

Intégration d'un modèle simplifié de matériau à changement de phase dans une plate-forme d'aide à la conception énergétique de bâtiments.

Alain Guiavarch¹, Denis Bruneau², Jean-Luc Dauvergne², Elena Palomo Del Barrio², Bruno Peuportier¹, Franck Clottes³

¹ Centre Energétique et Procédés, Mines ParisTech, 60 boulevard Saint Michel, 75272 Paris

² Laboratoire TREFLE, ENSAM, Esplanade des Arts et Métiers, 33405 Talence Cedex

³ Cellule ECOCAMPUS, ENSAM, Esplanade des Arts et Métiers, 33405 Talence Cedex.

RESUME.

L'intégration de matériau à changement de phase (MCP) dans l'enveloppe d'un bâtiment constitue une solution pour améliorer la performance thermique de celui-ci, notamment en termes de confort d'été. Les professionnels ont besoin d'outils adaptés permettant de dimensionner des enveloppes intégrant ce type de matériau et d'évaluer leur impact sur la consommation d'énergie et le confort thermique. Des travaux sont actuellement en cours pour intégrer un modèle MCP dans l'outil de simulation thermique PLEIADES-COMFIE distribué par la société IZUBA. Il s'agit d'un modèle simplifié de calcul de stockage d'énergie par chaleur latente. Ce modèle est couplé avec le modèle d'enveloppe du bâtiment présent dans COMFIE. Une démarche de validation qualitative du modèle couplé obtenu est proposée pour une paroi située entre l'extérieur et l'intérieur d'un bâtiment ; celle-ci est menée par comparaison avec des simulations effectuées sur un modèle détaillé mis en œuvre récemment au laboratoire TREFLE (UMR CNRS 8508).

MOTS-CLÉS : matériau à changement de phase, simulation thermique, bâtiment.

ABSTRACT.

The integration of phase change material (PCM) in the building envelope is considered as a solution to improve the thermal performance of the building, especially for the thermal comfort in summer. Professionals need appropriate tools to design envelopes integrating this kind of material and to assess the impact on the energy consumption and the thermal comfort. A MCP model is being integrated in the commercialised simulation tool PLEIADES-COMFIE distributed by the company IZUBA. This is a simplified model which calculates the stored energy by latent heat. This model is coupled to the thermal model of the building envelope implemented in COMFIE. The resulting model is applied to the study of an external building wall. Simulation results are given, and a comparison is performed with simulations resulting from a detailed model we recently developed in our laboratory (TREFLE - UMR CNRS 8508).

KEYWORDS : phase change material, thermal simulation, building.

1. INTRODUCTION

L'emploi de matériau à changement de phase (MCP) dans un bâtiment peut remplacer avantageusement d'autres matériaux traditionnels comme le béton par exemple pour créer de l'inertie thermique ; l'utilisation de ce type de matériau est ainsi à la fois une voie d'amélioration du confort thermique du bâtiment et une voie de réduction des besoins en énergie de celui-ci. Elle apporte aux professionnels du bâtiment (architectes, bureaux d'étude) de nouvelles possibilités concernant la conception de la structure et de l'enveloppe des constructions actuelles et futures.

Il existe de nombreux matériaux à changement de phase solide-liquide, organiques tels que les paraffines ou inorganiques tels que les sels hydratés (Zalba et al., 2003). Ces matériaux peuvent être classifiés suivant leur température de fusion, leur chaleur latente de changement de phase ainsi que leurs caractéristiques thermophysiques classiques. Pour diverses raisons (corrosion engendrée par leurs présences, tenue mécanique des matériaux les contenant, vieillissement propre, inflammabilité, plage de température en inadéquation avec le confort thermique requis à l'intérieur du bâtiment), ces MCP ne sont pas tous utilisables dans l'enveloppe d'un bâtiment (Zhang et al., 2007). Les choix de valeurs thermophysiques retenus pour effectuer les simulations présentées ci-après correspondent à un matériau constitué de micro-capsules de paraffines insérées dans une plaque de plâtre.

Plusieurs travaux ont déjà consisté à modéliser des matériaux à changement de phase intégrés au bâtiment (Ahmad et al., 2006) (Koschenz, 2004) (Kuznik et al., 2008) (Ibanez et al., 2005). Les travaux présentés ici s'inscrivent dans la même thématique ; ils ont pour objectif d'intégrer ces matériaux dans une plate-forme d'aide à la conception énergétique des bâtiments, PLEIADES-COMFIE, largement répandue chez les professionnels en France (architectes, bureaux d'étude).

