

MICMCP

TITRE DU PROJET:

Utilisation de Méthodes d'Identification pour la Caractérisation de Matériaux à Changement de Phases (MCP)

IDENTIFICATION DU PROJET

Edition : 2010

Partenaire (organisme) coordinateur : **LaTEP** Université de Pau

Autres partenaires (organismes) du projet : **LGCgE** Université Artois (Béthune), **CETHIL INSA** Lyon

Projet labellisé par le(s) pôle(s) de compétitivité :

Contact : Jean Pierre DUMAS mail : jean-pierre.dumas@univ-pau.fr

Date de début / date de fin du projet : Décembre 2010 – Décembre 2013

ELEMENTS FINANCIERS

Budget total du projet (€)	dont Aide ANR (€)	Nombre de personnes.an
1400362	685110	96,8 (+60 1Thèse + 2 PostDoc)

RESUME DU PROJET

Les bâtiments représentent aujourd'hui environ 42% de l'énergie totale finale consommée en France et 23% des émissions de CO₂. Le confort et l'efficacité thermique sont principalement liés à l'inertie thermique du bâtiment. Celle-ci peut être largement augmentée par l'utilisation de Matériaux à Changement de Phase (MCP). L'autre atout de ces matériaux concerne le stockage d'énergie thermique jour-nuit.

Les MCP présentent une forte densité de stockage d'énergie, grâce à la chaleur latente de transformation. La modélisation du comportement énergétique et thermique des bâtiments intégrant des MCP passe par la connaissance fine du processus de transition de phase. Les codes de calcul commerciaux utilisés par les professionnels du bâtiment utilisent souvent des caractéristiques apparentes qui sont mal évaluées par des pratiques actuelles. Il est toutefois indispensable de déterminer avec précision ces caractéristiques thermophysiques (chaleurs spécifiques et chaleur latente notamment ...) afin que les résultats numériques soient représentatifs des phénomènes physiques.

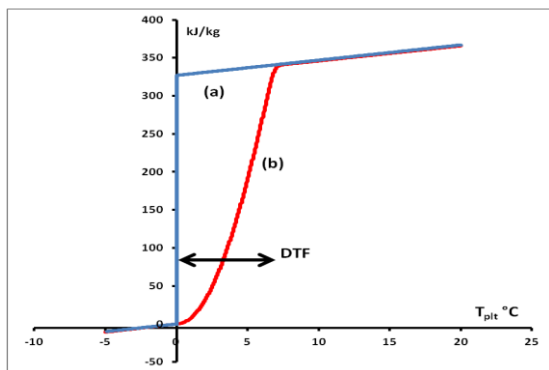
Les méthodes précédemment employées, notamment de la calorimétrie, ne sont pas suffisamment exactes; c'est pourquoi dans le cadre du projet MICMCP, nous nous proposons de travailler à la caractérisation des Matériaux à Changement de Phase par des méthodes d'identification (méthodes inverses ou algorithmes génétiques(AG)) qui donneront des résultats plus conformes à la physique des changements de phases. Nous proposons l'identification par des expériences sur des échantillons de tailles et de complexité croissantes: des petits échantillons homogènes étudiés principalement en calorimétrie, des échantillons macroscopiques (fraction de litre) étudiés avec des cellules de laboratoire finement instrumentées ou sur des maquettes permettant d'étudier les MCP dans leur configuration commerciale (par exemple 1m x 1m). Enfin, il sera évalué l'influence d'une plus correcte



détermination des propriétés thermophysiques en application des logiciels classiques de thermique du bâtiment.

De toutes ces études, il sera tiré un protocole d'expériences qui entrera dans la procédure d'évaluation technique des composants des industriels du bâtiment intégrant des MCP

ILLUSTRATIONS



Enthalpie d'un corps pur : (a) correcte
(b) « incorrecte » après DSC mal interprétée

Enveloppe PLEXIGLAS® et instrumentation pour la caractérisation du MCP

PUBLICATIONS – COMMUNICATIONS MAJEURES

Reuves internationales à comité de lecture

GIBOUT S., FRANQUET E., DUMAS J.P., BEDECARRATS J.P

Comparison of different modelings of pure substances during melting in a DSC experiment
Thermochimica Acta 528 (2012) 1– 8

FRANQUET E., GIBOUT S., BÉDÉCARRATS J.P., HAILLOT D., DUMAS J.P., *Inverse method for the identification of the enthalpy of phase change materials from calorimetry experiments*, Thermochimica Acta 546 (2012) 61– 80

Conférences internationales:

CÀILEAN A., ZALEWSKI L., JOULIN A., LASSUE S., CHARTIER T.

