats expérimentaux. Cela confirme la capacité de notre modèle à capturer correctement les phénomènes physiques associés à la fusion du MCP à coefficients variables.

La fraction liquide totale du MCP, qui est directement liée à la quantité d'énergie latente stockée dans le système, fournit des informations précieuses sur le plan énergétique. En comparant l'évolution de la fraction de liquide totale du MCP au cours du temps avec les résultats expérimentaux, nous renforçons la validité de notre modèle. La figure 5.10 présente l'évolution temporelle des fractions liquides dans l'enceinte pour des angles d'inclinaison de 0° et 90° . En comparant nos simulations numériques (sous-figures droite) aux données expérimentales fournies par Kamkari et al. (2014) (sous-figures gauche), nous observons de bons accords entre les deux. Nous observons des tendances de courbes similaires avec un léger décalage temporel, ce qui est cohérent avec les résultats obtenus pour la position de l'interface. Cela confirme que notre modèle numérique est capable de reproduire avec précision le comportement de la fraction liquide dans le MCP.

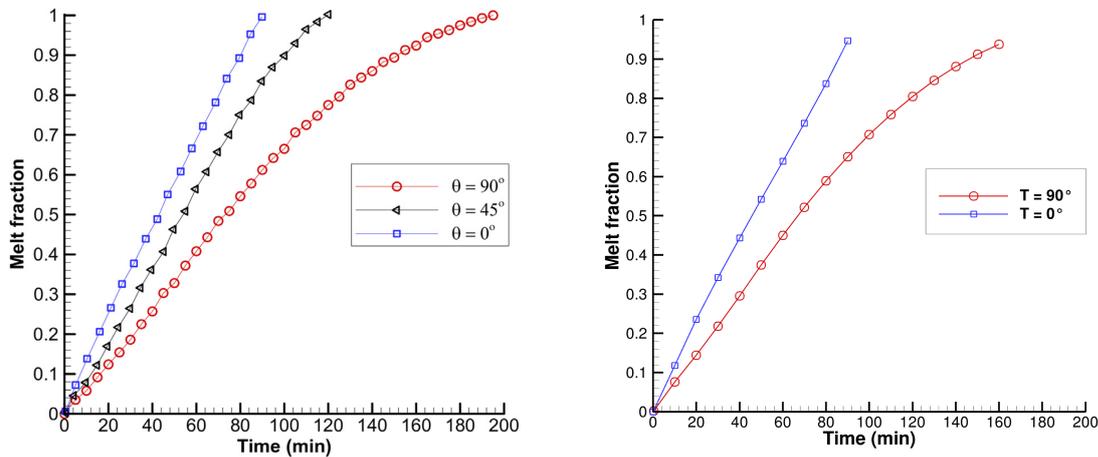


FIGURE 5.10. – Évolution temporelle de la fraction liquide : résultats expérimentaux de Kamkari et al. (2014) à gauche et résultats numériques à droite.

La comparaison des valeurs du nombre de Nusselt obtenues numériquement avec celles mesurées expérimentalement nous permet d'évaluer la capacité de notre modèle à représenter correctement les phénomènes de transfert de chaleur par convection. Cette validation renforce notre confiance dans l'exactitude de notre méthode et sa capacité à prédire les caractéristiques thermiques du système étudié.

Les résultats numériques, qui représentent l'évolution temporelle du nombre de Nusselt à la surface chauffée, calculé selon l'équation (5.6), sont comparés dans la figure 5.11 aux données expérimentales enregistrées par Kamkari et al. (2014) (sous-figure (a)).

$$Nu = \int_0^1 \left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{x=L} dy. \quad (5.6)$$

Dans les premiers stades du processus de fusion, où la conduction est le principal mode de transfert de chaleur, des nombres de Nusselt élevés sont observés expérimentalement. À la fin du régime de conduction, les nombres de Nusselt atteignent des valeurs minimales locales avant d'augmenter légèrement, témoignant ainsi de la formation de courants de convection dans le MCP liquide et de l'augmentation du taux de transfert de chaleur. Après une brève période de transition de la conduction à la convection, les nombres de Nusselt se stabilisent, reflétant ainsi la phase de fusion dominée par la convection. Nous observons ces mêmes caractéristiques numériquement. L'écart entre les résultats numériques et expérimentaux reste relativement faible tout au long de la simulation, ce qui renforce la validité de votre modèle. Cela suggère que notre simulation capture avec précision les phénomènes de convection et de transfert de chaleur qui influencent le nombre de Nusselt.

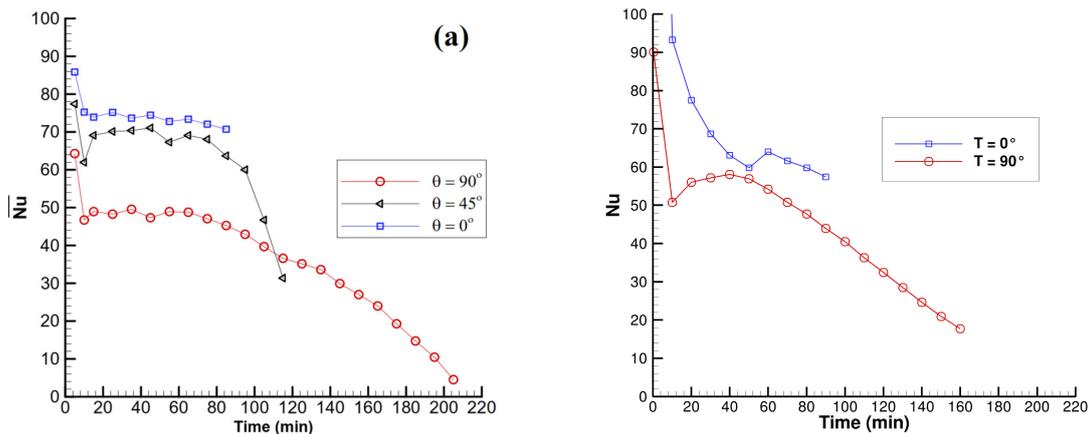


FIGURE 5.11. – Évolution temporelle du Nusselt sur la paroi chaude : résultats expérimentaux de Kamkari et al. (2014) à gauche et résultats numériques à droite.

D'autres données obtenues par Kamkari et al. (2014) nous permettent de comparer les profils de température en cours du temps à différentes positions. Le schéma des thermocouples positionnés expérimentalement à l'intérieur de l'unité de stockage est présenté dans la figure 5.12. Les profils de température obtenus pour les thermocouples sont présentés dans la figure 5.13 pour l'angle d'inclinaison de 0° et 5.14 pour l'angle d'inclinaison de 90° . Les sous-figures de gauche présentent l'évolution temporelle de la température expérimentale, tandis que les sous-figures de droite montrent cette évolution pour la résolution numérique.

Initialement, pour tous les angles d'inclinaison, tous les thermocouples sont entourés de MCP solide, et la chaleur est transférée de la surface chaude de l'enceinte vers les thermocouples par conduction thermique. Au fur et à mesure que le processus de fusion progresse, le front de fusion se déplace et atteint les thermocouples, ce qui entraîne des augmentations

significatives de la température enregistrée. Après cette phase, les températures mesurées par les thermocouples continuent d'augmenter légèrement jusqu'à la fin du processus de fusion. De plus, les thermocouples situés dans la cavité inclinée à un angle de 0° montrent des fluctuations de température une fois que le front de fusion les atteint. Ces variations thermiques sont dû à la présence de cellules de convection et au développement de courants de convection turbulents dans le MCP fondu.

Nos résultats numériques concordent avec les phénomènes physiques observés. Les tendances des courbes sont similaires et nous retrouvons les mêmes caractéristiques. Nous constatons un léger écart temporel entre les données numériques et expérimentales, ce qui demeure cohérent avec celui observé précédemment et pour lequel nous avons avancé quelques explications possibles. Malgré quelques différences de prédiction du temps de fusion, le modèle reproduit le même comportement global que les données expérimentales.

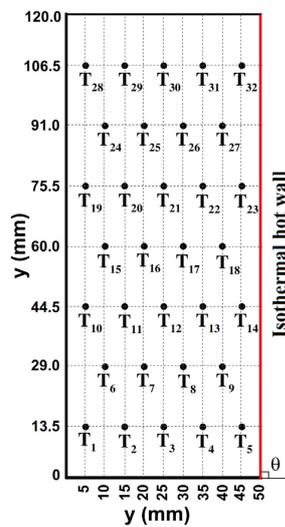


FIGURE 5.12. – Disposition des thermocouples dans l'unité de stockage thermique. Schéma tiré de Kamkari et al. (2014).

La forte concordance entre nos simulations et les données expérimentales confirme la validité et la robustesse de notre modèle. En effet, notre modèle est capable de prédire avec fiabilité la position de l'interface liquide-solide, l'évolution de la fraction liquide, le nombre de Nusselt et les distributions de température au cours du temps lors de la fusion d'un MCP à coefficients variables. Cette capacité à reproduire fidèlement les phénomènes physiques observés offre de nombreuses possibilités pour une utilisation future.

5.4. Conclusion

Notre approche numérique s'est révélée être à la fois robuste et stable pour résoudre de manière efficace les problèmes complexes liés au changement de phase. Nous avons démontré la capacité de notre code à modéliser la fusion de MCP dans différentes configurations. Nos résultats numériques ont montré une excellente concordance avec les données de référence

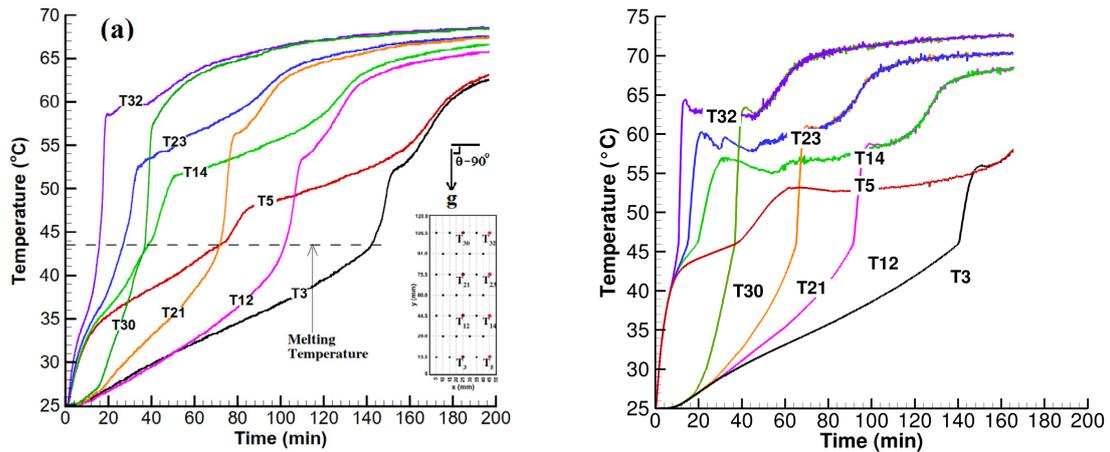


FIGURE 5.13. – Historique des températures : angle de 0° : résultats expérimentaux de Kamkari et al. (2014) à gauche et résultats numériques à droite.

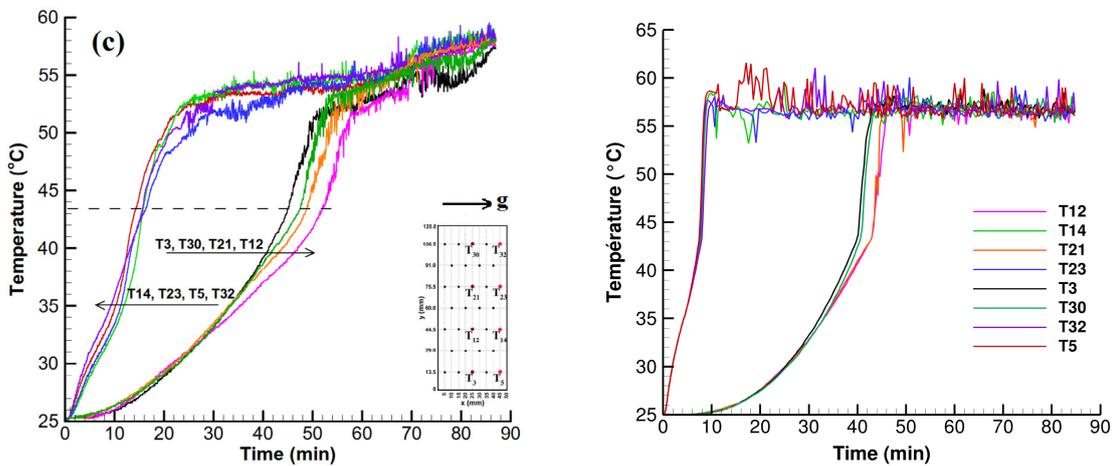


FIGURE 5.14. – Historique des températures : angle de 0° : résultats expérimentaux de Kamkari et al. (2014) à gauche et résultats numériques à droite.

pour la fusion du n-octadécane, notamment à haut nombre de Rayleigh. De plus, l'étude de la fusion d'un MCP cylindrique comportant des tuyaux internes chauffés a également présenté une bonne similitude avec les résultats numériques existants. Nous avons aussi mis en évidence la fiabilité de notre méthode en étudiant un cas de fusion de MCP à haut Rayleigh et à coefficients variables. La validité de notre approche a été rigoureusement démontrée en comparant nos résultats avec des données expérimentales, en tenant compte de divers paramètres tels que la position de l'interface, la fraction liquide, le nombre de Nusselt et la distribution de la température. Cette comparaison approfondie a confirmé la précision de notre modèle, renforçant ainsi sa validité.