La méthodologie employée pour atteindre cet objectif est exposée, après une présentation succincte de la structure de la plate-forme logicielle PLEIADES-COMFIE et plus particulièrement de l'outil de simulation thermique qu'elle contient (COMFIE). Un modèle simplifié du matériau à changement de phase et son couplage avec COMFIE sont ensuite exposés. Il est ensuite qualitativement comparé, pour un cas simple de paroi homogène, à un modèle détaillé.

2. PLATE-FORME DE SIMULATION

2.1. MODELISATION D'ENVELOPPE DU BATIMENT ET METHODE DE RESOLUTION

La plate-forme de simulation PLEIADES-COMFIE est constituée d'un ensemble logiciel dédié à l'aide à la conception énergétique et environnementale. Une synthèse précise des possibilités offertes par cette plateforme ainsi qu'un descriptif de son fonctionnement sont présentés par (Salomon *et al.*, 2005) et (Peuportier, 2006). Nous en donnons ici les grandes lignes, de façon à ce que le lecteur appréhende précisément la méthode employée pour l'intégration d'un composant MCP pour laquelle nous avons optée.

Les différentes étapes de modélisation et de préparation à la simulation thermique d'un bâtiment dans l'outil de simulation thermique COMFIE sont (i) le maillage de l'enveloppe du bâtiment, (ii) l'établissement d'un modèle discrétisé (volumes finis) dans chacune des zones thermiques, (iii) la réduction de modèle par analyse modale, (iv) le couplage entre zones thermiques.

Pour chaque paroi, le transfert de chaleur par conduction est supposé mono-dimensionnel, la température dans chaque maille est supposée uniforme et les propriétés thermophysiques sont supposées constantes. COMFIE est une plateforme dédiée aux concepteurs de bâtiments ; de ce fait COMFIE optimise de façon automatique le nombre de mailles pour chaque paroi en fonction de la masse thermique de celle-ci : une paroi « légère » comporte 1 maille et une paroi « lourde » 3 mailles. Elle adapte d'autre part les tailles de mailles à la physique des transferts de chaleur : les températures de zones de bâtiment étant généralement plus influencées par les températures des faces internes de l'enveloppe (et en conséquence par les puissances de chauffe ou de climatisation du bâtiment) que par les faces externes, les mailles intérieures des parois sont plus fines que les mailles extérieures. Ces

deux paramètres de discrétisation spatiale des parois (nombre et épaisseur des mailles) sont fixés par défaut dans COMFIE mais peuvent être modifiés. Afin de mieux cerner la pertinence de ce modèle, des simulations sont effectuées sur une paroi contenant une maille et sur une paroi contenant trois mailles.

L'écriture d'un bilan thermique dans chaque zone thermique et la discrétisation de celui-ci conduit à un système d'équations de la forme :

$$\begin{aligned} C\dot{T} &= AT + EU \\ \dot{Y} &= JT + GU \end{aligned} \quad [1]$$

où	T	:	champ discrétisé des températures
	U	:	vecteur des sollicitations thermiques (liées au climat, aux apports internes...)
	Y	:	vecteur des sorties (températures de zone)
	C	:	matrice diagonale des capacités thermiques
	A	:	matrice des termes d'échange entre mailles
	E	:	matrice d'échange entre les mailles et les sollicitations
	J	:	matrice reliant les sorties aux températures de maille
	G	:	matrice reliant les sorties aux sollicitations thermiques

Ce système d'équations est ensuite réduit puis les zones thermiques du bâtiment sont couplées.

2.2. MISE EN ŒUVRE INFORMATIQUE SELON UNE APPROCHE ORIENTÉE OBJETS

L'implémentation informatique du modèle et de son algorithme de résolution utilise une programmation orientée objets. Le choix initial de cette forme de programmation pour COMFIE a pour avantage une intégration facilitée de tout nouveau composant non initialement prévu : il suffit de créer un nouvel objet informatique, objet qui a la possibilité d'échanger des variables avec le modèle de bâtiment (objet « bâtiment »). Dans ce qui suit (implémentation d'un modèle MCP dans COMFIE), (i) l'objet « bâtiment » fournit à l'objet « composant MCP » la température de la maille de la paroi dans laquelle est intégré le matériau à changement de phase, (ii) l'objet « composant MCP » fournit à l'objet « bâtiment » le terme source-puits thermique correspondant au stockage-déstockage de chaleur généré par le changement de phase.