Étude thermique comparative de deux mortiers dont l'un contient des matériaux à changement de phase
X^{ème} Colloque Interuniversitaire Franco-Québécois sur la Thermique des Systèmes, 20-22 Juin 2011, Saguenay

FRANQUET E., GIBOUT S., BEDECARRATS J.P., DUMAS J.P

Identification of the enthalpy of binary phase change materials by generic algorithm from calorimetry experiments Eurotherm Seminar n° 93 Bordeaux 16-18th Nov. 2011

ARID A., TITTELEIN P., ZALEWSKI L., NAJI H., LASSUE S.

Thermophysical Characterization of Phase-Change Materials with fluxmetrics measures - Preliminary study
InnoStock 2012 -- The 12th International Conference on Energy Storage, INNO-SP-53, 16-18 May 2012, Lleida, Spain

GIBOUT S., MARECHAL W., FRANQUET E., BEDECARRATS J.P., HAILLOT D., DUMAS J.P.

Determination of the enthalpy of phase change materials by inverse method from calorimetric experiments. Applications to pure substances or binary solutions.
6th European Thermal Sciences Conference Eurotherm 12, Poitiers-Futuroscope 4-7th September 2012



Conférences nationales avec referees :

GIBOUT S., FRANQUET E., DUMAS J.P., BEDECARRATS J.P.

Détermination de l'enthalpie de fusion de solutions par une méthode inverse à partir d'expériences simulées de calorimétrie.

SFT 2011 Perpignan 24-26 Mai 2011 texte ° 239

DUMAS J.P., GIBOUT S., ZALEWSKI L., JOHANNES K., FRANQUET E., LASSUE S., BEDECARRATS J.P., TITTELEIN P.

Nécessité de l'interprétation correcte de la calorimétrie pour l'utilisation des Matériaux à Changement de Phases (MCP)

SFT 2012, Congrès Français de Thermique, BORDEAUX, 25 mai au 1er juin 2012, pages 575-582

BREVETS

FAITS MARQUANTS

En cohérence avec le programme annoncé dans le projet initial, le **LaTEP** s'est focalisé sur l'identification des propriétés caractéristiques des Matériaux à Changement de Phases (MCP) par des méthodes calorimétriques, et plus particulièrement l'enthalpie massique en fonction de la température $h(T)$.

Dans un premier temps, il a été développé un modèle numérique 2D permettant de prévoir la forme des thermogrammes par l'analyse des phénomènes de transferts thermiques internes liés au changement d'état. Ce modèle a été testé et validé avec les résultats obtenus par des expériences de calorimétrie dans le cas de corps purs (eau, mercure, acide benzoïque) dont $h(T)$ est donnée par une fonction type Heaviside et de solutions binaires (H_2O/KCl et H_2O/NH_4Cl à différentes concentrations) dont le diagramme de phase et donc $h(T)$ peuvent s'exprimer facilement par la thermodynamique.

Le modèle a ensuite été utilisé dans le cadre d'une méthode d'identification des propriétés caractéristiques des matériaux par des méthodes inverses, plus particulièrement pour la détermination de la fonction enthalpie massique $h(T)$ en fonction de la température. Plusieurs méthodes différentes d'inversion ont été évaluées (Levenberg-Marquardt, algorithme génétique (AG) et simplexe).

Un travail de réduction de modèle (2D -1D), dans le but de diminuer les temps de calculs, a également été mené.

Au **LGCgE** le travail du Post-Doc (12 mois) a notamment permis de développer un modèle numérique, basé sur la méthode enthalpique, nécessaire au dimensionnement de cellules (enveloppes) macroscopiques parallélépipédiques destinées à la caractérisation des MCP. Une étude paramétrique numérique a permis de définir deux types de dimensions de cellules dans les cas précis où seuls les transferts thermiques par conduction sont présents lors de la caractérisation du MCP et dans le cas où la convection s'ajoute. Cette étude paramétrique s'est faite en considérant un MCP pur (octadécane). Une fois les dimensions connues des cellules, celles-ci ont été fabriquées et des fluxmètres spécifiques à dimension ont été réalisés. De nombreux essais expérimentaux ont été effectués afin de caractériser le matériau constituant les cellules (plexiglas) et les propriétés thermophysiques du MCP. Les essais sont très encourageants et montrent de très bons résultats. Des essais par PIV ont également été réalisés afin de suivre expérimentalement le changement d'état du matériau.