En conclusion, notre méthode est en mesure de traiter des systèmes réels complexes en prenant en compte des coefficients variables. Elle présente une flexibilité pour modéliser différents phénomènes physiques dans diverses configurations. Notre approche permet également l'utilisation d'une résolution à la fois physique et adimensionnée, ce qui lui confère une grande adaptabilité.

Ces résultats ouvrent la voie à de nombreuses applications pratiques dans le domaine du changement de phase. Notre approche numérique offre une puissante ToolBox pour étudier et optimiser les processus de fusion de MCP dans diverses configurations. Elle offre également des perspectives prometteuses pour le développement de nouvelles technologies et de nouveaux systèmes basés sur le changement de phase.

6. Simulation dans de géométries complexes

La capacité de notre méthode numérique à produire des solutions précises pour des problèmes de changement de phases sur plusieurs configurations géométriques a été démontrée dans le chapitre 5. Notre programme est désormais utilisé pour étudier des configurations plus complexes, employées dans des applications pratiques.

Plus de 70% des conteneurs de MCP utilisés pour le stockage de la chaleur utilisent des systèmes tubulaires (Agyenim et al., 2010). Les enceintes annulaires représentent donc une des géométries les plus intéressantes d'un point de vue pratique. La fusion d'un MCP à coefficients constants dans une géométrie cylindrique a été validée dans le paragraphe 5.2.3. Nous complexifions la résolution numérique en considérant un MCP à coefficients variables dans ce type de géométrie. L'intérêt d'étudier ce cas réside également dans la possibilité de comparer nos solutions aux résultats expérimentaux et numériques de Azad and Groulx (2021)

De plus, les MCP non-métalliques, c'est-à-dire à haut nombre de Prandtl, tels que les paraffines, les acides gras et les sels hydratés, ont un coût plus faible et une plage de température de fusion plus large que les MCP métalliques. Ces matériaux constituent donc de bons candidats pour un large éventail d'applications thermiques. Cependant, une conductivité thermique faible, inhérente aux MCP non-métalliques, entraîne un mauvais échange de chaleur entre le MCP et le fluide caloporteur. Cela empêche un transfert de chaleur rapide et limite donc le déploiement de ces MCP. Par conséquent, il est essentiel de proposer des techniques permettant d'améliorer le transfert de chaleur. Les techniques d'amélioration les plus courantes consistent à utiliser des surfaces étendues, telles que des ailettes et des caloducs, ou à utiliser plusieurs MCP ayant des points de fusion différents. Nous nous intéressons donc à ces diverses configurations permettant l'amélioration du taux de fusion des MCP. Une première confrontation aux résultats expérimentaux de Kamkari and Shokouhmand (2014), mettant en place diverses configuration avec ailettes est présentée dans ce chapitre. Nous présentons également la fusion de plusieurs MCP disposés en série, ce qui représente une grande complexité numérique.

Les MCP sont, de plus, très prometteurs en ce qui concerne l'isolation des bâtiments, notamment lorsqu'ils sont intégrés dans les parois. Nous étudions donc la variation de la température à l'intérieur d'une cavité remplie d'air, accolée à une paroi remplie de MCP. Cette simulation met en évidence les capacités d'isolation d'un MCP et nous permet de valider notre modèle dans ce contexte en le comparant à l'étude expérimentale menée par Labihi et al. (2017).

6.1. Case MCP–Groulx

Le processus de fusion se divise souvent en quatre étapes. Durant la première étape, appelée conduction initiale, les MCP fondent par pure conduction. Ensuite, l'étape de forte convection démarre lorsqu'une quantité suffisante de MCP liquide est présente. Durant cette étape, la convection naturelle augmente considérablement le taux de transfert de chaleur et devient le mode de transfert dominant. Puis la convection décroît lors de la troisième étape, le taux de fusion commence à ralentir. La fusion du MCP se termine par conduction (Jany and Bejan, 1988; Jones et al., 2006). Ces phénomènes sont complexes à reproduire numériquement, davantage encore dans une enceinte annulaire contenant un MCP à coefficients variables.

La fusion d'un MCP à coefficients constants dans une géométrie cylindrique a été étudiée dans la section 5.2.3. Nous avons comparé nos résultats avec ceux de Luo et al. (2015), qui ont utilisé un modèle complètement différent basé sur la méthode de Lattice Boltzmann sur Réseau. Nous avons reproduit de manière réaliste les différents processus de fusion dans ce contexte. Cette comparaison a permis de valider nos codes numériques pour ce type de configuration. Nous illustrons désormais la capacité de notre code à traiter les phénomènes complexe de la fusion des MCP à coefficients variables pour le même type de géométrie.

Nous nous focalisons particulièrement sur l'étude expérimentale menée par Azad and Groulx (2021), qui examine différentes conditions géométriques et thermiques, telles que le diamètre du tube central, la température de la source de chaleur et la température initiale du MCP. La diversité des paramètres étudiés ainsi que la variété des résultats obtenus nous permettent de comparer nos résultats avec les données expérimentales. De plus, les mêmes auteurs ont également réalisé une étude numérique, ce qui nous permet de confronter nos résultats avec les leurs.

Nous nous concentrons sur la fusion du n-octadécane, réalisé dans des anneaux horizontaux avec un tube central de 27mm et un cylindre extérieur de 127 mm de diamètre. Des températures constantes sont appliquées à la surface du tube central, et la surface du cylindre extérieur est isolée. Nous étudions comme températures initiales du MCP, une température correspondant à 2.5K en dessous de sa température de fusion, soit un T_c égale à 298,15K. Pour cette valeur, nous testons une température du fluide de transfert de chaleur circulant dans le tube central de 42.2 K supérieure à la température de fusion du MCP, soit un T_h de 342.85 K. Les propriétés thermophysiques du MCP sont données dans le tableau 6.1.

Les paramètres sans dimension correspondants sont calculés en utilisant les valeurs de référence suivantes : une longueur de référence de $L_{\text{ref}} = 0.045m$, qui correspond à la différence entre le petit cylindre et le grand cylindre, une température de fusion $T_{\text{ref}} = T_f$ comme température de référence, et une vitesse de référence U_{ref} choisie de manière à ce que $Re = 1$, c'est-à-dire $U_{\text{ref}} = 1.13 \times 10^{-4}m/s$. Les grandeurs adimensionnées obtenues sont données dans le tableau 6.2

L'expérience tridimensionnelle peut-être modélisée par un domaine bidimensionnel. De plus, la symétrie du problème permet de simuler un demi-anneau horizontal avec des conditions de symétrie sur la ligne verticale. Dans le dispositif expérimental, des manchons en acier inoxydable ont été ajustés par pression sur les tubes centraux des anneaux. Étant donné la haute conductivité thermique de cet acier, nous modélisons un tube central unique, avec une

PCM Propriétés	n-octadecane	
	Solide	Liquide
$k(W/mK)$	0.358	0.145
$\rho(kg/m^3)$	814	774
$c(J/kg K)$	2150	2240
$\mu(Pas)$	-	0.004
$\alpha(m^2/s)$	2.05×10^{-7}	8.36×10^{-8}
$\beta(K^{-1})$	-	0.00073
$h_{sl}(J/kg)$		189×10^3
$T_f(K)$		300.65

TABLE 6.1. – Propriétés physique du MCP n-octadécane (Azad and Groulx, 2021).

PCM Propriétés	Acide dodécanoïque
	Adimensionnés
Ra	1.32×10^7
Pr	61.81
Ste	0.1
U_{ref}	1.13×10^{-4}

TABLE 6.2. – Paramètres adimensionnés du MCP du n-octadécane (Azad and Groulx, 2021).

température constante appliquée à la surface extérieure du tube central. Nous considérons le tube externe comme adiabatique.

De plus, la densité du n-octadécane diminue d'environ 5% lors de la fusion. Ce changement de densité entraîne une augmentation du volume des MCP lors de leur fusion. Azad and Groulx (2021) ont adapté la configuration expérimentale pour retenir le volume supplémentaire du MCP lors de la fusion en ajoutant une ouverture dans le haut de l'enceinte. Cependant, numériquement, on néglige pour des raisons de simplicité tout changement de volume dans le matériau subissant le changement de phase.

L'expérience commence avec un MCP solide, cependant, comme mentionnée précédemment, nous devons initier la fusion numériquement. Nous utilisons le démarrage "smooth" afin de mettre une fine couche de fluide autour du demi-cylindre central. Un maillage fixe avec 98000 triangles répartis uniformément a été utilisé pour réaliser cette simulation.

La figure 6.1 représente la position de l'interface solide/liquide en fonction du temps. La figure de gauche reprend les résultats numériques et expérimentaux obtenus par Azad and Groulx (2021) où les points correspondent aux résultats expérimentaux et les lignes aux résultats numériques. Les figures de droite correspondent à nos résultats numériques.

La figure 6.1 met en évidence le bon accord entre nos résultats numériques et les données expérimentales. La position d'interface prédite par notre méthode numérique suit de près l'évolution temporelle observée expérimentalement. En comparaison, la méthode numérique proposée par Azad and Groulx (2021) présente des écarts plus importants par rapport aux données expérimentales. Notre méthode offre une meilleure prédiction des interfaces solide-

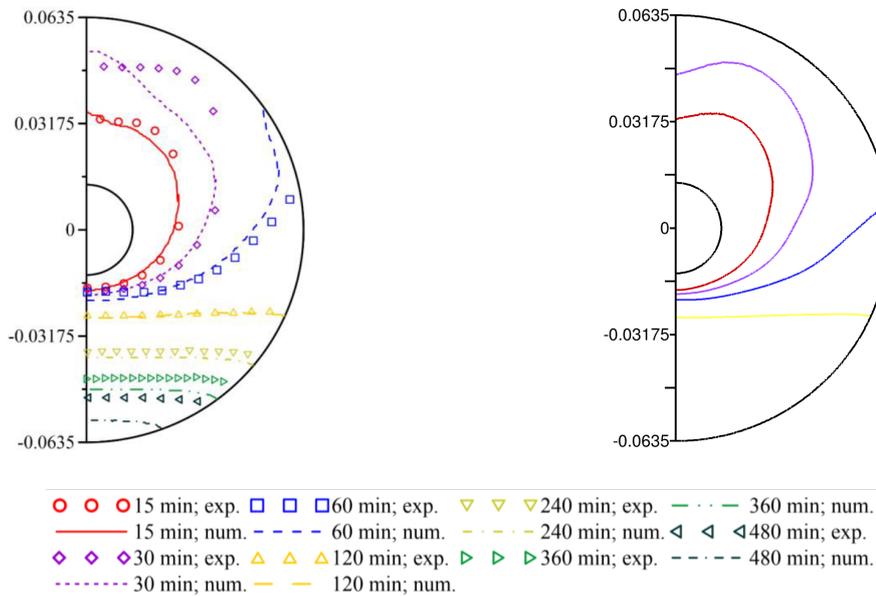


FIGURE 6.1. – Évolution temporelle de la position de l’interface pour le diamètre du tube central de 27 mm, $T_c = 298.15$ et $T_h = 342.85$. Les résultats expérimentaux et numériques de [Azad and Groulx \(2021\)](#) à gauche. Nos résultats numériques à droite. Les dimensions sur l’axe vertical sont en m.

liquide, en particulier dans les premiers stades du processus de fusion, lorsque la fusion est dominée par le transfert de chaleur par conduction. Notre méthode s’avère donc être plus précise.

Ces résultats confirment la validité de notre méthode numérique dans la prédiction de la position d’interface d’un MCP cylindrique à coefficients variables. Notre méthode est donc un outil fiable pour l’étude et la modélisation des phénomènes de changement de phase dans des géométries cylindriques, ce qui ouvre la voie à de nouvelles applications prometteuses.

6.2. Case MCP–Kamkari–ailettes

Un des procédés les plus simples, fiables et rentables pour accroître le taux de transfert de chaleur consiste à placer des ailettes à haute conductivité thermique dans le système. Cette section se concentre donc sur l’utilisation d’ailettes en aluminium pour améliorer le taux de fusion du MCP.

Il existe de nombreuses études relatives à l’amélioration du transfert de chaleur dans les MCP équipés d’ailettes métalliques internes. Les paramètres déterminants, tels que la longueur, l’épaisseur, le nombre d’ailettes et leur espacement ont fait l’objet de nombreuses analyses. Il en a été conclu que l’utilisation d’ailettes plus fines mais plus longues augmente significativement le taux de transfert de chaleur et permet une fusion plus uniforme et plus rapide ([Biwole et al., 2018](#); [Lacroix and Benmadda, 1997](#); [Hosseinzadeh et al., 2011](#)). Par ailleurs, lorsque l’espacement des ailettes diminue, la vitesse de fusion s’accélère ([Shatikian](#)

et al., 2005; Gharebaghi and Sezai, 2008; Sharifi et al., 2011). Toutefois, une augmentation excessive du nombre d'aillettes entrave le flux convectif du MCP fondu et réduit l'effet bénéfique de la convection naturelle sur le taux de transfert de chaleur. De manière similaire, une diminution excessive de l'espacement des ailettes peut entraver le mouvement convectif du MCP liquide entre les ailettes (Huang et al., 2004). Un nombre critique d'aillettes, ne freinant pas le phénomène convectif, a été mis en évidence (Akhilesh et al., 2005; Lacroix and Benmadda, 1997).

Nous nous intéressons tout particulièrement à l'étude expérimentale réalisée par Kamkari and Shokouhmand (2014) sur une enceinte rectangulaire à une et trois ailettes d'aluminium pour différents angles d'inclinaison. Leurs résultats fournissent un aperçu du processus de fusion du MCP dans les enceintes à ailettes, mais également un ensemble de données de référence utile pour la vérification de nos simulations numériques. En effet, l'évolution de l'interface solide-liquide a été enregistrée par la visualisation directe du processus de fusion et une équation de corrélation pour la fraction liquide a été développée sur la base de la combinaison de paramètres sans dimension. De plus, des capteurs thermiques ont enregistré l'évolution de la température tout au long du processus de fusion. Les résultats numériques sont donc comparés en termes de position de l'interface de fusion, de fraction liquide et de distribution de température aux résultats expérimentaux.

