

Études en régime dynamique de matériaux de stockage thermique par bilans d'énergie et d'entropie

Sébastien MEY-CLOUTIER, Régis OLIVES*, Jean-Marie MANCAUX

Laboratoire PROMES (CNRS UPR 8521) & Université de Perpignan Via Domitia
Rambla de la Thermodynamique, Tecnosud – 66100 Perpignan

*(auteur correspondant : olives@univ-perp.fr)

Résumé – Dans cette étude, nous proposons une analyse des bilans d'énergie et d'entropie afin de prendre en compte les propriétés thermophysiques et les sollicitations thermiques subies par les matériaux de stockage. L'expérience mise en jeu est rappelée, puis les résultats mesurés sont ensuite comparés à des simulations afin d'identifier les valeurs des propriétés. Une analyse de sensibilités a également été menée, afin de faire ressortir les plages temporelles adaptées à l'identification. L'influence des résistances de contact sur la génération d'entropie est également considérée.

Nomenclature (11 points, 2 colonnes)

Symboles latins

A	paramètre numérique
C_p	capacité calorifique massique, $J/(kg \cdot K)$
f_c	fonction-coût de l'optimisation
h_c	conductance de contact, $W/(m^2 \cdot K)$
k	indice spatial
L	épaisseur de l'échantillon
n	indice temporel
R_c	résistance de contact, $m^2 \cdot K/W$
S	entropie, J/K
t	variable de temps, s
T	température, K
x	variable d'espace, m

Symboles grecs

α	diffusivité thermique, m^2/s
δ	petit intervalle (pas)
Δ	variation

λ	conductivité thermique, $W/(m \cdot K)$
ρ	masse volumique, kg/m^3
φ	densité de flux, W/m^2
ϕ	flux, W

Indices

<i>bot</i>	$enx = 0$
<i>e</i>	échangé
<i>fin</i>	fin du cycle
<i>i</i>	interne
<i>top</i>	$enx = L$

Opérateurs mathématiques

∂	dérivée partielle
$\vec{\nabla}$	opérateur Nabla
\oint	intégrale sur un cycle

1. Introduction

Dans les modules de stockage thermique, les quantités d'énergie stockées ou déstockées sont directement liées aux propriétés thermophysiques des matériaux, aux propriétés d'échanges avec les sources, ainsi qu'au type de sollicitations. Ici, nous développons l'analyse des performances de stockage à partir des bilans énergétique et entropique. Un montage expérimental destiné à caractériser les matériaux de stockage a été mis au point et permet d'accéder aux irréversibilités à l'aide du traitement des températures et des flux superficiels.

Nous nous proposons d'identifier les paramètres thermophysiques à partir de cycles thermiques simples. Un cycle possible consiste à imposer une variation identique de température de part et d'autre de l'échantillon (stockage « pur ») ; un autre est basé sur une variation asymétrique de la température correspondant à un processus de transfert (voir Figure 2). L'analyse thermodynamique à l'aide du second principe permet de compléter l'analyse énergétique.

2. Étude expérimentale

L'expérience mise en œuvre a été décrite dans [1] ; nous rappelons ici les grandes lignes et les principaux résultats utilisés.

2.1. Mesures des densités de flux & températures superficielles

Le montage expérimental présenté sur la Figure 1 consiste à placer l'échantillon étudié, sous forme d'un parallélépipède carré (40mm de côté), entre deux fluxmètres intégrant des thermocouples. Cet ensemble est alors positionné entre deux plaques échangeuses (55mm de côté) reliées à des bains thermostatés, permettant le contrôle des températures.



Figure 1 : Schéma du montage expérimental

Ainsi, le matériau étudié peut être soumis à différents cycles thermiques (Figure 2) : stockage « pur », transfert « pur », ou toute autre combinaison.