3. INTEGRATION DU MODELE SIMPLIFIE DE MCP DANS LA PLATE-FORME DE SIMULATION

3.1. MODELE SIMPLIFIE DE MCP

Le composant MCP est un matériau bi-composant (dénommé « Matériau » par la suite) formé d'un matériau support (dénommé « Base » ci-après) et d'un matériau à changement de phase (dénommé « MCP » ci-après). Le comportement du « MCP » en fonction de la température constitue une caractéristique essentielle du modèle. La figure 1 représente l'évolution choisie pour la fraction massique de MCP fondu C_f en fonction de la température T ; celle-ci est linéaire. La modélisation thermique retenue dans ce qui suit s'appuie par ailleurs sur les hypothèses suivantes :

- le MCP est uniformément réparti dans le Matériau (Base+MCP),

- la masse volumique, la conductivité, ainsi que la chaleur massique du MCP sont indépendantes de son état (liquide ou solide).

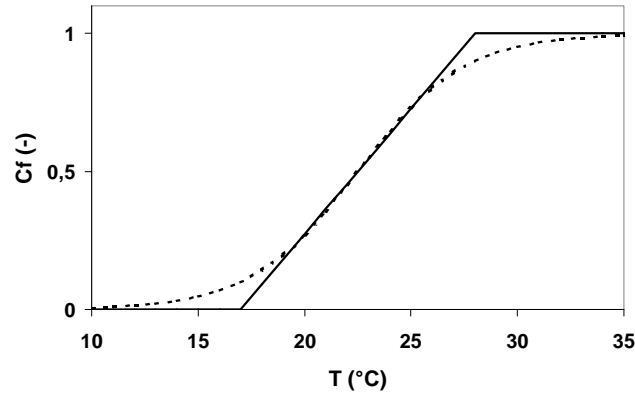


Figure 1 : évolution de la fraction massique de MCP fondu en fonction de la température

(Ligne continue : modèle simplifié – Pointillés : modèle détaillé)

Avec ces hypothèses, la conductivité, la masse thermique par unité de volume et la masse volumique du Matériau (indice M) s'exprime comme suit en fonction des conductivités, chaleurs massiques et masses volumiques de la base (indice B) et du MCP (indice MCP) :

$$\begin{aligned}\lambda_M &= (1 - \varepsilon)\lambda_B + \lambda_{MCP}\varepsilon \\ \rho_M C_{pM} &= (1 - \varepsilon)\rho_B C_{pB} + \varepsilon\rho_{MCP}C_{pMCP} \\ \rho_M &= (1 - \varepsilon)\rho_B + \varepsilon\rho_{MCP}\end{aligned}\quad [2]$$

où ε est la fraction volumique de MCP dans le Matériau.

L'écriture d'un bilan thermique dans un volume élémentaire d'épaisseur dx et de surface dS (transferts conductifs uni-dimensionnels suivant l'axe x) amène à (L_f étant la chaleur latente de fusion du matériau à changement de phase) :

$$dS \left[-\lambda_M \frac{dT}{dx}(x,t) + \lambda_M \frac{dT}{dx}(x+dx,t) \right] = dS \left[\rho_M C_{pM} + \rho_{MCP} L_f \frac{dC_f}{dT} \varepsilon \right] \frac{dT}{dt}(x,t) dx \quad [3]$$

c'est-à-dire

$$\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{a_{\text{eq}}} \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = 0 \quad \text{où} \quad a_{\text{eq}} = \frac{\lambda_M}{\rho_M C_{pM} + \rho_{MCP} L_f \frac{dC_f}{dT} \varepsilon} \quad [4]$$

Dans l'équation [4], la dérivée de la fraction massique de MCP fondu par rapport à la température dC_f/dT est une constante (pente de la courbe présentée figure 1). Ainsi a_{eq} est une fonction de la température T constante par morceaux qui traduit une notion de diffusivité thermique équivalente intégrant le changement de phase. L'équation [4] est complétée par des conditions aux limites traduisant les échanges superficiels, convectifs et radiatifs, de chaque côté de la paroi.