L'expérience de Kamkari and Shokouhmand (2014) reprend les mêmes caractéristiques que celle décrite dans la section 5.3, c'est-à-dire la fusion d'un MCP acide dodécanoïque dans une cavité rectangulaire dont les dimensions ont été fixées à 50mm de largeur, 120 mm de hauteur et 120mm de profondeur. Celle-ci diffère par l'ajout d'une ou de trois ailettes d'aluminium, qui ont pour épaisseur 4mm, pour largeur 25mm et pour longueur de 120 mm. Dans le montage expérimental, la paroi droite est constituée d'une plaque d'aluminium hautement conductrice à 1 ou à 3 ailettes et est reliée à un échangeur de chaleur, ce qui a permis le maintien de cette paroi à une température chaude constante. La fabrication des échangeurs de chaleur à ailettes par fraisage a permis d'éviter toute résistance de contact thermique entre la base des ailettes et la paroi chauffée. Les cinq autres parois de l'enceinte étaient constituées de feuilles de plexiglas, permettant de minimiser la perte de chaleur de l'enceinte grâce à leur faible conductivité thermique.

Le type de géométrie utilisé ainsi que la méthodologie expérimentale de cette étude permet de simplifier ce système en un modèle numérique bidimensionnel dans lequel la paroi de droite est maintenue à une température chaude, les ailettes et les trois autres parois de l'enceinte sont considérées adiabatiques. Le MCP était maintenu initialement à 25 degrés puis chauffé à gauche à 70 degrés. Reprenant le même schéma expérimental que celui étudié dans le paragraphe 5.3, les propriétés thermophysiques de l'acide dodécanoïque utilisé sont énumérées dans le tableau 5.5.

Les positions d'interface relevées à différents instants sont comparées avec les prédictions de notre modèle. Les figures 6.2 et 6.3 présentent les positions d'interface numérique à droite et expérimentale à gauche, lors de la fusion d'un MCP en présence d'une ailette et de trois ailettes respectivement.

La présence de trois ailettes entraîne une déformation plus importante de l'interface de fusion par rapport à une seule ailette. Les ailettes génèrent des gradients de température plus élevés et des flux de chaleur plus intenses, ce qui se traduit par des variations plus importantes

dans la vitesse de fusion du MCP et dans la position de l'interface. De plus, l'interaction complexe entre les trois ailettes amplifie les perturbations et les variations de la position de l'interface. Nous constatons que nos résultats numériques reproduisent ces phénomènes observés expérimentalement. Les formes des interfaces obtenues numériquement correspondent qualitativement aux résultats expérimentaux, démontrant ainsi la capacité de notre code à reproduire avec précision les phénomènes physiques complexes présents dans la cavité.

Nous notons un décalage temporel entre les courbes numériques et expérimentales. Cependant, étant donné que nous simulons un cas très similaire à celui présenté dans la section 5.3, les explications précédemment fournies concernant ce décalage temporel restent valables pour cette configuration avec des ailettes. De plus, la présence d'ailettes intensifie les interactions, ce qui peut expliquer le décalage plus prononcé que précédemment.

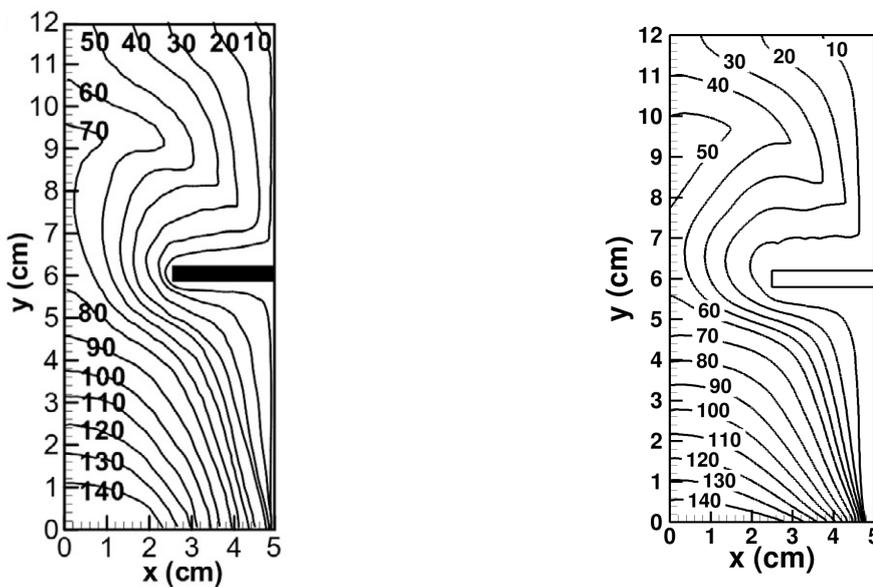


FIGURE 6.2. – Évolution temporelle de la position de l'interface avec inclusion d'une ailette pour $T_h = 70$: résultats expérimentaux de Kamkari and Shokouhmand (2014) à gauche et résultats numériques à droite.

La figure 6.4 montre schématiquement l'unité de stockage thermique décrite avec une et trois ailettes. Elle montre également la disposition des thermocouples dans les boîtiers à ailettes, ce qui permet de tracer l'historique des températures sur quelques thermocouples (T5, T14, T23, T32 et T3, T12, T21, T30) et de les comparer à ceux obtenus expérimentalement. La figure 6.5(gauche) présente les profils de températures obtenus expérimentalement par Kamkari and Shokouhmand (2014) pour le configuration à une ailette. En comparaison, les profils de températures obtenues numériquement sont présentés dans la figure 6.5(droite). De même, la figure 6.6(gauche) présente les profils de températures obtenus expérimentalement par Kamkari and Shokouhmand (2014) pour le configuration à trois ailettes. En comparaison, les profils de températures obtenues numériquement sont présentés dans la figure 6.6(droite)

Au début de l'expérience, dans les enceintes avec une ou trois ailettes, lorsque la température des thermocouples est inférieure à la température de fusion, la chaleur est transférée aux thermocouples par conduction à travers le MCP solide. Nous observons expérimentalement une augmentation de température plus élevée pour les thermocouples positionnés au-dessus des

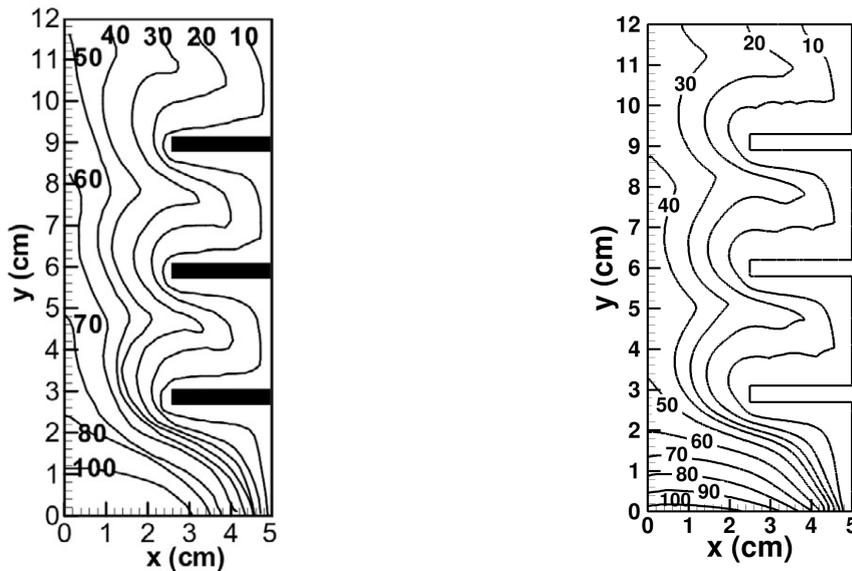


FIGURE 6.3. – Évolution temporelle de la position de l'interface avec inclusion de trois ailettes pour $T_h = 70$: résultats expérimentaux de Kamkari and Shokouhmand (2014) à gauche et résultats numériques à droite.

ailettes. Cette augmentation de température est principalement dû à un transfert de chaleur plus intense à l'interface solide-liquide au-dessus des ailettes horizontales. Pendant le processus de fusion, nous observons également des fluctuations de température dans les historiques des thermocouples situés au-dessus des ailettes. Ces fluctuations suggèrent la présence de structures d'écoulement chaotiques et tourbillonnaires dans le MCP liquide au-dessus des ailettes. Elles sont le résultat de l'interaction complexe entre le mouvement du fluide et les ailettes, et témoignent de la dynamique complexe du processus de fusion. Notre simulation numérique reproduit de manière qualitative l'ensemble de ces phénomènes physiques observés expérimentalement sur les historiques de température. Cela démontre que notre modèle est capable de reproduire avec précision les processus de fusion en présence d'une forte convection naturelle et d'ailettes.

Le calcul numérique de la fraction liquide permet une comparaison encore plus précise de nos résultats avec les résultats expérimentaux. L'évolution de fraction liquide expérimentale est présentée dans la figure 6.7(gauche) et numériquement dans la figure 6.7(droite).

Les résultats obtenus pour la fraction liquide sont en bonne concordance avec les données expérimentales, ce qui confirme l'efficacité de notre code dans la prédiction de ce paramètre en présence d'ailettes. Cette concordance renforce la validité de notre approche numérique pour étudier les phénomènes de changement de phase pour ce type de configuration.

L'ensemble de ces résultats démontre la capacité de nos codes numériques à reproduire les caractéristiques et les phénomènes physiques de la fusion d'un MCP à coefficients variables et à haut Rayleigh en présence d'ailettes. Ces résultats renforcent la confiance dans l'utilisation de notre modèle pour étudier et prédire le comportement de systèmes similaires.

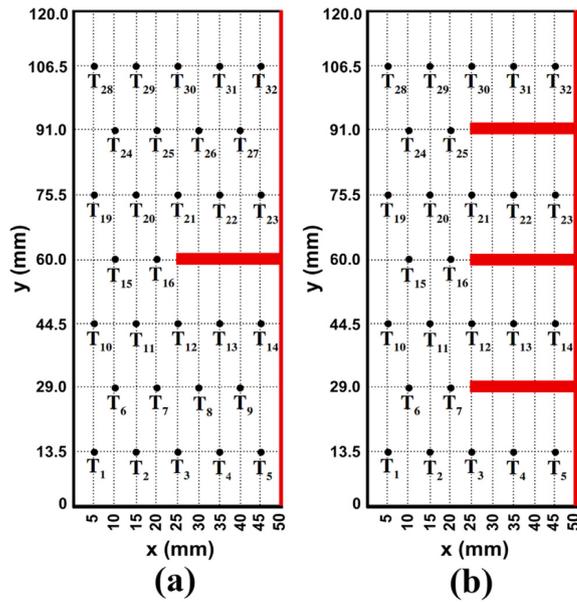


FIGURE 6.4. – Disposition des thermocouples dans les boîtiers à ailettes : (a) boîtier à 1 ailette (b) boîtier à 3 ailettes. Schéma tiré de Kamkari and Shokouhmand (2014).

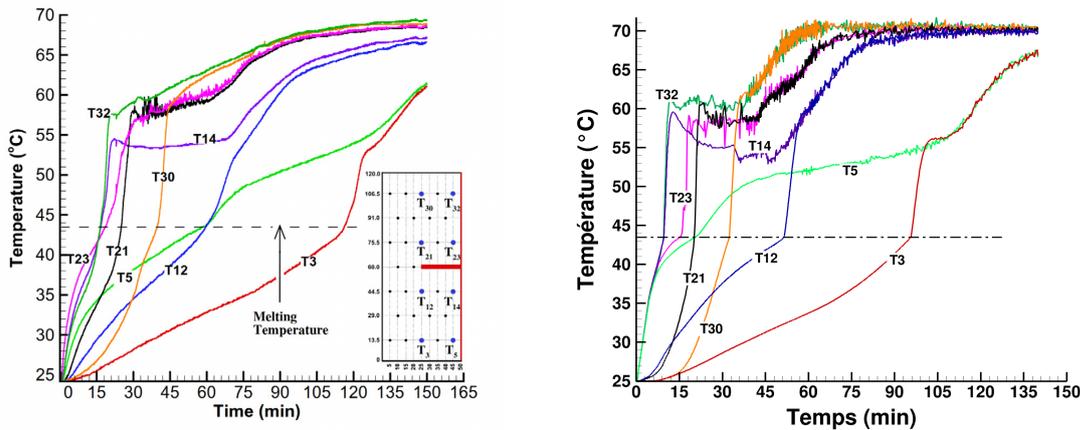


FIGURE 6.5. – Historique des température, une ailette : résultats expérimentaux de Kamkari and Shokouhmand (2014) à gauche et résultats numériques à droite.