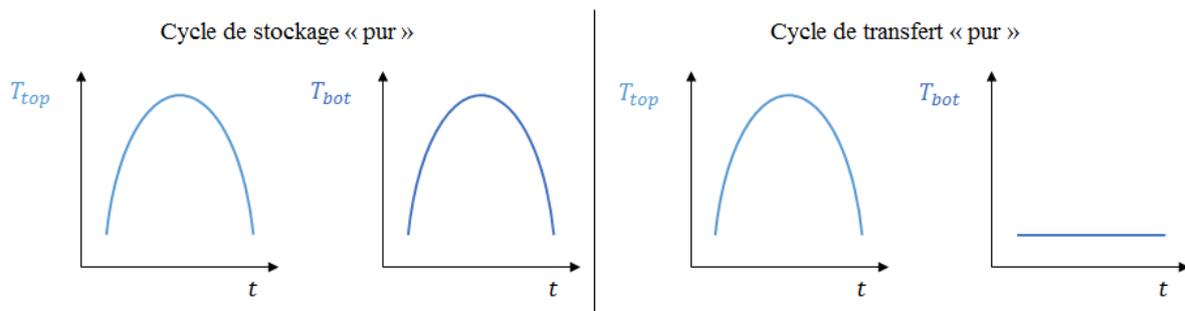


Figure 2 : Représentation qualitative des cycles thermiques subis par les échantillons

2.2. Traitement des mesures

Les flux et les températures relevés permettent d'accéder à la variation d'entropie échangée au cours des transformations subies par l'échantillon. Puisqu'il s'agit de cycles (transformations avec retour à l'état initial), cette variation est égale à l'opposé de la génération interne d'entropie :

$$\Delta S_e = \oint \left(\frac{\phi_{top}}{T_{top}} + \frac{\phi_{bot}}{T_{bot}} \right) dt = -\Delta S_i \quad (1)$$

Ce bilan entropique conduit ainsi à la détermination des irréversibilités internes liées au matériau et à la sollicitation thermique. On peut, dans le cas du transfert « pur », identifier une résistance apparente à partir de ce bilan, tel que définie par [1,3].

3. Études numériques

Deux cas d'études seront présentés ici : premièrement, un cas de stockage « pur » dont la résolution a été effectuée via le logiciel de calcul numérique Matlab ; puis un cas de transfert « pur », analysé grâce au logiciel de modélisation COMSOL Multiphysics.

3.1. Cas d'un stockage « pur »

3.1.1. Modélisation & simulation

L'échantillon est modélisé comme une couche monodimensionnelle dans laquelle l'équation de la chaleur en régime transitoire est résolue :

$$\begin{cases} \partial_t T - a \partial_{xx} T = 0 \\ \alpha = \lambda / \rho C_p \end{cases} \quad (2)$$

Cette équation est discrétisée avec la méthode des différences finies : un schéma « décentré amont » est utilisé pour le terme temporel ($\partial_t T|_n \approx (T_n - T_{n-1}) / \delta t$), et un schéma « centré » pour le terme spatial ($\partial_{xx} T|_k \approx (T_{k+1} - 2T_k + T_{k-1}) / \delta x^2$). La résolution est alors effectuée selon une méthode implicite (inversion de matrice), inconditionnellement stable selon la valeur du paramètre $A = \alpha \cdot \delta t / \delta x^2$, présentant l'avantage de travailler avec un pas de temps fixe (δt constant).

Afin de résoudre numériquement cette équation, trois conditions sont nécessaires : une condition initiale sur la température $T(x, t = 0)$, et deux conditions aux limites sur les densités de flux $\vec{\varphi}(x = 0, t)$ & $\vec{\varphi}(x = L, t)$, correspondant aux mesures effectuées à la partie 2. En première approche, la résistance de contact sera négligée ; la conductivité thermique intervenant alors dans la résolution numérique est une conductivité effective englobant les contacts thermiques en plus des phénomènes de conduction thermique dans l'échantillon.

$$\begin{cases} -\lambda \cdot \vec{\nabla}(T)|_{x=L} = \vec{\varphi}_{top}(t) \\ -\lambda \cdot \vec{\nabla}(T)|_{x=0} = \vec{\varphi}_{bot}(t) \end{cases} \quad (3)$$

La résolution s'effectue grâce au logiciel de calcul numérique Matlab, et renvoie le profil de température à l'intérieur de l'échantillon pour tous les pas de temps calculés. En sont alors extraits les profils temporels sur chacune des faces de l'échantillon, correspondant aux températures mesurées.