Ces essais sont le sujet de caractérisations plus poussées à partir de méthodes inverses et serviront à la validation de modèles numériques (méthode Lattice Boltzmann dans notre cas).

Parallèlement, une étude numérique a été effectuée sur un mortier à base cimentaire contenant des MCP encapsulés. Cette étude numérique s'est appuyée sur les résultats des essais expérimentaux présentés au congrès Franco-Québécois de Juin 2011. Un développement de ce procédé est à l'étude en vue d'une intégration comme paroi stockeuse d'un mur solaire. Pour sa caractérisation, des plaques échangeuses de grandes dimensions (1m x 1m) ont été conçues, fabriquées et seront utilisées afin de caractériser les matériaux du génie civil intégrant des MCP. L'intérêt de ce dispositif est de pouvoir caractériser les matériaux sous la forme et dans les conditions d'utilisation future.



Pour sa part le **CETHIL** s'est intéressé à la simulation thermique et dynamique du changement d'état du matériau à changement de phase dans les capsules de calorimètre de type micro-DSC – échantillon de l'ordre de 400mg. Le but de ces simulations est de quantifier l'impact des mouvements convectifs, dans la phase liquide, sur les échanges de chaleur au niveau des parois.

Le modèle développé – modèle axisymétrique - est un modèle hybride Lattice Boltzmann Method (LBM) – Différences Finies. Le couplage entre les deux modèles se fait par l'intermédiaire de la force de Boussinesq et du transport convectif de l'énergie.

Ce modèle a été validé par comparaison à des données issues de la littérature dans les cas d'une cavité différentiellement chauffée avec changement de phase et également dans le cas d'un écoulement de Poiseuille axis-symétrique. La prochaine étape consiste à appliquer ce modèle aux capsules de micro-DSC afin d'évaluer l'importance des différents types de transferts de chaleur dans de tels systèmes.

Le **CETHIL** s'est aussi intéressé à la modélisation du changement d'état dans le cadre d'un volume d'échantillon de l'ordre du litre. Le modèle développé est également basé sur la méthode LBM mais en coordonnées cartésiennes. Deux MCP ont été simulés, le premier est le n-octadécane et le second un acide gras. Ces modèles seront validés grâce aux résultats issus du banc expérimental PIV/LIF développé dans le cadre d'un projet ANR précédent et adapté aux besoins de ce projet.

Enfin les travaux sur deux modèles de comportement énergétique des bâtiments ont débuté dans l'environnement DYMOLA. Le premier est un modèle enthalpique dans lequel la capacité thermique est la dérivée de l'enthalpie par rapport à la température tandis que le second, calcule la variation d'enthalpie en fonction de la fraction liquide. Ces modèles ont été confrontés à des données de la littérature afin de les valider et une étude est actuellement en cours afin d'évaluer l'indépendance au maillage et donc la stabilité du modèle.

RETOMBÉES PRÉVISIBLES

Du point de vue industriel, le développement d'une méthode de caractérisation fiable permettant une représentation correcte des phénomènes physiques peut avoir une incidence marquée sur le jeu des acteurs. Ainsi, les industriels pourraient mieux diffuser leur produit sur le marché du bâtiment. Les bureaux d'études disposeraient de modèles fiables d'utilisation de MCP et contribueraient à la propagation de ce type de matériaux. De plus tous ces travaux peuvent s'appliquer dans d'autres domaines utilisant le stockage thermique par chaleur latente (froid industriel, solaire concentré, chauffe-eau (normaux ou solaires) contenant des MCP, les piles à combustibles ou les pompes à chaleur échangeant avec un stockage à MCP, les panneaux solaires thermiques ou photovoltaïques protégés par des MCP...).

VERROUS RESTANT À LEVER

Il n'y a pas de verrous particuliers. Il s'agit de poursuivre le travail. Au **LaTEP** les travaux (Thèse en cours) continuent selon deux axes. Le premier concerne le recensement des sources d'imprécision sur les estimations. La finalité est premièrement de savoir si le résultat de l'estimation est fiable mais également de pouvoir définir un protocole expérimental (vitesse, température, masse, ...) permettant de minimiser l'erreur. Le second axe vise à généraliser la modélisation à des matériaux industriels ayant une enthalpie $h(T)$ quelconque.

Au **LGCgE** des expériences normalisées sur des matériaux industriels en plaques de grandes dimensions devraient permettre la caractérisation des MCP à partir de mesures de flux.

Au **CETHIL** les modèles seront couplés à des modèles de bâtiment afin de déterminer l'influence des hypothèses de modélisation et de la qualité de la caractérisation des MCP.