6.3. Case MCP–Sweidan

L'inclusion d'ailettes métalliques dans le système s'est révélée être une méthode efficace pour améliorer le transfert de chaleur des MCP. Une autre approche prometteuse pour améliorer le transfert de chaleur dans les MCP consiste à utiliser plusieurs MCP en parallèle, chacun ayant une température de fusion différente. Plusieurs études ont comparé l'utilisation de plusieurs MCP à l'utilisation d'une seule dalle de MCP (Gong and Mujumdar, 1996; Shaikh and Lafdi, 2006; Sweidan et al., 2020). Les résultats ont montré une amélioration du taux de transfert de chaleur lors de l'utilisation de plusieurs MCP en parallèle. Cette approche permet d'optimiser le processus de transfert de chaleur en exploitant les différentes températures

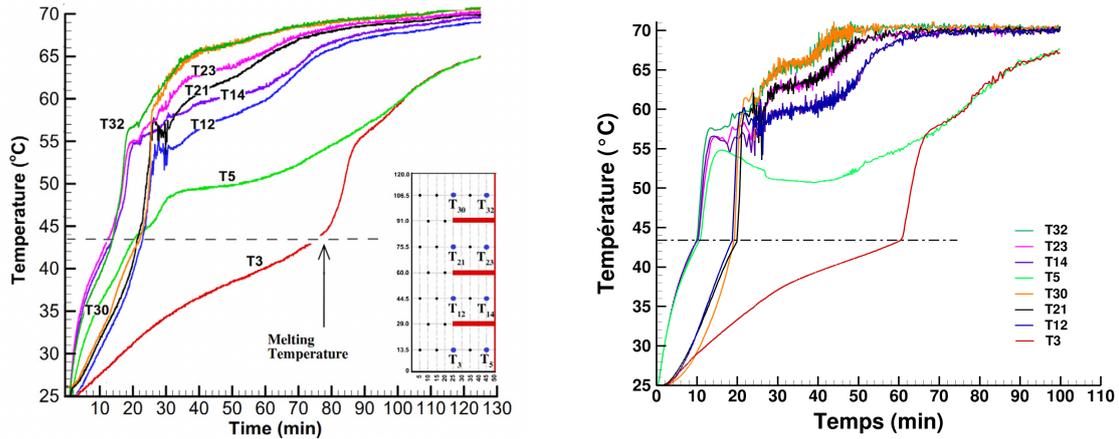


FIGURE 6.6. – Historique des température, trois ailettes : résultats expérimentaux de Kamkari and Shokouhmand (2014) à gauche et résultats numériques à droite.

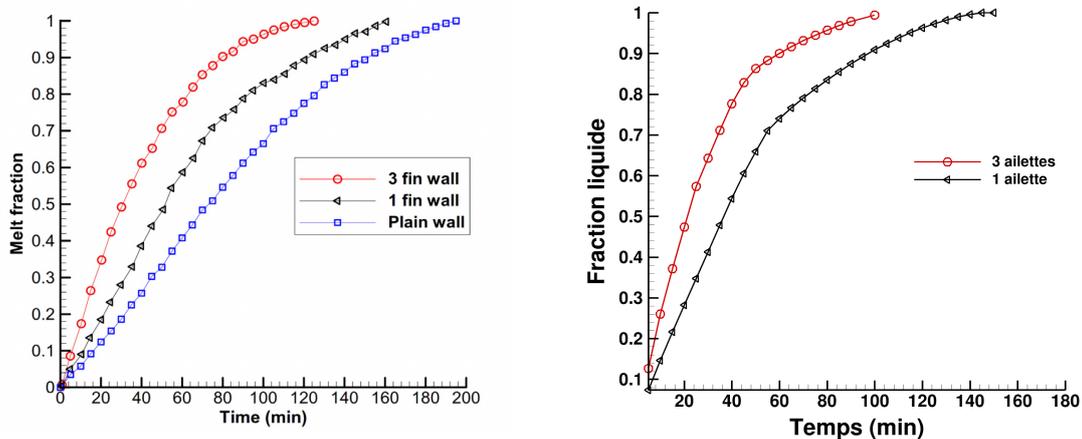


FIGURE 6.7. – Évolution temporelle de la fraction liquide. Comparaison avec les résultats expérimentaux de Kamkari and Shokouhmand (2014).

de fusion des MCP et en augmentant la capacité d'absorption et de libération de chaleur du système global.

L'objectif de cette étude est d'analyser numériquement le processus de changement de phase dans un système de stockage de chaleur comprenant plusieurs dalles rectangulaires de MCP. Nous nous concentrons sur deux configurations spécifiques, inspirées des travaux de Shaikh and Lafdi (2006); Sweidan et al. (2020). Ces études ont démontré que ces deux configurations étaient celles qui présentaient la plus grande amélioration en termes d'énergie totale stockée par rapport à une configuration avec une seule dalle de MCP.

Les deux configurations sont intégrées dans une dalle carrée de longueur $L = 0.05m$. Le premier système consiste en une plaque rectangulaire de MCP disposés horizontalement. Les différents MCP sont disposés de haut en bas dans l'ordre décroissant de leur point de fusion. La largeur de chaque MCP le long de la cloison est de $L/3 = 0.0166$. Le deuxième système est subdivisé en quatre partitions égales, chacune contenant un MCP occupant un quart de la surface totale de la dalle. Ce système est composé de deux MCP distincts; les MCP ayant

une température de fusion plus élevée sont positionnés le long de la diagonale gauche, tandis que les MCP ayant une température de fusion plus faible sont disposés le long de la diagonale droite. Le MCP situé en haut à droite est désigné par "HD", celui en haut à gauche est désigné par "HG". De même, le MCP placé en bas à droite est appelé "BD" et celui en bas à gauche est nommé "BG". Un schéma illustrant ces deux configurations est présenté dans la figure 6.8.

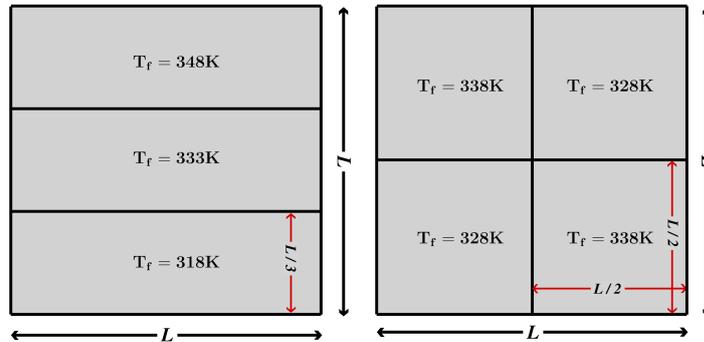


FIGURE 6.8. – Disposition des MCP : (a) Trois domaines horizontaux (b) Quatre domaines.

Dans les deux cas, le processus de fusion débute sur la paroi gauche de la dalle avec une température chaude $T_h = 363K$, supérieure à la température de fusion des MCP, tandis que les autres parois sont considérées adiabatiques. Initialement, tous les MCP ont une température uniforme $T_i = 303K$, qui est inférieure aux températures de fusion des MCP considérés. Les propriétés thermophysiques des MCP sont identiques pour les différentes configurations des dalles, à l'exception des températures de fusion des MCP. Ces propriétés sont résumées dans le tableau 6.3.

PCM Propriétés	n-octadecane	
	Solide	Liquide
$k(W/mK)$	0.8	0.8
$\rho(kg/m^3)$	825	775
$c(J/kg K)$	1000	1000
$\mu(Pas)$	-	2.65×10^{-3}
$\beta(K^{-1})$	-	0.0003
$h_{sl}(J/kg)$		10^5

TABLE 6.3. – Propriétés physique du MCP (Sweidan et al., 2020).

La figure 6.9 présente l'évolution de la fraction liquide pour les trois MCP disposés en parallèle, avec des intervalles de 200 secondes. On peut observer que le MCP inférieur, ayant la température de fusion la plus basse, commence à fondre en premier. En présence de convection, la partie supérieure du MCP du bas fond plus rapidement, ce qui stimule la fusion du MCP central. À son tour, la convection accélère la fonte du MCP central au niveau de sa partie supérieure, provoquant une accélération de la fonte du MCP supérieur. Ainsi, l'influence des MCP inférieurs reste visible jusqu'à leur fusion complète.

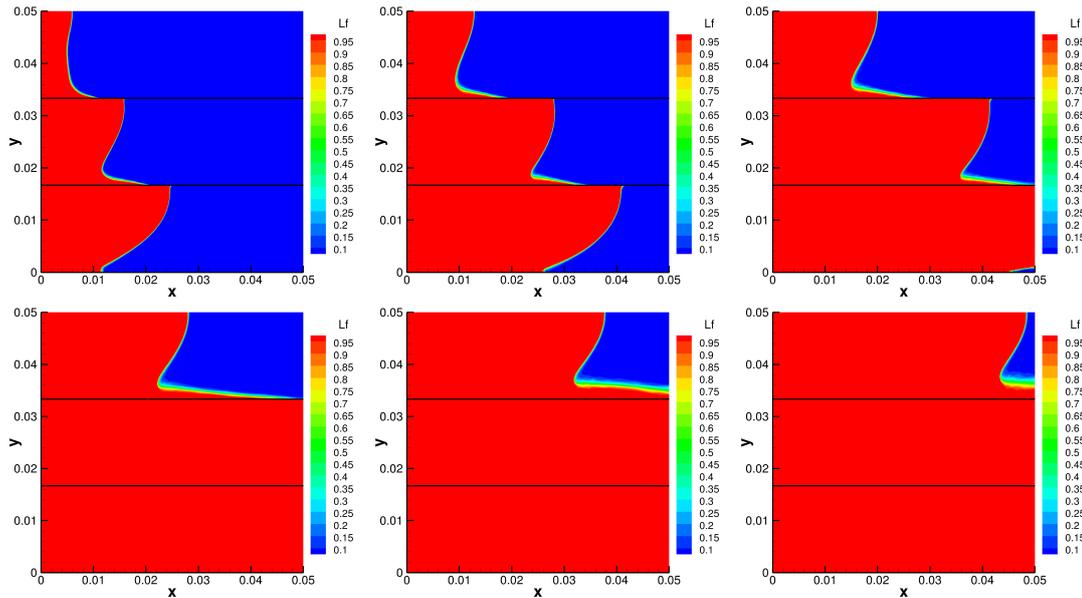


FIGURE 6.9. – Position de l’interface solide-liquide : trois domaines horizontaux.

En arrangeant les MCP du système de manière à ce que ceux avec les températures de fusion les plus basses soient positionnés en bas, l’effet de la convection naturelle provoquée par la différence de densité est maximisée. De plus, les fractions liquides observées sont qualitativement similaires à celles rapportées par [Shaikh and Lafdi \(2006\)](#) et [Sweidan et al. \(2020\)](#).

La figure 6.10 présente l’évolution de la fraction liquide pour la configuration à quatre MCP. L’évolution de la fraction liquide est observée à des intervalles réguliers de 200 secondes. Au début du processus de fusion, nous observons que le MCP ”BG” fond plus rapidement en raison de sa température de fusion plus basse. Une convection induite par flottabilité s’installe, ce qui favorise une fusion plus rapide du MCP situé au-dessus de celui-ci.

Nous observons ensuite que le MCP HD commence à fondre avant que le MCP HG ne soit complètement fondu. Cela s’explique par le fait que le MCP HD a une température de fusion plus basse que son voisin. Ainsi, la température du MCP HG atteint la température de fusion du MCP HD, entraînant sa fusion. Cependant, cette température reste inférieure à la température de fusion du MCP HG, qui est donc encore solide. Le processus de fusion se poursuit jusqu’à ce que le MCP BD soit le dernier à avoir une phase solide. Les fractions liquides observées sont qualitativement similaires à celles rapportées dans les études de [Shaikh and Lafdi \(2006\)](#) et [Sweidan et al. \(2020\)](#), pour lesquelles les mêmes configurations ont été étudiées.

Les résultats obtenus mettent en évidence une transmission de chaleur efficace et une répartition équilibrée du flux thermique entre les différents MCP. La configuration en série de plusieurs MCP offre des avantages en termes de stockage et de transfert de chaleur, permettant ainsi une utilisation plus efficace de l’énergie thermique et une augmentation de la capacité de stockage. Nos résultats démontrent l’efficacité de notre approche dans la modélisation de systèmes utilisant des MCP en série. Ils peuvent fournir des informations précieuses pour la conception et l’optimisation de tels systèmes.

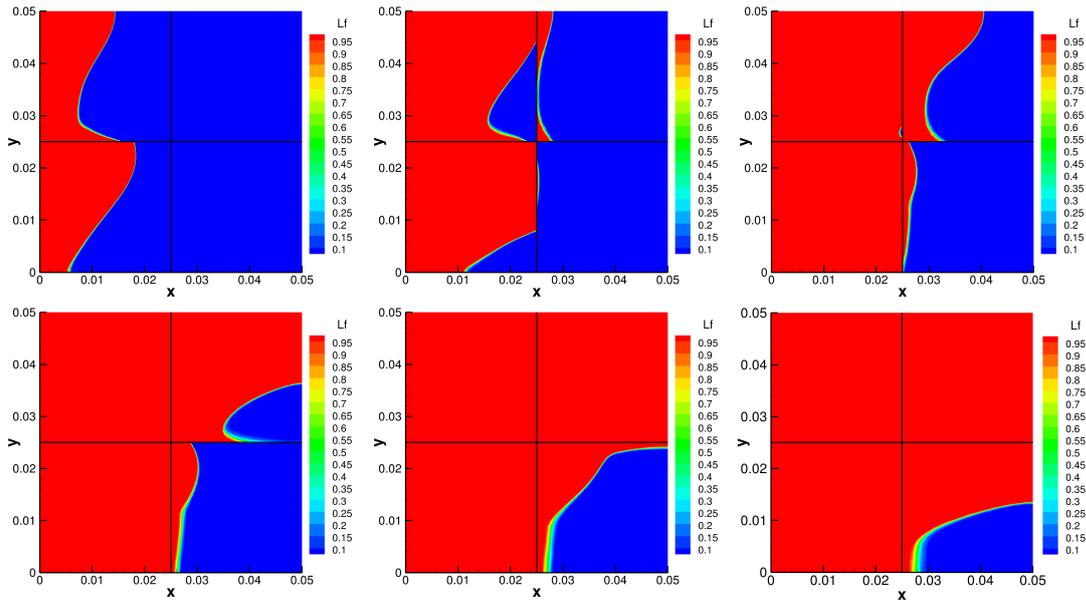


FIGURE 6.10. – Position de l’interface solide-liquide : quatre domaines.