3.1.2. Identification

Dans le but d'identifier les propriétés thermophysiques de l'échantillon testé, une méthode numérique d'optimisation par essaim de particules a été mise en place [2]. L'objectif est de trouver la conductivité thermique (λ) et la capacité thermique volumique (ρC_p) permettant de conduire à l'égalité des profils de températures simulés, i.e. $T(x = 0, t)$ & $T(x = e, t)$, et mesurés sur l'échantillon, i.e. T_{bot} & T_{top} ; ainsi, la fonction-coût retenue à minimiser est la suivante :

$$f_c(\lambda, \rho C_p) = \sum_t (|T_{bot}(t) - T(x=0, t)| + |T_{top}(t) - T(x=L, t)|) \quad (4)$$

3.1.3. Résultats & discussion

Afin de valider cette approche, des mesures ont été effectuées sur un échantillon d'ardoise dont les propriétés thermophysiques connues sont comparées aux valeurs identifiées par l'algorithme sur deux cycles étudiés (Tableau 1) : stockage « pur » et transfert « pur » (tels que présentés qualitativement en Figure 2).

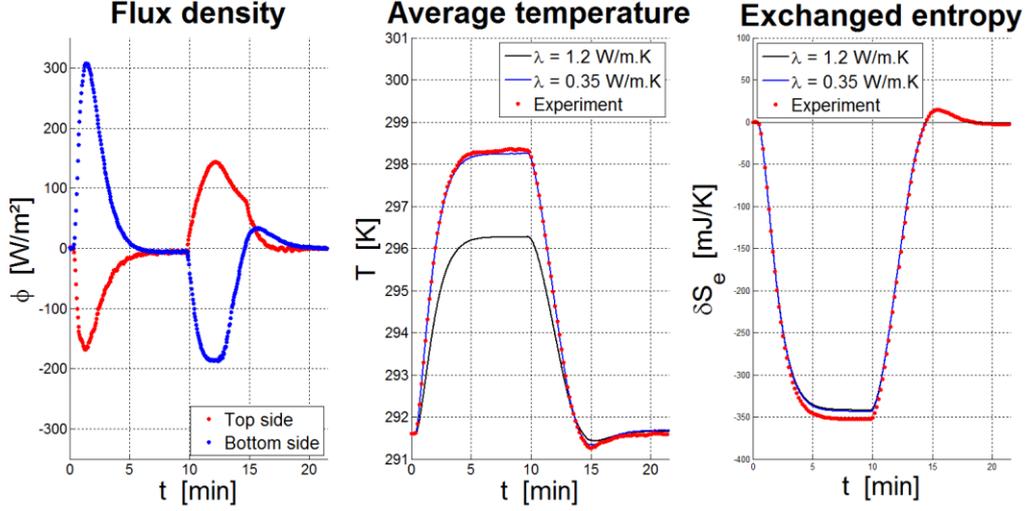


Figure 3 : Résultats numériques de l'identification sur un cycle de stockage « pur »

	Ardoise	
	Valeurs connues	Valeurs identifiées
Conductivité thermique λ [W/(m.K)]	1,2	0,35
Capacité thermique volumique ρC_p [J/(m ³ .K)]	2 112 000	1 484 870

Tableau 1 : Comparaison des valeurs des propriétés thermophysiques connues –vs– identifiées

Bilan d'entropie	
Expérience : $\Delta S_e = -2,80 \text{ mJ/K}$	Simulation (propriétés connues) : $\Delta S_i = 0,37 \text{ mJ/K}$
	Simulation (propriétés identifiées) : $\Delta S_i = 1,26 \text{ mJ/K}$