3.2. COUPLAGE AVEC LE MODELE THERMIQUE DE BATIMENT

L'intégration du modèle simplifié de MCP dans le modèle d'enveloppe de bâtiment existant dans COMFIE nécessite la discrétisation de l'équation [4] par volumes finis ; pour chaque maille d'une paroi (de température T), l'équation discrétisée obtenue fait intervenir les densités de flux de chaleur échangé par cette maille avec ses deux éléments voisins, de températures T_1 et T_2 :

$$e(\rho_M C_{p_M} + \rho_{MCP} L_f [dC_f / dt] \varepsilon) \frac{\Delta T}{\Delta t} = h_1(T_1 - T) + h_2(T_2 - T) ; \quad [5]$$

les éléments voisins sont : la (ou les) maille(s) adjacente(s) dans la paroi et/ou le (ou les) environnement(s) adjacent(s) à la paroi. Dans l'équation précédente,

- h_1 (resp. h_2) est le coefficient d'échange équivalent avec la maille adjacente ou l'environnement adjacent. Ce coefficient fait intervenir la conductivité du Matériau (c.f. équation [2]) quand il traduit la conduction entre deux mailles ; il intègre les échanges par convection et rayonnement quand il traduit l'échange avec l'environnement de la paroi,
- Δt est le pas de temps (COMFIE impose un pas de temps minimum de 6 mn),
- ΔT est la variation de la température d'une maille donnée au cours d'un pas de temps,
- e est l'épaisseur de la maille.

Le terme de gauche de l'équation [5] (dérivée temporelle de l'énergie interne) comprend une part sensible « $e \rho_M C_{p_M} [\Delta T / \Delta t]$ » et une part latente « $e \rho_{MCP} L_f (dC_f / dt) \varepsilon [\Delta T / \Delta t]$ ». La méthode d'intégration du modèle MCP retenue ici consiste à séparer dans l'algorithme de résolution les parties sensible et latente du stockage d'énergie (ceci pour chaque maille). Cette séparation est incontournable ; en effet, COMFIE n'est apte à proposer que des composants dont les caractéristiques thermophysiques (chaleur massique, masse volumique, conductivité thermique) sont invariables au cours de la simulation. Ainsi,

- la part latente $\phi = e \rho_{MCP} L_f (dC_f / dt) \varepsilon [\Delta T / \Delta t]$ de la dérivée temporelle de l'énergie interne est calculée séparément par un objet « composant MCP » créé à cet effet, puis est fourni à l'objet « bâtiment » ;
 - l'équation [5] est modifiée : la part latente de la dérivée temporelle de l'énergie interne ϕ est rejetée au second membre (en terme source surfacique sur la maille)
- $$e \rho_M C_{p_M} [\Delta T / \Delta t] = h_1(T_1 - T) + h_2(T_2 - T) + \phi \quad [6]$$

Elle devient une équation de la chaleur discrétisée pour un mur à masse thermique par unité de volume $\rho_M C_{p_M}$ invariable associée à un second membre variable fonction de la fraction massique de MCP fondu C_f . Cette équation est résolue par le modèle d'enveloppe du bâtiment développé dans COMFIE par l'objet « bâtiment ». Cet objet « bâtiment » calcule la température de la maille T considérée puis la fournit à l'objet « composant MCP ».

Un couplage dynamique (une dizaine d'itérations à chaque pas de temps de simulation) est effectué entre l'objet « bâtiment » et l'objet « MCP ».

La méthode de résolution explicitée ci-dessus implique de modifier la structure du système d'équations [1] : le calcul du flux thermique correspondant au stockage d'énergie latente nécessite de rajouter une sortie supplémentaire dans le vecteur Y , la température de la maille correspondant au MCP (dans ce vecteur Y , seules les températures de zone du bâtiment sont initialement présentes).

D'autre part, l'objet « MCP » produit une sollicitation thermique supplémentaire (part latente de l'équation [5], fournie à la maille) qui est introduite dans le vecteur des sollicitations U .

4. COMPARAISON AVEC UN MODELE DETAILLE

4.1. PRESENTATION DU MODELE DETAILLE

Le modèle détaillé, à l'aide duquel est qualifié le modèle simplifié de MCP présenté au paragraphe précédent a été développé par Dauvergne (2008). Il est basé sur l'équation de conservation de l'énergie suivante :

$$\frac{\partial H(x,t)}{\partial t} = \lambda_B \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad [7]$$