6.4. Case MCP–AIR

Après avoir étudié diverse configuration de MCP, nous nous intéressons maintenant au développement de nos codes numériques pour une application pratique dans le domaine du bâtiment. Les MCP présentent un fort potentiel en termes d’isolation des bâtiments, offrant une solution efficace pour réduire les pertes de chaleur. Lorsqu’ils sont intégrés dans les parois des bâtiments, les MCP permettent de réguler la température et d’améliorer l’efficacité énergétique. Nous nous concentrons sur l’analyse de la variation de température à l’intérieur d’une cavité remplie d’air, adjacente à une paroi contenant du MCP.

La modélisation d’une cavité comprenant une paroi de matériau à changement de phase adjacente à de l’air présente une grande complexité. En effet, la résolution des équations de transfert de chaleur et de masse devient plus difficile à cause de la coexistence de la convection naturelle dans les deux domaines ainsi que du changement de phase. Les équations de convection-diffusion pour l’air et les équations de transfert de chaleur avec changement de phase pour le MCP doivent être résolues simultanément. Cela nécessite une approche couplée pour prendre en compte les interactions entre les deux domaines.

Pour valider notre modèle, nous nous appuyons sur les résultats expérimentaux publiés par [Labihi et al. \(2017\)](#), portant sur une cavité carrée de dimensions $L = 0.1m$. Cette cavité est divisée en deux parties distinctes : une cavité gauche remplie d’air et une cavité droite remplie de MCP. La largeur de la cavité remplie d’air est de $0.09m$, tandis que celle remplie de MCP est de $0.01m$. Une représentation schématique de ce système est présentée dans la figure 6.11.

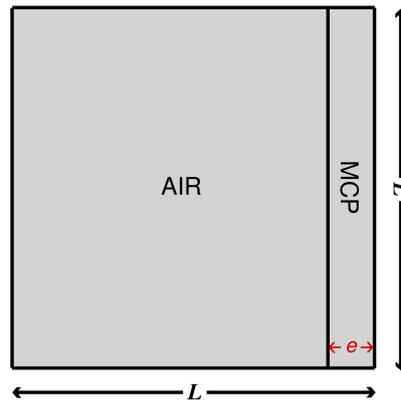


FIGURE 6.11. – Schéma de l'expérience (Labihi et al., 2017)

Les propriétés de l'air et du MCP considérés sont donnés dans le tableau 6.4.

PCM Propriétés	Acide dodécanoïque		Air
	Solide	Liquide	
$k(W/mK)$	0.2	0.2	0.026
$\rho(kg/m^3)$	694	580	1.2
$c(J/kgK)$	1700	1750	1000
$\nu(Pas)$	-	-	1.87×10^5
$\beta(K^{-1})$	-	-	3.3×10^{-3}
$h_{sl}(J/kg)$	137×10^3		-
$T_f(K)$	319 ± 2.35		-

TABLE 6.4. – Paramètres physiques du MCP d'acide dodécanoïque et de l'air Labihi et al. (2017).

Le MCP est initialement à l'état solide, à une température de 25° . La paroi gauche est maintenue à une température froide de 16.5° , tandis que la paroi droite est maintenue à une température chaude de 60.2° . La paroi verticale qui sépare les deux cavités permet les échanges de chaleur entre elles. Les autres parois du système sont considérées adiabatiques.

Au début de l'expérience, le MCP, qui était initialement à l'état solide, commence à fondre, ce qui déclenche la mise en place d'une convection naturelle dans la cavité remplie d'air. Selon les observations expérimentales, le système atteint un état stationnaire après environ 3 heures. Par la suite, la source de chaleur appliquée à la paroi droite de la cavité remplie de MCP est enlevée, ce qui entraîne une solidification progressive du MCP. L'expérience se termine lorsque le MCP est complètement revenu à l'état solide.

Dans le cadre de cette étude, deux sondes de température ont été positionnées au centre de chaque cavité, une dans la cavité remplie d'air et une dans la cavité remplie de MCP. Les mesures obtenues fournissent une référence pour évaluer la précision de notre approche et comparer nos résultats numériques aux données expérimentales.

Ainsi, notre code numérique est validé en comparant le profil de température obtenus aux

relevés expérimentaux et aux obtenus numériquement par Labihi et al. (2017). Pour cela, nous nous plaçons sous les mêmes hypothèses de travail : nous supposons que l'épaisseur du MCP est suffisamment petite pour négliger la convection naturelle dans la partie fondue de celui-ci. Nous négligeons donc les termes de convection dans le système (2.33)-(2.35).

Dans une première étape, nous avons reproduit la phase initiale de l'expérience, à savoir la fusion du MCP. Pour cela, nous avons fixé la température initiale à 25° dans les deux cavités, avec le MCP entièrement solide. La paroi gauche de la cavité remplie de MCP a été maintenue à une température chaude, tandis que la paroi droite de la cavité remplie d'air a été maintenue à une température froide. Nous avons itéré le processus de fusion jusqu'à ce que deux états successifs soient suffisamment proches, atteignant ainsi l'état stationnaire présenté dans la figure 6.12. Le temps requis pour atteindre cet état stationnaire est de 3,321 heures, ce qui correspond bien au temps expérimental nécessaire pour atteindre cet état.

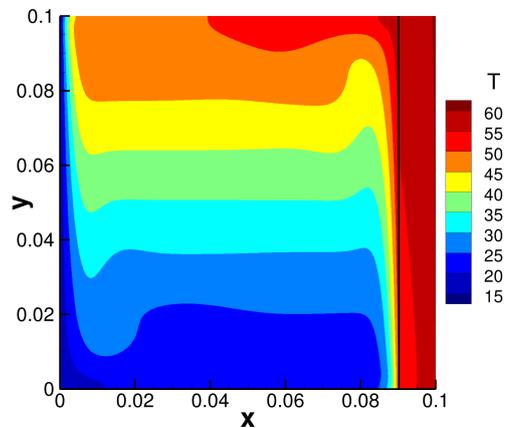


FIGURE 6.12. – Isotherme correspondant à l'état stationnaire atteint après la fusion totale du MCP.

Cet état stationnaire obtenu est utilisé comme état initial pour la deuxième étape de l'expérience, qui correspond à la décharge. Pendant cette étape, la paroi froide est maintenue à la température T_c , tandis que la paroi gauche est désormais considérée adiabatique. Les isothermes aux instants $0s$, $3605s$ et $12656s$ sont présentés dans la figure 6.13. Ces instants correspondent respectivement à l'état initial ($\varphi_L = 1$), lorsque le MCP est à moitié solidifié ($\varphi_L = 0.5$), et lorsque le MCP est complètement solide ($\varphi_L = 0$). Les isothermes observées sont en très bonne concordance avec les isothermes numériques obtenus par Labihi et al. (2017). Les légères différences entre les deux peuvent s'expliquer par des conditions initiales légèrement différentes.

Dans la figure 6.14, nous présentons les variations de température pour les sondes placées dans la couche de MCP et dans la cavité d'air. La sous-figure (a) représente les données numériques et expérimentales obtenues par Labihi et al. (2017), tandis que nos propres résultats sont présentés dans la sous-figure (b). Nous observons une tendance similaire entre les données expérimentales, les résultats numériques et nos résultats pour les deux distributions de température.

Dans les premiers stades de la décharge du MCP, la chaleur sensible est libérée rapidement jusqu'à atteindre la température de fusion. Ensuite, la solidification débute, et la chaleur la-

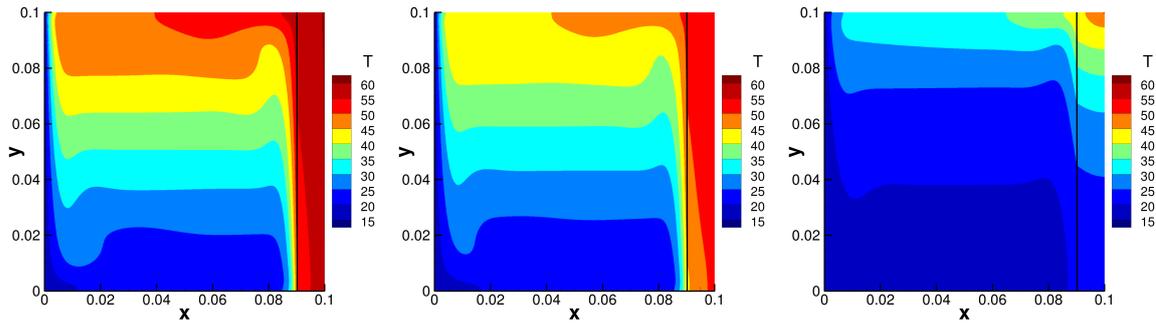


FIGURE 6.13. – Évolution temporelle des isothermes aux temps $t = 0, 3605$ et $12656s$. Comparaison avec celles obtenues par [Labihi et al. \(2017\)](#).

tente est libérée lors du changement de phase du MCP. Cela se traduit par la présence d'un plateau dans les profils de température. Cependant, une fois que la quantité de MCP liquide devient assez importante, la chaleur libérée par le changement de phase devient insuffisante pour compenser les pertes de chaleur à travers la paroi froide de la cavité. Cela entraîne une diminution rapide de la température, mettant ainsi fin au plateau, même si la solidification du MCP n'est pas encore complètement terminée. Après la solidification complète du MCP, la température continue de diminuer jusqu'à atteindre la température froide.

Nos résultats numériques sont en bon accord avec les données expérimentales pour les deux cavités. Nous observons les mêmes trois phases de décharge, ainsi que la présence de plateaux dans les profils de température du MCP et de l'air. Nos simulations montrent des plateaux légèrement plus prononcés, mais nous retrouvons qualitativement les mêmes phénomènes. De plus, nous constatons une proximité entre nos résultats avec ceux présentés dans l'étude de [Labihi et al. \(2017\)](#), ce qui renforce la confiance de notre approche.

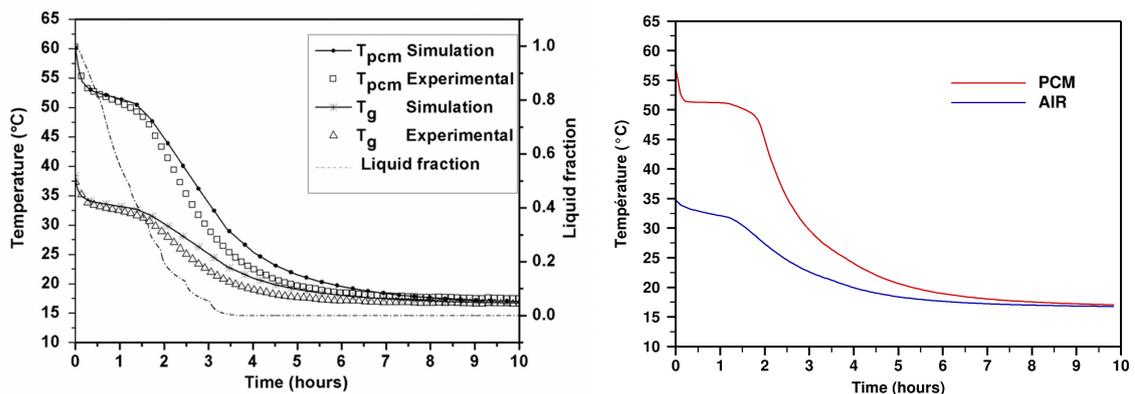


FIGURE 6.14. – Isotherme correspondant à l'état stationnaire atteint après la fusion totale du MCP.

Nos résultats de simulation concordent avec les observations expérimentales, ce qui confirme la robustesse et la précision de notre modèle. Ces résultats ouvrent la voie à de nombreuses applications potentielles de notre modèle et offrent des perspectives intéressantes pour des

études approfondies et des recherches futures.

7. Conclusions et perspectives

7.1. Conclusions

Dans cette thèse, nous avons réalisé une analyse numérique de la convection naturelle et diverses simulations numériques du changement de phase. Nous avons développé des outils numériques basés sur la méthode des éléments finis pour modéliser des systèmes de changement à phase solide-liquide avec convection naturelle. Le mouvement du fluide induit par la flottabilité dans la phase liquide a été modélisé en utilisant les équations de Navier-Stokes incompressibles avec l'approximation de Boussinesq. Le changement de phase des MCP à coefficients variables a été pris en compte en utilisant un modèle enthalpie-porosité basé sur la température pour l'équation de conservation de l'énergie. Une approche à domaine unique a été utilisée. Le même système d'équations a été résolu dans les deux phases avec l'inclusion d'un terme de pénalité de type Carman-Kozeny dans l'équation de la quantité de mouvement. L'ensemble des simulations ont été réalisées avec le logiciel FreeFem++.

Dans le cadre de notre approche théorique, nous avons développé une étude détaillée de la méthode des éléments finis stabilisés basés sur la procédure de stabilisation de la pression minimale. Nous avons introduit un terme de pénalisation dans l'équation de conservation de la masse discrétisée et établi des estimations d'erreur utilisant les paires d'éléments finis $P_1 - P_1$ (vitesse-pression).

Nous avons proposé un nouvel opérateur de projection et étudié le choix optimal du paramètre de stabilisation afin d'assurer une convergence pour les inconnues de vitesse et de température, même en l'absence de la condition inf-sup. Les estimations d'erreurs pour la projection et la convection naturelle ont été validées à travers deux exemples, confirmant ainsi que le taux de convergence obtenu théoriquement est optimal. Nous avons étudié une solution manufacturée avec une solution régulière pour évaluer la précision de nos estimations. Ensuite, nous avons évalué la précision de nos estimations lors d'un cas physique de convection naturelle dans un carré. De plus, nous avons réalisé une dernière simulation pour démontrer le bon comportement des éléments finis d'ordre inférieur. Nous avons simulé un cas de convection naturelle de Rayleigh-Bénard en utilisant les éléments finis $P_1 - P_1 - P_1$ (vitesse-pression-température) et nous avons comparé les nombres de Nusselt obtenus avec des références bien établies de la littérature. Les résultats ont démontré que l'erreur reste inférieure à 0.4%, ce qui témoigne de la précision de notre code même avec des éléments finis d'ordre inférieur.