Tableau 2 : Calculs des variations d'entropie

Les valeurs de conductivité thermique étant très faibles par rapport à la valeur connue, il apparaît que les résistances de contact sont prédominantes. En supposant que ce contact est le même sur les deux faces de l'échantillon, la conductance de contact correspondante est alors :

$$\frac{L}{\lambda_{identifié}} = 2R_c + \frac{L}{\lambda_{connu}} \Rightarrow h_c = \frac{1}{R_c} = \frac{2}{L} \left(\frac{\lambda_{connu} \lambda_{identifié}}{\lambda_{connu} - \lambda_{identifié}} \right) \approx 150 \text{ W/(m}^2 \cdot \text{K)} \quad (5)$$

Afin de s'extraire de la résistance thermique induite par le mauvais contact entre les fluxmètres et l'échantillon, deux voies seront envisagées. La première consiste à insérer une pastille de graphite entre les deux surfaces en jeu. Une mesure de température serait alors ajoutée, afin de pouvoir extrapoler le flux thermique à la paroi de l'échantillon (Figure 4).

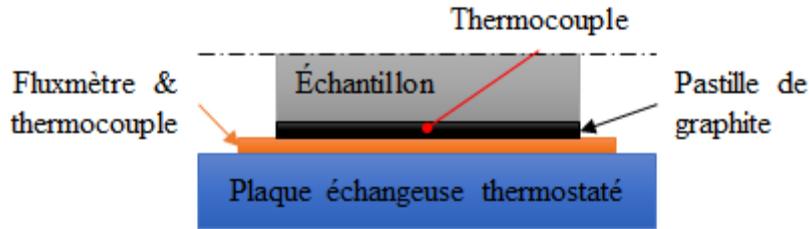


Figure 4 : Stratégie d'amélioration du contact thermique

La seconde méthode envisagée pour pallier ce problème de résistances de contact, est d'identifier leur valeur via le bilan entropique. En effet, la connaissance des densités de flux et températures superficielles permet le calcul des échanges d'entropie avec l'environnement, comme présenté en partie 2 ; d'un autre côté, il est possible de calculer la génération d'entropie interne induite par le passage du flux de chaleur conductif [3] :

$$\Delta S_i = \oint \int_0^L -\vec{\varphi} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{1}{T} \right) dx dt = \oint \int_0^L \lambda \vec{\nabla}(T) \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{1}{T} \right) dx dt = \oint \int_0^L \lambda \partial_x T \cdot \partial_x \left(\frac{1}{T} \right) dx dt \quad (6)$$

La différence entre les deux bilans d'entropie (ΔS_e obtenu avec les densités de flux et températures superficielles ; ΔS_i obtenu par l'équation ci-dessus) est imputée aux contacts thermiques de part et d'autre de l'échantillon. En supposant que la résistance thermique de contact est la même de chaque côté du matériau, il sera alors possible d'identifier sa valeur.

3.2. Cas d'un transfert « pur »

3.2.1. Modélisation et simulation

L'échantillon modélisé était constitué de deux couches d'ardoise. Dans un premier temps, la conductivité équivalente du système a été identifiée en calant les champs de températures mesurés et simulés. Ceci fait, des résistances de contact ont été implémentées sous la forme de trois fines couches de matières de conductance estimée à 520 W/(m².K) en utilisant la méthode précédemment décrite (paragraphe 3.1.3), situées à chaque interface (de part et d'autres des couches d'ardoise ainsi qu'entre elles).

Lors du cycle analysé, la température de la couche inférieure (bottom) était maintenue constante alors que la couche supérieure (top) subissait une élévation puis une diminution (voir Figure 2). La résolution numérique a conduit aux profils temporels des températures de chaque côté du bicouche, ainsi qu'au calcul de la génération d'entropie interne due à chacune des couches modélisées (5 au total : 3 pour les résistances de contact et 2 pour les échantillons d'ardoise).

3.2.2. Résultats & discussion

La Figure 5 offre une analyse temporelle de la génération d'entropie interne induite par chaque couche (normalisée par la valeur totale à la fin du cycle).