où l'expression de l'enthalpie volumique H est

$$H = \rho_M C_{p_M} T + \varepsilon \rho_{MCP} L_f C_f \quad [8]$$

Dans ce modèle, la fraction massique fondue de matériau à changement de phase C_f varie de manière non linéaire, contrairement au modèle simplifié. Mais pour des raisons de convergence numérique, la modélisation de cette grandeur ne doit pas contenir de pente abrupte : C_f doit être une fonction continue à dérivée continue de la température T . La fonction retenue (et représentée sur la figure 1) pour décrire cette fraction massique est la suivante (Dauvergne, 2008) :

$$C_f = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{T_f - T}{\Delta T_f} \right) \right] \quad [9]$$

où $\Delta T_f = T_{inf} - T_{sup}$ et $T_f = (T_{inf} + T_{sup})/2$ et T_{inf} et T_{sup} sont respectivement les températures de début et de fin de fusion du MCP.

Une discrétisation de l'équation [7] par la méthode des volumes finis aboutit à :

$$\frac{dH(t)}{dt} = AT(t) + Bu(t) \quad [9]$$

où A est une matrice décrivant les échanges conductifs entre les nœuds de la maille, et B est une matrice qui décrit le couplage de la paroi avec son environnement.

4.2. CARACTERISTIQUES DE LA PAROI SIMULEE

Le modèle simplifié de MCP intégré dans COMFIE est comparé au modèle détaillé récemment mis en œuvre au laboratoire TREFLE par Dauvergne (2008) sur un cas simple : une paroi d'épaisseur 15 cm constituée d'une base (plâtre) dans laquelle est inséré de façon spatialement uniforme 15 % d'une paraffine micro-encapsulée. Les caractéristiques thermophysiques de ces matériaux sont rappelées dans le tableau 1 ci-dessous. La chaleur latente de fusion du MCP est $L_{MCP} = 112 \text{ kJ / kg}$.

Tableau 1 : caractéristiques thermophysiques de la paroi simulée.

	Base	MCP	Matériau
Conductivité (W/m/K)	0.35	0.2	0.3275
Masse volumique (kg/m3)	1000	640	946

Chaleur spécifique (J/kg/K)	800	1150	835
-----------------------------	-----	------	-----

Les conditions aux limites sont de type Newton des deux côtés de la paroi modélisée, l'échange avec l'environnement adjacent étant traduit de part et d'autre de cette paroi au travers de coefficients d'échanges équivalents h_1 et h_2 . Du côté « intérieur », la température est imposée et fixée à 24°C (ce qui correspond à la température de consigne à l'intérieur du bâtiment) ; du côté « extérieur », la température ambiante est donnée par un fichier météo horaire correspondant à la ville d'Agen. Les coefficients d'échange radio-convectifs sur les deux faces de la paroi sont supposés constants (8.13 W/(m².K) côté « intérieur » et 18.2 W/(m².K) « côté extérieur »).

4.3. RESULTATS DE SIMULATION ET COMPARAISON

La comparaison porte dans un premier temps sur la simulation des transferts thermiques sans prise en compte du changement de phase (c.f. figure 2-a). Le pas de temps des simulations est de 1 heure. La paroi a été discrétisée avec 1 maille puis 3 mailles pour les simulations effectuées avec le modèle simplifié et avec 15 mailles pour la simulation effectuée avec le modèle détaillé. Sont reportées sur la figure 2, sur une période de simulation de 3 jours choisie au hasard parmi les 365 jours simulés, les températures moyennes spatiales de la paroi. La figure 2-a montre qu'un modèle simplifié à 1 maille n'est pas assez précis, mais qu'un modèle à 3 mailles est bien en accord avec le modèle détaillé. Nous considérons que 3 mailles correspondent à un optimum en terme de précision et de simplification (et donc de rapidité de résolution) du problème discrétisé résolu sous COMFIE.