Ces simulations ont confirmé deux choix optimaux du paramètre de stabilisation. Ces deux choix permettent une réduction significative du temps de calcul par rapport à l'utilisation des éléments de Taylor-Hood standard pour les équations du fluide, même dans les problèmes 3D.

Dans notre approche numérique, nous avons utilisé un schéma GEAR entièrement impli-

cite du deuxième ordre pour intégrer dans le temps les équations couplées de la quantité de mouvement et de l'énergie. La discrétisation de l'espace a été réalisée à l'aide d'éléments finis triangulaires de Taylor-Hood, où la vitesse a été approchée par des éléments finis P_2 et la pression par des éléments finis P_1 . La précision de la méthode numérique a été testée contre des solutions expérimentales et numériques de la littérature.

L'un des premiers objectifs de notre étude numérique a été de valider notre méthode d'enthalpie à coefficients variables en la comparant aux solutions analytiques du problème de Stefan. Nous avons modélisé un système semi-infini en une dimension et effectué une comparaison détaillée des positions de l'interface et des distributions de température obtenues numériquement avec les solutions analytiques. Les résultats ont révélé une excellente concordance entre les deux, confirmant ainsi la précision et la validité de notre approche d'enthalpie.

Le problème de Stefan a également été utilisé pour comparer notre méthode d'enthalpie à la méthode du C_p -modifié. Notre méthode d'enthalpie a démontré une meilleure capacité en termes de pas de temps. Elle nous a permis d'utiliser des pas de temps plus grands par rapport à la méthode du C_p -modifié, tout en maintenant une précision similaire. Ainsi, notre méthode permet une réduction du temps de calcul nécessaire pour effectuer les simulations tout en garantissant des résultats fiables et précis.

Nous avons continué nos travaux en étendant les programmes de la Toolbox développée par [Sadaka et al. \(2020\)](#) au changement de phase des MCP à coefficients variables. De plus, nous avons étendu ces programmes pour permettre une résolution physique. Dans le but de valider notre approche, nous avons effectué une série de tests en augmentant progressivement la complexité des problèmes étudiés.

Dans un premier temps, nous avons testé la capacité de notre code à traiter les problèmes de fusion de MCP à coefficients constants. Nous avons simulé la fusion du n-octadécane à l'intérieur d'une cavité carrée chauffée différentiellement. Pour comparer nos résultats avec ceux de la littérature, nous avons étudié la fusion du n-octadécane pour des nombres de Rayleigh de 10^5 et de 10^8 . Les comparaisons avec les résultats expérimentaux et numériques existants ont montré une bonne concordance, que ce soit pour une résolution physique ou adimensionnée.

Ensuite, nous avons étendu nos simulations à des géométries plus complexes. Nous avons considéré un cylindre avec des inclusions tubulaires chauffées. La comparaison de la fraction liquide dans ces cas a montré un très bon accord avec les résultats de la littérature. Ces résultats ont confirmé l'efficacité de notre approche lors de la fusion de MCP à coefficients constants.

Nous avons ensuite réalisé une étude approfondie d'un cas de fusion de MCP à coefficients variables, en prenant en compte un chauffage latéral et un chauffage par le bas. La validation physique de notre méthode a été réalisée sur plusieurs critères. Nous avons observé une concordance qualitative entre les positions d'interface obtenues numériquement et celles observées expérimentalement. De plus, les valeurs du nombre de Nusselt, de la fraction liquide et des distributions de température ont également montré une bonne correspondance avec les résultats expérimentaux.

En conclusion, notre méthode numérique a été validée pour la modélisation des phénomènes de changement de phase solide-liquide, y compris lors de l'utilisation de MCP à coefficients variables et avec une résolution physique, en fournissant un bon accord avec les références

présentées dans la littérature.

Le dernier objectif numérique de cette thèse a été de fournir une modélisation du processus de fusion et de solidification dans des configurations très utiles pour les applications pratiques. Nous avons d'abord comparé le comportement d'un MCP cylindrique à coefficients variables à des résultats expérimentaux et numériques. Puis nous avons fourni une étude détaillée d'un MCP à coefficients variables avec inclusion d'une et de trois ailettes métalliques, ce qui a confirmé une nouvelle fois la validité de notre méthode. Nous avons également analysé la variation de température à l'intérieur d'une cavité remplie d'air adjacente à une paroi contenant du MCP, et comparé nos résultats numériques à des relevés expérimentaux. L'ensemble de nos résultats ont montré de très bons accords avec les résultats numériques et expérimentaux publiés dans la littérature.

7.2. Perspectives

Nous avons démontré des estimations d'erreur en utilisant la paire P_l-P_i pour les équations de convection naturelle. Cependant, l'analyse numérique du MCP nécessite un travail de recherche complémentaire. L'ajout du changement de phase introduit deux termes supplémentaires : le terme de Carman-Kozeny et le terme source non linéaire. Le terme de Carman-Kozeny, qui dépend de la fonction bornée $A(T)$, ne pose pas de problème majeur et peut être traité de manière relativement aisée. En revanche, le terme source non linéaire ajoute une complexité supplémentaire, nécessitant des outils mathématiques et des techniques plus avancées. La difficulté réside dans le fait que la dérivée temporelle porte sur $\varphi_s(T)$. Si nous pouvons exprimer T comme une fonction f de l'enthalpie h , nous obtiendrons une équation en h . Nous saurions éventuellement développer une estimation d'erreur dans ce cas. Cependant, à l'heure actuelle, nous ne savons pas expliciter cette fonction f , ce qui nous empêche d'utiliser cette formulation en pratique. Par conséquent, une étude plus approfondie est nécessaire pour élaborer des estimations d'erreurs et expliquer théoriquement les résultats que nous observons numériquement.

Il serait également intéressant d'étendre notre approche aux configurations en trois dimensions. Cette expansion vers la 3D ouvrirait de nouvelles possibilités pour la modélisation de systèmes encore plus réalistes et complexes. La modélisation en 3D nous permettrait de tenir compte de la géométrie avec plus de précision, mais également de prendre en compte de façon plus réaliste les effets de convection naturelle et de changement de phase qui varient en fonction des directions spatiales. Cette approche plus réaliste participerait à la conception et à l'optimisation des MCP.

Cette évolution pourrait être construite sur la base des travaux déjà réalisés au sein du laboratoire sur la modélisation en 3D des MCP avec coefficients constants (Sadaka et al., 2020). En combinant ces résultats préexistants avec les avancées de cette thèse, nous pourrions généraliser notre approche pour prendre en compte des coefficients variables dans des configurations tridimensionnelles.

Nous avons mené des simulations de fusion d'un MCP en contact avec une cavité d'air. Dans notre modélisation, nous avons fait l'hypothèse que la largeur du MCP était suffisamment petite pour être négligée. Cependant, cette simplification peut être remise en question

et mérite une analyse plus approfondie. Une perspective intéressante pour nos futures recherches serait donc d'intégrer la convection naturelle dans notre modèle de fusion des MCP. Des études préliminaires ont révélé que la présence de convection naturelle dans le MCP semble avoir un impact sur la répartition de la température à l'intérieur de la cavité d'air.

A. Architecture des programmes et organisation des fichiers

Dans cette annexe, nous décrivons d'abord l'architecture des programmes et l'organisation des fichiers. Nous nous concentrons ensuite sur la liste des paramètres d'entrée et la structure des fichiers de sortie.

A.1. Architecture des programmes

Tous les fichiers sont regroupés dans un répertoire nommé `PCM-Toolbox`. De nombreux commentaires détaillés sont inclus dans les programmes, facilitant ainsi la compréhension. Dans un souci de clarté, nous avons délibérément maintenu un langage de programmation à un niveau de technicité minimal, et nous avons ajouté des commentaires approfondis lorsque nous avons utilisé une syntaxe technique spécifique.

Ce dossier est organisé de la façon suivante :

1. Le dossier `Common-Macros` contient 5 fichiers :
 - *Macro_operator.idp* contient des macros et des fonctions définissant des opérateurs mathématiques,
 - *Macro_problem.idp* contient des macros définissant les formulations variationnelles des problèmes,
 - *Macro_restart.idp* contient les macros utilisées pour démarrer une nouvelle simulation à partir d'un élément sauvegardé,
 - *Macro_output.idp* contient les macros utilisées pour enregistrer la solution dans différents formats,
 - *Macro_system.idp* contient les macros identifiant le système d'exploitation et définissant les commandes spécifiques du système d'exploitation.
2. Le dossier `Test-Cases` contient trois sous-répertoires, chacun d'entre eux définissant l'une des applications suivantes :
 - convection naturelle de l'air ou de l'eau à l'intérieur d'une cavité carrée soumise à un chauffage différencié,
 - fusion d'un MCP contenu dans des récipients de diverses formes,
 - fusion et solidification d'un MCP accolée à une paroi d'air.

Chaque sous-dossier contient quatre fichiers : *NEWTON_case.edp* est le fichier principal du script FreeFem++, *param_phys.inc* définit les paramètres physiques spécifique à chaque cas

d'étude,

param_phys_commun.inc définit les paramètres physiques à tout les cas test et *param_num.inc* les paramètres numériques.

A.2. Paramètres d'entrée

Les paramètres physiques et les paramètres liés à l'exécution sont séparés en trois fichiers. (1) Le fichier *param_phys.inc* contient les descriptions physiques du problème spécifiques au cas d'étude. Il est structuré en utilisant trois macros distinctes, permettant de choisir entre une résolution physique ou adimensionnée. Les données physiques requises pour la résolution sont définies spécifiquement pour l'une de ces configurations. Voici une description détaillée du fichier :

- **typeU** : est le type d'élément fini pour la vitesse, avec les valeurs possibles P_2 ou P_1 ,
- **typeP** : est le type d'élément fini pour la pression, avec les valeurs possibles P_1 ou P_0 ,
- **typeT** : est le type d'élément fini pour la température, avec les valeurs possibles P_2 ou P_1 ,
- **Torder** : est l'ordre de précision du schéma d'intégration temporelle, avec des valeurs possibles de 1 (schéma d'Euler) ou 2 (schéma de Gear),
- **scalAdim** : définit les échelles caractéristiques du problème. Les valeurs possibles 1, 2 ou 3 correspondent au choix suivant des échelles caractéristiques (Danaila et al., 2014) :

$$(1) : V_{ref}^{(1)} = \frac{\nu_l}{H} \implies t_{ref}^{(1)} = \frac{H^2}{\nu_l} \implies Re = 1, \quad (A.1)$$

$$(2) : V_{ref}^{(2)} = \frac{\alpha}{H} \implies t_{ref}^{(2)} = t_{ref}^{(1)} \mathcal{P}r \implies Re = 1/\mathcal{P}r, \quad (A.2)$$

$$(3) : V_{ref}^{(3)} = \frac{\nu_l}{H} \sqrt{\frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{P}r}} \implies t_{ref}^{(3)} = t_{ref}^{(1)} \sqrt{\frac{\mathcal{P}r}{\mathcal{R}a}} \implies Re = \sqrt{\frac{\mathcal{R}a}{\mathcal{P}r}}, \quad (A.3)$$

- **FromPhysics** : cette macro permet de spécifier les données physiques du problème ainsi que les grandeurs utilisées pour l'adimensionnement
 - $\mathbf{T}_{hot,phys}, \mathbf{T}_{cold,phys}, \mathbf{T}_{f,phys}$: sont les températures physiques,
 - $k_s, c_s, \rho_s, \alpha_s$: sont les grandeurs physiques du problèmes dans la partie solide
 - $k_l, c_l, \rho_l, \alpha_l$: sont les grandeurs physiques du problèmes dans la partie liquide
 - $\beta, h_{sl}, \nu_l, \mu_l$: sont les grandeurs physiques du problèmes
 - $L_{ref}, T_{ref}, t_{ref}$: sont les grandeurs de références utilisées pour l'adimensionnement,
 - **dt** : est le pas de temps,
 - $t_{max,phys}$: est le temps final,
 - $\mathbf{x}_l, \mathbf{x}_r, \mathbf{y}_l, \mathbf{y}_r$: sont les valeurs définissant les dimensions de la cavité $[x_l, x_r] \times [y_l, y_r]$,
- **Physics** : cette macro permet d'entrer les valeurs physiques spécifiques au problème,

- $\mathbf{T}_{hot}, \mathbf{T}_{cold}, \mathbf{T}_f$: sont les températures physiques,
- $k_s, c_s, \rho_s, \alpha_s$: sont les grandeurs physiques du problèmes dans la partie solide
- $k_l, c_l, \rho_l, \alpha_l$: sont les grandeurs physiques du problèmes dans la partie liquide
- $\beta, h_{sl}, \nu_l, \mu_l$: sont les grandeurs physiques du problèmes
- \mathbf{dt} : est le pas de temps,
- \mathbf{t}_{max} : est le temps final,
- $\mathbf{x}_l, \mathbf{x}_r, \mathbf{y}_l, \mathbf{y}_r$: sont les valeurs définissant les dimensions de la cavité $[x_l, x_r] \times [y_l, y_r]$,
- **Adim** : cette macro permet de définir les grandeurs adimensionnées utilisées dans le modèle.
 - $\mathbf{T}_{hot}, \mathbf{T}_{cold}, \mathbf{T}_f$: sont les températures adimensionnées,
 - $\mathcal{Pr}, \mathcal{Ra}, \mathcal{Re}$: sont les nombres de Prandtl, de Rayleigh et de Stefan,
 - $k^*, c^*, \rho^*, \alpha^*$: sont les grandeurs adimensionnées pour le démarrage avec la solution exacte du problème de Stefan,
 - \mathbf{dt} : est le pas de temps adimensionné,
 - \mathbf{t}_{max} : est le temps final adimensionné,
 - $\mathbf{x}_l, \mathbf{x}_r, \mathbf{y}_l, \mathbf{y}_r$: sont les valeurs adimensionnées définissant la taille de la cavité $[x_l, x_r] \times [y_l, y_r]$,
- **bc** : est la macro définissant les conditions aux limites de vitesse (\mathbf{u}) et de température (T).
- **epsi** : est la demi-largeur ε de la mushy-region. Valeur par défaut = 0,01,
- **assmooth** : est la nombre de régularisation pour le démarrage "smooth".