La première constatation est que la génération d'entropie interne due aux résistances de contact est du même ordre de grandeur que celle induite par les couches d'ardoise (voire supérieure dans certains cas). Comme indiqué ci-dessus, l'élévation de température se situait du côté supérieur/top des échantillons. Ainsi, au cours du temps, on peut observer quelle couche provoque une génération d'entropie et contribue, l'une après l'autre, aux irréversibilités : la résistance de contact supérieure, la couche d'ardoise supérieure, la résistance de contact intermédiaire, la couche d'ardoise inférieure, puis la résistance de contact inférieure.

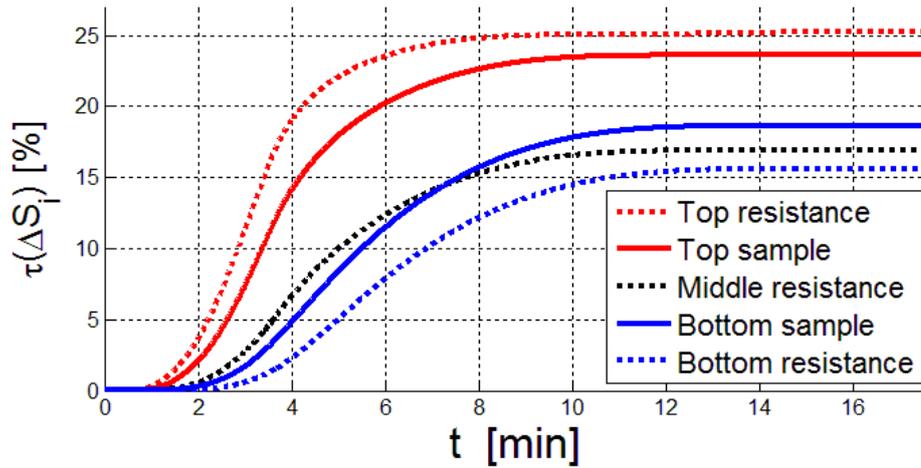


Figure 5 : Taux d'entropie interne générée par chacune des couches du système (résistances de contact en pointillés, couches d'ardoise en traits pleins)

Une fois le cycle thermique achevée (montée puis descente en température du côté supérieur), on peut noter que les plus fortes générations d'entropie ont été provoquées par la résistance de contact supérieure, qui transfère l'apport de flux à l'échantillon, et la couche d'ardoise supérieure, en raison de sa faible conductivité thermique (1,2 W/(m.K)). Notons également que durant le cycle, la résistance intermédiaire commence à générer de l'entropie avant la seconde couche d'ardoise (puisque'elle « voit » le passage du flux en premier), mais que cette dernière produit plus d'entropie en fin de cycle (à nouveau en raison de la faible conductivité thermique de l'ardoise).

3.3. Sensibilités

Un calcul de sensibilités a également été réalisé afin d'identifier la plage temporelle où les paramètres ont le plus d'influence sur les champs de température, et ainsi réduire les données expérimentales à utiliser pour l'identification (permettant aussi de réduire le temps de calcul des simulations). Pour ce faire, la variation des champs de température a été calculée pour une variation de $\pm 5\%$ de la propriété observée (λ ou ρC_p) ; ces résultats ont ensuite été normalisés, comme indiqué via l'équation 6 :

$$s(\lambda) = \frac{T(\lambda+5\%) - T(\lambda-5\%)}{(\lambda+5\%) - (\lambda-5\%)} \cdot \frac{\lambda}{T(\lambda)} \quad (6)$$