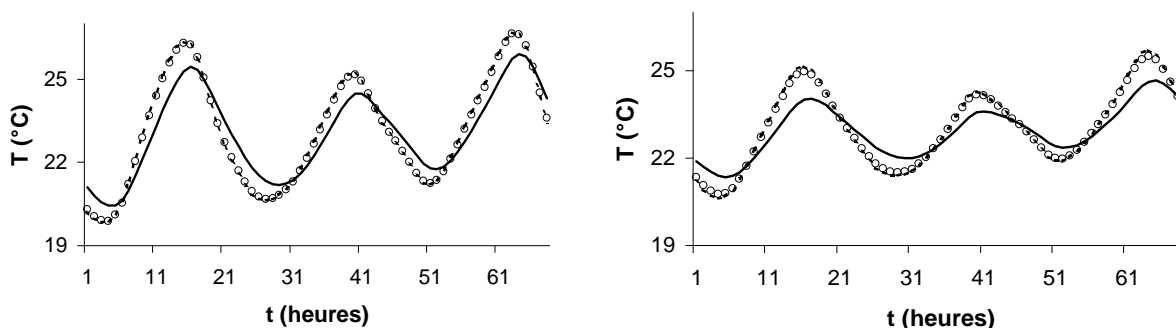


Figure 2 : température moyenne de la paroi. Ligne continue : modèle simplifié, 1 maille – Pointillés : modèle détaillé, 15 mailles – Points creux : modèle simplifié, 3 mailles.
(a) Sans changement de phase. (b) Avec changement de phase.

Dans un deuxième temps, la comparaison porte sur la simulation des transferts thermiques avec prise en compte du changement de phase (c.f. figure 2-b). Comme précédemment, 1 maille puis 3 mailles sont retenues pour les simulations effectuées avec le modèle simplifié et 15 mailles pour la simulation effectuée avec le modèle détaillé. On peut constater que le modèle à 3 mailles correspond de manière satisfaisante au modèle détaillé à 15 mailles (l'écart moyen entre les deux courbes sur une année entière de simulation avec un pas de temps d'une heure étant inférieur à 0.08°C, et l'écart

maximum étant inférieur à 0,48°C), et que le modèle à une maille reste insuffisant (avec dans ce cas un écart moyen légèrement supérieur à 0,45°C et un écart maximum légèrement supérieur à 2,13°C).

5. CONCLUSION ET PERSPECTIVE

Les travaux menés ont permis de confirmer la faisabilité du couplage d'un modèle simplifié de matériau à changement de phase avec un modèle thermique de bâtiment réduit par analyse modale. Les premières comparaisons avec un modèle détaillé ont permis d'évaluer la pertinence du modèle simplifié pour modéliser les transferts de chaleur dans une paroi contenant un matériau à changement de phase. Cette évaluation a été menée sous la forme d'une étude de sensibilité préliminaire portant sur le nombre de mailles ou encore sur la pente de la droite représentant l'évolution de la fraction massique fondue de MCP. En tout état de cause, le modèle de MCP simplifié mis en œuvre est a priori apte à être utilisé dans la plate forme de conception de bâtiments PLEIADES-COMFIE.

Remerciements : ces travaux ont été réalisés dans le cadre du projet PACIBA (Progiciels d'Aide à la Conception Intégrée du Bâtiment) financé par l'ANR dans le cadre du programme PREBAT et piloté par l'ADEME.

6. BIBLIOGRAPHIE

- Ahmad M., Bontemps A., Sallée H., Quenard D. (2006). Thermal testing and numerical simulation of a prototype cell using light wallboards coupling vacuum isolation panels and phase change material, *Energy and buildings*, vol. 38, pp 673-681.
- Dauvergne J. L. (2008). Réduction et inversion de problèmes de diffusion thermique avec changement de phase. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I.
- Ibanez M., Lazaro A., Zalba B., Cabeza L. F. (2005). An approach of PCMs in building applications using TRNSYS, *Applied Thermal Engineering*, vol. 25, pp 1796-1807.
- Koschenz M., Lehmann B. (2004). Development of a thermally activated ceiling panel with PCM for application in lightweight and retrofitted buildings, *Energy and Buildings*, vol. 36, pp 567-578.
- Kuznik F., Virgone J., Roux J. J. (2008). Energetic efficiency of room wall containing PCM wallboard : a full scale experimental investigation, *Energy and Buildings*, vol. 40, pp 148-156.
- Peuportier B., Thiers S. (2006). Des éco-techniques à l'éco-conception des bâtiments, *Journée thématique SFT-IBPSA, Le Bourget du Lac*.
- Salomon T., Mikolasek R, Peuportier B (2005). Outil de simulation thermique du bâtiment, Comfie, *Journée thématique SFT-IBPSA, La Rochelle*.
- Zalba B., Marin J. M., Cabeza L. F., Mehling H. (2003). Review on thermal energy storage with phase change: materials, heat transfer, analysis and applications, *Applied Thermal Engineering*, vol. 23, pp 251-283.
- Zhang Y., Zhou G., Lin K., Zhang Q., Di H. (2007). Application of latent heat thermal energy storage in buildings: state of the art and outlook, *Building and Environment*, vol. 42, pp 2197-2209.