(2) Le fichier *param_phys_commun.inc* contient les descriptions physiques commun à tout les cas d'étude.

Adimensionnement des paramètres pour l'option FromPhysics :

- $\mathbf{T}_{hot}, \mathbf{T}_{cold}, \mathbf{T}_f$: calcul les températures adimensionnées à partir des températures physiques définis dans le fichier *param_phys.inc*,
- $\mathcal{Pr}, \mathcal{Ra}, \mathcal{Re}$: calcul les nombres de Prandtl, de Rayleigh et de Stefan à partir des données physiques rentrées dans le fichier *param_phys.inc*,
- $k^*, c^*, \rho^*, \alpha^*$: calcul les rapport entre les grandeurs solides et liquides rentrées dans le fichier *param_phys.inc*,
- \mathbf{dt} : est le pas de temps adimensionné,
- \mathbf{t}_{max} : calcul le temps final adimensionné à partir des données physiques rentrées dans le fichier *param_phys.inc*,

Constantes du modèle :

- $R_u, R_s, f_B, C_l, C_s, K_s, K_l$: sont les constantes du problèmes définis dans le tableau 2.1.

Paramètres du maillage :

- **nbseg** : est le nombre de segments pour la discrétisation le long des directions x et y ,
- **errh** : est le niveau d'erreur d'interpolation,
- **hmin, hmax** : sont respectivement la taille minimale et la taille maximale des arêtes,
- **adaptratio** : est le ratio pour un lissage déterminé de la métrique. Pour une valeur inférieure à 1.1, aucun lissage n'est effectué. Valeur par défaut = 1.5,
- **nbvx** : est le nombre maximal de sommets autorisé dans le générateur de maillage. Valeur par défaut = 50000.

Macro du problème de Stefan :

- F_{ex} : est la macro
- F_{zero} : est la macro

(3) Le fichier *param_num.inc* contient les paramètres qui contrôlent l'exécution.

Paramètres de redémarrage :

- **Nsave** : la solution est sauvegardée tous les $Nsave$ pas de temps dans le dossier Data. Les champs de température et de vitesse sont enregistrés dans les dossiers Tecplot et Medit, tandis que la fraction liquide, le nombre de Nusselt et l'apport de chaleur accumulée sont enregistrés dans le dossier Gnuplot.
- **Nrestart** : Les fichiers de redémarrage (maillage et solution) sont enregistrés tous les $N!restart$ pas de temps. Les solutions aux itérations actuelles et précédentes, le temps CPU, l'apport thermique accumulé Q_0 et le pas de temps dt sont sauvegardés dans le dossier RST.
- **Ncondt** : permet à l'utilisateur d'arrêter l'exécution et d'enregistrer correctement la solution.
Le fichier OUTPUT/zz.condt est lu tous les $Ncondt$ pas de temps : si l'utilisateur remplace la valeur "0" dans ce fichier par "1", l'exécution est arrêtée. Il s'agit d'une solution simple permettant à l'utilisateur d'arrêter proprement le travail. Valeur par défaut = 20.
- **Nremesh** : le maillage est adapté toutes les $Nremesh$ itérations. Si ce paramètre est fixé à "1", le maillage est adapté à chaque pas de temps.
- **IFrestart** : est un booléen qui contrôle la sélection de l'état initial.
 $IFrestart = 0$, la condition initiale est intégrée dans le code pour chaque cas de test.
 $IFrestart > 0$, (valeurs entières positives) le champ de solution précédemment calculé à l'itération $IFrestart$ est chargé à partir du dossier OUTPUT/Data-RST-filenameRST/RST, avec filenameRST une variable sélectionnant le dossier de redémarrage.
 $IFrestart < 0$, (valeurs entières négatives), le même principe de chargement d'une solution est utilisé, mais à partir du dossier INIT (voir Fig. A.1). Les champs de solution stockés dans ce dossier peuvent provenir de différents calculs antérieurs (e. g. une solution en régime permanent ou, pour l'eau, le champ de convection naturelle avant congélation).

Paramètres de Newton :

- **epsconv** : est la valeur du critère d'arrêt pour les cas stationnaires,
- **gamma** : est le paramètre de pénalisation dans l'équation (2.48). Valeur par défaut = 10^{-7} ,

- **tolNewton** : est la tolérance de Newton ξ_N (voir Eq. (2.55)). Valeur par défaut = 10^{-6} ,
- **newtonMax** : limite le nombre maximal d'itérations dans l'algorithme de Newton (2.55).
Valeur par défaut = 50,

Paramètres de sortie :

- **dircase** : est le nom du dossier de sortie,
- **fcase** : est le nom du préfixe pour les fichiers de sortie.
- **Tecplot, Medit, Gnu** : correspondent au nom du logiciel de visualisation à utiliser; le format des sorties écrites dans OUTPUT/Data (voir Fig. A.1) est défini en conséquence. Les fichiers du dossier Tecplot peuvent être facilement lus avec Paraview.

A.3. Sorties

Lorsqu'un calcul démarre, le répertoire OUTPUT est créé. La structure du dossier est illustrée à la figure A.1. Les solutions obtenues sont enregistrées dans le dossier OUTPUT/Data. En fonction du format de sortie sélectionné par l'utilisateur, les fichiers de données sont générés dans des dossiers spécifiques pour être visualisés avec : Tecplot, Paraview, Gnuplot ou Medit. Les fichiers *.gms* (maillage) et *.rst* (champs) sont générés dans le dossier RST pour permettre le redémarrage du calcul. Un fichier *.echo* contenant un résumé des principaux paramètres, des informations sur l'exécution et les noms des fichiers de sortie est enregistré dans le dossier RUNPARAM. Ce répertoire contient également une copie des fichiers de paramètres *.inc*, ce qui permet d'identifier facilement chaque cas et de préparer une éventuelle réexécution du même cas. Nous fournissons également dans le dossier Figures des présentations prêtes à l'emploi pour ces logiciels de visualisation.

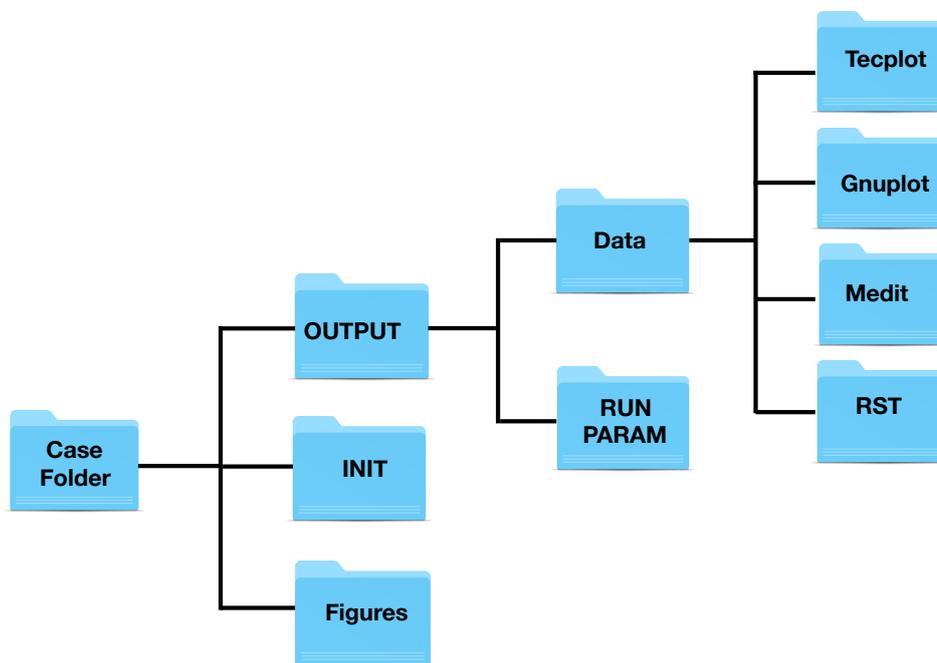


FIGURE A.1. – Structure of each Test-case folder.

Bibliography

- International Energy Agency. Buildings. <https://www.iea.org/reports/buildings>, 2022.
- F. Agyenim, N. Hewitt, P. Eames and M. Smyth. A review of materials, heat transfer and phase change problem formulation for latent heat thermal energy storage systems (LHTESS). *Renewable and sustainable energy reviews*, 14(2) :615–628, 2010.
- R. Akhilesh, A. Narasimhan and C. Balaji. Method to improve geometry for heat transfer enhancement in PCM composite heat sinks. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48 :2759–2770, 06 2005.
- R. Aldbaissy, F. Hecht, G. Mansour and T. Sayah. A full discretisation of the time-dependent Boussinesq (buoyancy) model with nonlinear viscosity. *Calcolo*, 55(4) :49, 2018. ISSN 0008-0624; 1126-5434/e. Id/No 44.
- Abdalla Alrashdan, Ahmad Turki Mayyas and Said Al-Hallaj. Thermo-mechanical behaviors of the expanded graphite-phase change material matrix used for thermal management of Li-ion battery packs. *Journal of Materials Processing Technology*, 210(1) :174–179, 2010. ISSN 0924-0136. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0924013609002672>.
- Mohammad Azad and Dominic Groulx. A Study of the Melting of n-Octadecane in Horizontal Cylindrical Annuli : Onset of Convection and Global Melting. 05 2021.
- Mohammad Azad, Dominic Groulx and Adam Donaldson. Natural convection onset during melting of phase change materials : Part I - Effects of the geometry, Stefan number, and degree of subcooling. *International Journal of Thermal Sciences*, 170 :107180, 2021. ISSN 1290-0729. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1290072921003410>.
- Y. Belhamadia, A. Fortin and T. Briffard. A two-dimensional adaptive remeshing method for solving melting and solidification problems with convection. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 76 :1–19, 2019.
- Y. Belhamadia, A. Fortin and E. Chamberland. Anisotropic mesh adaptation for the solution of the Stefan problem. *Journal of Computational Physics*, 194(1) :233–255, 2004.
- Y. Belhamadia, A. Kane and A. Fortin. An enhanced mathematical model for phase change problems with natural convection. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling, Series B*, 2 (2012).

- Y. Belhamadia, A. S. Kane and A. Fortin. An enhanced mathematical model for phase change problems with natural convection. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, 3(2) :192–206, 2012.
- O. Bertrand, B. Binet, H. Combeau, S. Couturier, Y. Delannoy, D. Gobin, M. Lacroix, P. Le Quéré, M. Médale, J. Mencinger et al. Melting driven by natural convection A comparison exercise : first results. *International Journal of Thermal Sciences*, 38(1) :5–26, 1999.
- P. Biwole, D.Groulx, F. Souayfane and T. Chiu. Influence of Fin Size and Distribution on Solid-Liquid Phase Change in a Rectangular Enclosure. *Applied Thermal Engineering*, 124 :433–446, 02 2018.
- F. Brezzi. On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers. *Revue française d'automatique, informatique, recherche opérationnelle. Analyse numérique*, 8(R2) :129–151, 1974.
- F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and hybrid finite element methods*, volume 15. New York etc. : Springer-Verlag, 1991. ISBN 0-387-97582-9.
- E. Burman and M. A. Fernández. Galerkin finite element methods with symmetric pressure stabilization for the transient Stokes equations : stability and convergence analysis. *SIAM J. Numer. Anal.*, 47(1) :409–439, 2009. ISSN 0036-1429 ; 1095-7170/e.
- Y. Cao and A. Faghri. A numerical analysis of phase change problem including natural convection. *ASME Journal of Heat Transfer*, 112 :812–815, 1990.
- Y. Cao, A. Faghri and W. S. Chang. A numerical analysis of Stefan problems for generalized multi-dimensional phase-change structures using the enthalpy transforming model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(7) :1289–1298, 1989.
- T. Chacón Rebollo, M. Gómez Mármol, V. Girault and I. Sánchez Muñoz. A high order term-by-term stabilization solver for incompressible flow problems. *IMA J. Numer. Anal.*, 33(3) : 974–1007, 2013. ISSN 0272-4979 ; 1464-3642/e.
- P. Ciarlet Jr. Analysis of the Scott-Zhang interpolation in the fractional order Sobolev spaces. *J. Numer. Math.*, 21(3) :173–180, 2013. ISSN 1570-2820.
- Ionut Danaila Cécile Legrand, Francky Luddens. On the convergence of a low order Lagrange finite element approach for natural convection problems. 2022.
- H. Beirão da Veiga. A new approach to the L^2 -regularity theorems for linear stationary non-homogeneous Stokes systems. *Portugaliae Mathematica*, 54, 01 1997.
- I. Danaila, R. Moglan, F. Hecht and S. Le Masson. A Newton method with adaptive finite elements for solving phase-change problems with natural convection. *J. Comput. Physics*, 274 :826–840, 2014.
- J. de Frutos, B. García-Archilla, V. John and J. Novo. Error analysis of non inf-sup stable discretizations of the time-dependent Navier-Stokes equations with local projection stabilization. *IMA J. Numer. Anal.*, 39(4) :1747–1786, 2019. ISSN 0272-4979 ; 1464-3642/e.