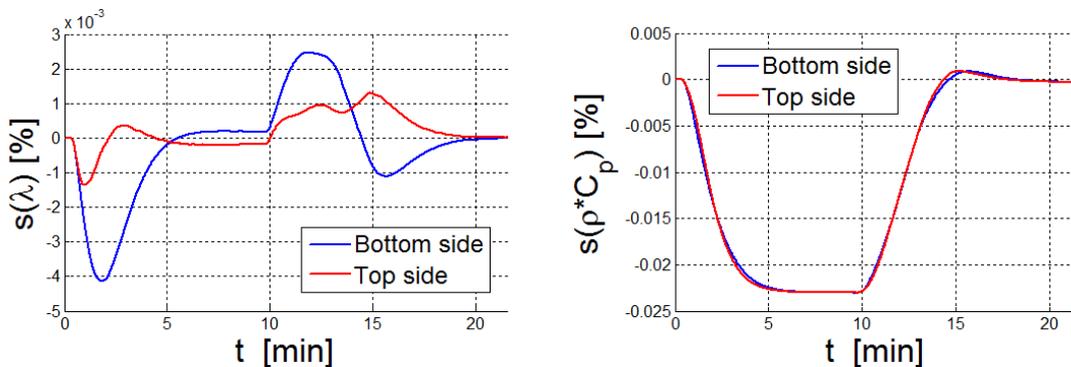


Figure 6 : Sensibilités dans le cas de stockage « pur »

Les Figures 6 et 7 permettent de rendre compte de la sensibilité, au cours du temps, aux deux paramètres étudiés. Dans le cas du cycle de stockage « pur », il apparaît que la sensibilité à la conductivité thermique est très faible (de l'ordre de 0,001%) ; tandis que pour

la capacité thermique volumique, les valeurs sont d'un ordre de grandeur supérieur (0,020%–0,025%). Ce résultat est cohérent avec le type de sollicitation thermique appliquée à l'échantillon.

Quant au cycle de transfert « pur », les sensibilités présentent un maximum correspondant à la fin de la montée en température. De fait, il sera plus pertinent de réaliser l'identification des propriétés thermophysiques sur cette plage temporelle seule (autour du « pic » ; de 3 à 6 minutes environ), plutôt que sur l'ensemble du cycle.

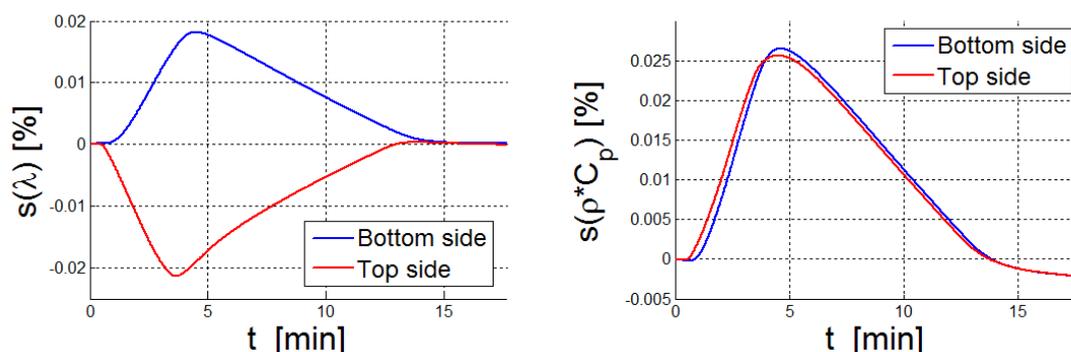


Figure 7 : Sensibilités dans le cas de transfert « pur »

4. Sources de divergences entre les bilans

Comme nous avons pu le montrer au paragraphe 3.1.3, les résistances thermiques de contact jouent un rôle prépondérant dans l'identification des propriétés, ainsi que dans la génération d'entropie. La méthode suggérée précédemment a donc été mise en œuvre, afin d'améliorer le contact. Un nouveau cycle de stockage a été appliqué, et une autre identification a été menée : le Tableau 3 en présente les résultats à comparer avec ceux du Tableau 2.

	Ardoise	
	Valeurs connues	Valeurs identifiées
Conductivité thermique λ [$W/(m \cdot K)$]	1,2	0,96
Capacité thermique volumique ρC_p [$J/(m^3 \cdot K)$]	2 112 000	1 520 109
Génération d'entropie interne ΔS_i [mJ/K]	6,12	5,59
Échange d'entropie (mesures) $-\Delta S_e$ [mJ/K]	15,9	

Tableau 3 : Résultats pour un cycle de stockage « pur » avec contacts thermiques améliorés

L'amélioration des contacts thermiques a conduit l'identification vers de meilleurs résultats, illustrant donc l'importance de ces résistances dans le comportement global de l'échantillon. Cependant, les bilans d'entropie ne bouclent pas. À ce stade, il apparaît essentiel de revenir aux hypothèses de travail et d'en vérifier la validité : notamment, concernant le caractère quasi-stationnaire des évolutions ainsi que le cyclage.

Pour ce faire, la variation totale d'entropie de l'échantillon est calculée grâce à la relation suivante :

$$dS = C_p \frac{dT}{T} \quad (7)$$

Ainsi, intégrée sur l'ensemble du volume de l'échantillon, il est possible d'obtenir la variation d'entropie au cours du temps $\Delta S(t)$ dans le cas quasi-stationnaire ; la valeur finale

permettant d'obtenir la variation totale au cours de la sollicitation. Plusieurs informations pourront alors être déduites :

- Variation totale d'entropie nulle $\Delta S(t_{fin}) = 0$: nous justifierons ainsi l'hypothèse de faire subir des cycles thermiques aux échantillons. Ainsi, si le bilan d'entropie $\Delta S_e + \Delta S_i$ n'est pas nul, cela signifiera que l'un des deux termes n'est pas convenablement calculé (source de production d'entropie non prise en compte, présence d'échange d'entropie non comptabilisé) ;
- Variation totale d'entropie non-nulle $\Delta S(t_{fin}) \neq 0$: nous ne serons pas en présence d'un cycle, ce qui justifie que le bilan d'entropie $\Delta S_e + \Delta S_i$ ne soit pas nul. Dans le cas où la variation totale correspond bien au bilan, cela signifie que l'ensemble des sources d'entropie (échange et production interne) sont correctement prises en compte ; si la variation totale et le bilan diffèrent, d'autres sources de production ou d'échanges seront à investiguer ;
- Variation d'entropie $\Delta S(t)$ et bilan d'entropie $\Delta S_e(t) + \Delta S_i(t)$ égaux à chaque pas de temps : cela signifie que les transformations subies par l'échantillon sont bien quasi-stationnaires ;
- Variation d'entropie $\Delta S(t)$ et bilan d'entropie $\Delta S_e(t) + \Delta S_i(t)$ différents à chaque pas de temps : les évolutions ne sont pas quasi-stationnaires. Quantifier cette différence permettra d'identifier les paramètres opératoires critiques (rampes de chauffe, notamment), afin de poser une limite entre les régimes quasi-stationnaire et fortement transitoire.

5. Conclusion

Les performances des modules de stockage thermique sont liées aux propriétés thermophysiques des matériaux utilisés et du type de sollicitations thermiques imposées. Ces performances peuvent être analysées à partir des irréversibilités dues au transfert de chaleur.

Dans ce travail, l'analyse des irréversibilités est basée sur le fait qu'un cycle permet, à partir des mesures de flux et de températures en paroi, d'obtenir la production d'entropie interne. Le traitement de ces températures et flux superficiels doit donc permettre d'identifier les paramètres thermophysiques. Or, l'analyse thermodynamique montre que les résistances thermiques de contact revêtent une grande importance. Il est nécessaire de réduire fortement ces résistances afin de pouvoir identifier correctement les propriétés thermophysiques. Il s'avère que, malgré un bilan énergétique validé, le bilan entropique est plus difficile à établir. Certes les résistances de contact doivent être considérées plus finement mais nous devons aussi réexaminer les hypothèses telles que la quasi-stationnarité ainsi que la précision du calcul du gradient de température intervenant dans la génération d'entropie.

Références

- [1] R. Olives, P. Neveu, R. Maza, J.-M. Mancaux, X. Py. Caractérisation de matériaux de stockage thermique par bilan d'entropie : analyse des irréversibilités. *Congrès Français de Thermique SFT*, Toulouse, 31 mai – 3 juin 2016.
- [2] R.Poli, J. Kennedy, T. Blackwell. Particle swarm optimization – An overview. *SwarmIntell* 1 (2007), 33–57.
- [3] B. Duthoit, A. Farza, P. They. Mesures de la résistance thermique effective d'une paroi homogène par traitement d'un bilan d'entropie en régime variable. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 25.8 (1982), 1199–1207.