- J. Deteix, A. Jendoubi and D. Yakoubi. A Coupled prediction scheme for solving the Navier-Stokes and convection-diffusion equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 2014.
- Ibrahim Dincer. On thermal energy storage systems and applications in buildings. *Energy and Buildings*, 34(4) :377–388, 2002. ISSN 0378-7788. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378778801001268>.
- Wenhui Du, Sheng Chen and Guoqiang Wu. A new lattice Boltzmann method for melting processes of high Prandtl number phase change materials. *Journal of Energy Storage*, 41 :103006, 2021. ISSN 2352-152X. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X21006927>.
- A. Ern and J-L. Guermond. *Finite elements : Theory, applications, implementation*, volume 36. Berlin : Springer, 2002. ISBN 3-540-42615-9/pbk.
- M. Fabbri and V. R. Voller. The phase-field method in the sharp interface limit : a comparison between model potential. *Journal of Computational Physics*, 130 :256–265, 1997.
- DK Gartling. *Finite element analysis of convective heat transfer problems with change of phase*. Rapport technique, Sandia Labs., Albuquerque, N. Mex.(USA), 1978.
- M. Gharebaghi and I. Sezai. Enhancement of Heat Transfer in Latent Heat Storage Modules with Internal Fins. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications* :749–765, 04 2008.
- V. Girault and P.-A. Raviart. *Finite element methods for Navier-Stokes equations*. Springer Verlag, Berlin, 1986a.
- V. Girault and P-A. Raviart. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations : Theory and Algorithms*, volume 5 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer Berlin / Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1986b. ISBN 9783642648885.
- Zhen-Xiang Gong and Arun S. Mujumdar. Enhancement of energy charge-discharge rates in composite slabs of different phase change materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39(4) :725–733, 1996. ISSN 0017-9310. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0017931095001794>.
- Dominic Groulx and Pascal Biwole. Solar PV Passive Temperature Control Using Phase Change Materials. page 15 p., 01 2014.
- F. Hecht. New developments in Freefem++. *Journal of Numerical Mathematics*, 20 :251–266, 2012.
- F. Hecht, O. Pironneau, A. Le Hyaric and K. Ohtsuke. *FreeFem++ (manual)*. www.freefem.org, 2007.
- Johan Heier, Chris Bales and Viktoria Martin. Combining thermal energy storage with buildings - a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 42 :1305–1325, 2015. ISSN 1364-0321. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032114009629>.

- S.F. Hosseinizadeh, F.L. Tan and M. Moosania. Experimental and numerical studies on performance of PCM-based heat sink with different configurations of internal fins. *Applied Thermal Engineering - APPL THERM ENG*, 31 :3827–3838, 12 2011.
- M.J. Huang, P.C. Eames and B. Norton. Thermal regulation of building-integrated photovoltaics using phase change materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47 : 2715–2733, 06 2004.
- Rongzong Huang, Huiying Wu and Ping Cheng. A new lattice Boltzmann model for solid-liquid phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 59 :295–301, 2013. ISSN 0017-9310. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931012009830>.
- Nasiru I. Ibrahim, Fahad A. Al-Sulaiman, Saidur Rahman, Bekir S. Yilbas and Ahmet Z. Sahin. Heat transfer enhancement of phase change materials for thermal energy storage applications : A critical review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 74 :26–50, 2017. ISSN 1364-0321. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032117301739>.
- Peter Jany and Adrian Bejan. Scaling theory of melting with natural convection in an enclosure. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31(6) :1221–1235, 1988. ISSN 0017-9310. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0017931088900658>.
- E. Javierre, C. Vuik, F.J. Vermolen and S. van der Zwaag. A comparison of numerical models for one-dimensional Stefan problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 192(2) :445–459, 2006. ISSN 0377-0427. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042705003730>.
- Benjamin J. Jones, Dawei Sun, Shankar Krishnan and Suresh V. Garimella. Experimental and numerical study of melting in a cylinder. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(15) :2724–2738, 2006. ISSN 0017-9310. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931006000573>.
- Tobias Jonsson. On the one dimensional Stefan problem : with some numerical analysis. Master's thesis, Umeå University, 2013.
- Moe Kabbara, Ali Kheirabadi and Dominic Groulx. Numerical Modelling of Natural Convection Driven Melting for an Inclined/Finned Rectangular Enclosure. 07 2016.
- Babak Kamkari and Hossein Shokouhmand. Experimental investigation of phase change material melting in rectangular enclosures with horizontal partial fins. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 78 :839–851, 2014. ISSN 0017-9310. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931014006450>.
- Babak Kamkari, Hossein Shokouhmand and Frank Bruno. Experimental investigation of the effect of inclination angle on convection-driven melting of phase change material in a rectangular enclosure. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 72 :186–200, 2014. ISSN 0017-9310. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931014000428>.

- T. Kashiwabara, I. Oikawa and G. Zhou. Penalty method with P1/P1 finite element approximation for the Stokes equations under the slip boundary condition. *Numer. Math.*, 134(4) : 705–740, 2016. ISSN 0029-599X; 0945-3245/e.
- A. C. Kheirabadi and D. Groulx. The Effect of the Mushy-Zone Constant on Simulated Phase Change Heat Transfer. In *Proceedings of CHT-15, ICHMT International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer, Ichmt Digital Library Online*. Begel House Inc., 2015.
- A. Kowalewski and D. Gobin. *Phase change with convection : modelling and validation*. Springer, 2004.
- CE Krill Iii and L-Q Chen. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase-field model. *Acta materialia*, 50(12) :3059–3075, 2002.
- Abdelouhab Labihi, Façal Aitlahbib, Hassan Chehouani, Brahim Benhamou, Mohammed Ouikhalfan, Cristiana Croitoru and Ilinca Nastase. Effect of phase change material wall on natural convection heat transfer inside an air filled enclosure. *Applied Thermal Engineering*, 126 :305–314, 2017. ISSN 1359-4311. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431117305203>.
- M. Lacroix and M. Benmadda. Numerical Simulation of Natural Convection-Dominated Melting and Solidification from a Finned Vertical Wall. *Numerical Heat Transfer Part A - Applications*, 31 :71–86, 01 1997.
- G. Lamé and B. P. Clapeyron. Mémoire sur la solidification par refroidissement d’un globe liquide. In *Annales Chimie Physique*, volume 47, pages 250–256, 1831.
- P. Le Queré. Accurate solutions to the square thermally driven cavity at high Rayleigh number. *Computational Fluids*, 20 :24–41, 1991.
- J. Li and Y. He. A stabilized finite element method based on two local Gauss integrations for the Stokes equations. *J. Comput. Appl. Math.*, 214(1) :58–65, 2008. ISSN 0377-0427.
- Yang Liu, Ruowei Zheng and Ji Li. High latent heat phase change materials (PCMs) with low melting temperature for thermal management and storage of electronic devices and power batteries : Critical review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 168 :112783, 2022. ISSN 1364-0321. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032122006670>.
- K. Luo, F-J. Yao, H-L. Yi and H-P. Tan. Lattice Boltzmann simulation of convection melting in complex heat storage systems filled with phase change materials. *Applied Thermal Engineering*, 86 :238–250, 2015.
- Z. Ma and Y. Zhang. Solid velocity correction schemes for a temperature transforming model for convection phase change. *International Journal For Numerical Methods Heat Fluid Flow*, 16(11) :204–225, 2006.
- K Morgan. A numerical analysis of freezing and melting with convection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 28(3) :275–284, 1981.

- E. Di Nezza, G. Palatucci and E. Valdinoci. Hitchhiker's guide to the fractional Sobolev spaces. *Bulletin des Sciences Mathématiques*, 136 :521–573, 07 2012.
- R. Nourgaliev, H. Luo, B. Weston, A. Anderson, S. Schofield, T. Dunn and J-P. Delplanque. Fully-implicit orthogonal reconstructed Discontinuous Galerkin method for fluid dynamics with phase change. *Journal of Computational Physics*, 305 :964–996, 2016.
- M. Okada. Analysis of heat transfer during melting from a vertical wall. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 27 :2057–2066, 1984.
- N. Ouertatani, N. Ben Cheikh, B. Ben Beya and T. Lili. Numerical simulation of two-dimensional Rayleigh-Bénard convection in an enclosure. *Comptes Rendus Mécanique*, 336 :464–470, 2008.
- A. Quarteroni and A. Valli. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. Springer-Verlag, Berlin and Heidelberg, 1994.
- Rakondrandisa. *Modélisation et simulation numérique des matériaux à changement de phase*. PhD thesis, Université de Rouen Normandie, 2019.
- A. Rakotondrandisa, G. Sadaka and I. Danaila. A finite-element toolbox for the simulation of solid-liquid phase-change systems with natural convection. *Computer Physics Communications*, 253 :107188, 2020.
- G. Sadaka, A. Rakotondrandisa, P-H. Tournier, F. Luddens, C. Lothodé and I. Danaila. Parallel finite-element codes for the simulation of two-dimensional and three-dimensional solid-liquid phase-change systems with natural convection. *Computer Physics Communications*, 257 :107492, 2020.
- Arunava SenGupta, Begoña Santillana, Seetharaman Sridhar and Michael Auinger. Transient effect of fluid flow on dendrite growth direction in binary Fe-C alloys using phase field in OpenFOAM. *JOM*, 71 :3876–3884, 2019.
- Shadab Shaikh and Khalid Lafdi. Effect of multiple phase change materials (PCMs) slab configurations on thermal energy storage. *Energy Conversion and Management*, 47(15) : 2103–2117, 2006. ISSN 0196-8904. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890405003444>.
- N. Sharifi, T. Bergman and A. Faghri. Enhancement of PCM melting in enclosures with horizontally-finned internal surfaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer - INT J HEAT MASS TRANSFER*, 54 :4182–4192, 09 2011.
- V. Shatikian, G. Ziskind and R. Letan. Numerical Investigation of a PCM-Based Heat Sink with Internal Fins. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48 :3689–3706, 08 2005.
- Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno and Tomohiro Takaki. Solidification in a supercomputer : from crystal nuclei to dendrite assemblages. *Jom*, 67 :1793–1804, 2015.

- Pushpendra Kumar Singh Rathore, Shailendra Kumar Shukla and Naveen Kumar Gupta. Potential of microencapsulated PCM for energy savings in buildings : A critical review. *Sustainable Cities and Society*, 53 :101884, 2020. ISSN 2210-6707. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210670719314477>.
- Joseph Stefan. Über einige probleme der theorie der wärmeleitung. *Sitzungber., Wien, Akad. Mat. Natur*, 98 :473–484, 1889.
- F. Stella and M. Giangi. Modelling Methodologies for Convection-Diffusion Phase-Change Problems. In A. Kowalewski and D. Gobin, editors, *Phase change with convection : modelling and validation*, pages 219–272. Springer, 2004.
- Abdel Hassan Sweidan, Yousef Heider and Bernd Markert. Modeling of PCM-based enhanced latent heat storage systems using a phase-field-porous media approach. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 32, 05 2020.
- Luc Tartar. *An introduction to Sobolev spaces and interpolation spaces*, volume 3. Springer Science & Business Media, 2007.
- R. Temam. *Navier-Stokes equations and nonlinear functional analysis*. SIAM, Philadelphia, 1983.
- Holavanahalli S Udaykumar, Wei Shyy and Madhukar M Rao. Elafint : a mixed Eulerian–Lagrangian method for fluid flows with complex and moving boundaries. *International journal for numerical methods in fluids*, 22(8) :691–712, 1996.
- Salih Ozen Unverdi and Grétar Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100(1) :25–37, 1992. ISSN 0021-9991. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002199919290307K>.
- V. R. Voller, M. Cross and N. C. Markatos. An enthalpy method for convection/diffusion phase change. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 24 :271–284, 1987.
- V. R. Voller, P. Felix and C. R. Swaminathan. Cyclic phase change with fluid flow. *Int. Journ. of Num. Methods for Heat and Fluid Flow*, 6 :57–64, 1996.
- V. R. Voller and C. Prakash. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30 :1709–1719, 1987.
- S. Wang, A. Faghri and T. L. Bergman. A comprehensive numerical model for melting with natural convection. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53 :1986–2000, 2010a.
- S. Wang, A. Faghri and T. L. Bergman. Numerical modeling of alternate melting and solidification. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 58(6) :393–418, 2010b.
- J. Woodfield, M. Alvarez, B. Gómez-Vargas and R. Ruiz-Baier. Stability and finite element approximation of phase change models for natural convection in porous media. *J. Comput. Appl. Math.*, 360 :117–137, 2019. ISSN 0377-0427.

- Rongda Ye, Wenzhu Lin, Kunjie Yuan, Xiaoming Fang and Zhengguo Zhang. Experimental and numerical investigations on the thermal performance of building plane containing $\text{CaCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ /expanded graphite composite phase change material. *Applied Energy*, 193 :325–335, 2017. ISSN 0306-2619. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030626191730185X>.
- Huibin Yin, Xuenong Gao, Jing Ding and Zhengguo Zhang. Experimental research on heat transfer mechanism of heat sink with composite phase change materials. *Energy Conversion and Management*, 49(6) :1740–1746, 2008. ISSN 0196-8904. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890407003846>.
- Y. Zhang, Y. Hou and J. Zhao. Error analysis of a fully discrete finite element variational multiscale method for the natural convection problem. *Comput. Math. Appl.*, 68(4) :543–567, 2014. ISSN 0898-1221.