

**Simulation numérique de matériaux à changement de phase.
Application à l'amélioration de la performance énergétique des bâtiments et des centres de données.**

Pôle de formation et de recherche : Pôle Sciences du Numérique

Ecole doctorale : MIIS (Mathématiques, Information, Ingénierie des Systèmes)

Laboratoire d'accueil : Laboratoire de mathématiques Raphaël Salem (LMRS), Université de Rouen Normandie

Equipe de recherche : EDP-CS (Equations aux dérivées partielles et calcul scientifique)

Adresse :

N° - Libellé de la voie : Avenue de l'Université, BP.12

Code postal : |7|6|8|1|0| Commune : Saint-Etienne-du-Rouvray

Nom du directeur de thèse : Ionut DANAILA (Professeur)

Téléphone : |0|2|3|2|9|5|5|2|5|0| ; |0|6|8|8|4|6|6|5|3|2|
Fixe Mobile

Mél : ionut.danaila@univ-rouen.fr

Co-encadrant de thèse : Francky Luddens (MdC, sans HDR)

Mél : francky.luddens@univ-rouen.fr

Nom du candidat (si identifié) : Cécile LEGRAND

Téléphone : |_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_| ; |_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|
Fixe Mobile

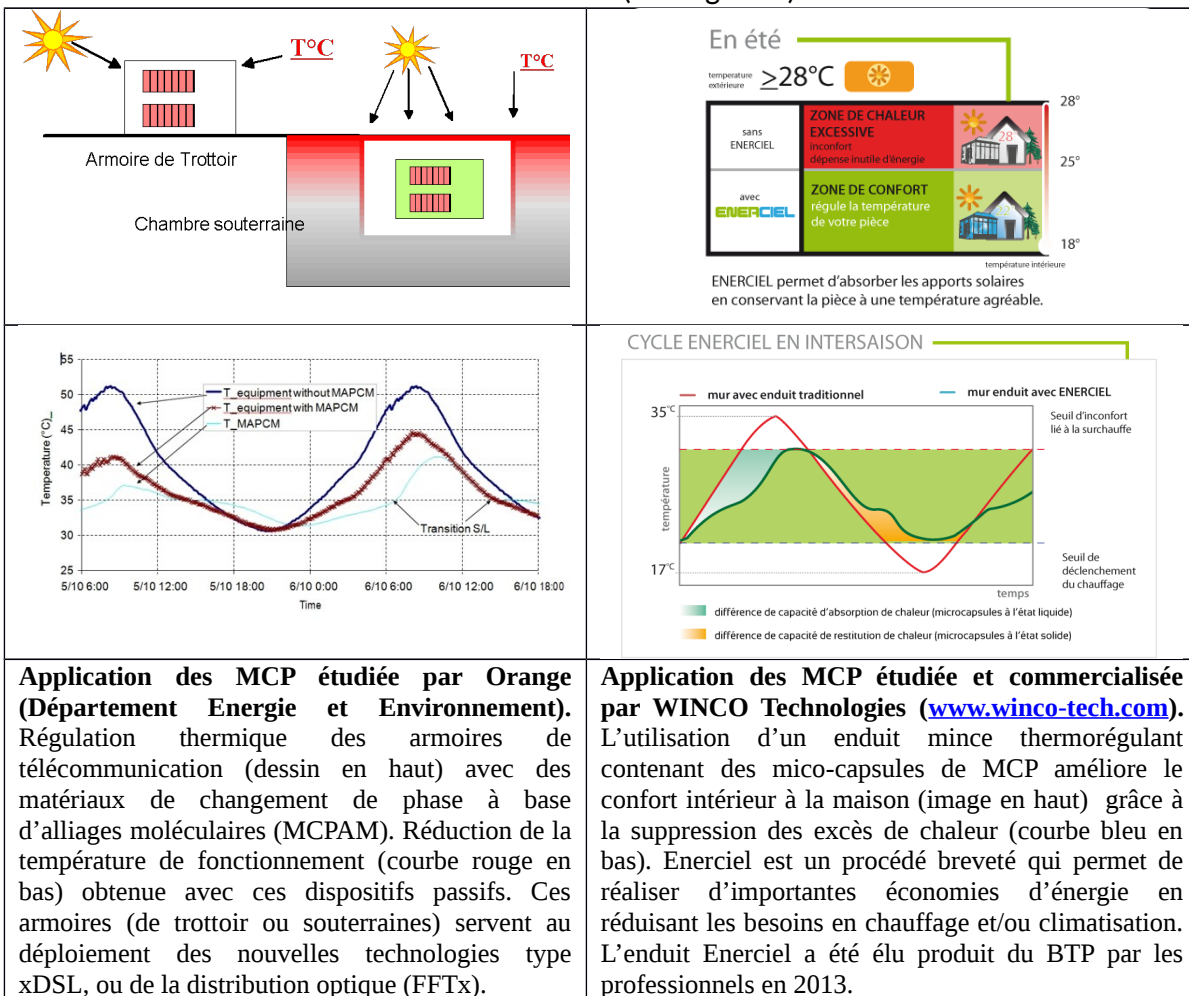
Mél : cecile.legrand2@etu.univ-rouen.fr

Période d'exécution du projet : du 01/09/2019 au 31/08/2022
 (Aucune thèse ne pourra débuter après le 31 décembre 2019)

Description du projet (3 pages maximum) : Objectifs, contexte, bibliographie, perspectives

Contexte économique et applications visées

La gestion énergétique durable est une contrainte importante dans la conception de la maison du futur et des centres de données (datacenters). L'inclusion des Matériaux à Changement de Phase (MCP) dans les murs des bâtiments ou dans l'enduit mural représente une solution innovante pour assurer une régulation thermique économique, fiable et respectueuse de l'environnement. Les MCP se liquéfient en absorbant la chaleur extérieure et la restituent lorsque la température baisse, en redevenant solides. Des solutions innovantes à base de MCP sont actuellement testées pour la régulation thermique des bâtiments : Winco Technologies commercialise un enduit mince avec des capsules de MCP pour les maisons, Orange utilise des murs avec des inclusions de MCP pour ses datacenters et ses armoires de télécommunications (voir figure 1).



Application des MCP étudiée par Orange (Département Energie et Environnement). Régulation thermique des armoires de télécommunication (dessin en haut) avec des matériaux de changement de phase à base d'alliages moléculaires (MCPAM). Réduction de la température de fonctionnement (courbe rouge en bas) obtenue avec ces dispositifs passifs. Ces armoires (de trottoir ou souterraines) servent au déploiement des nouvelles technologies type xDSL, ou de la distribution optique (FFTx).

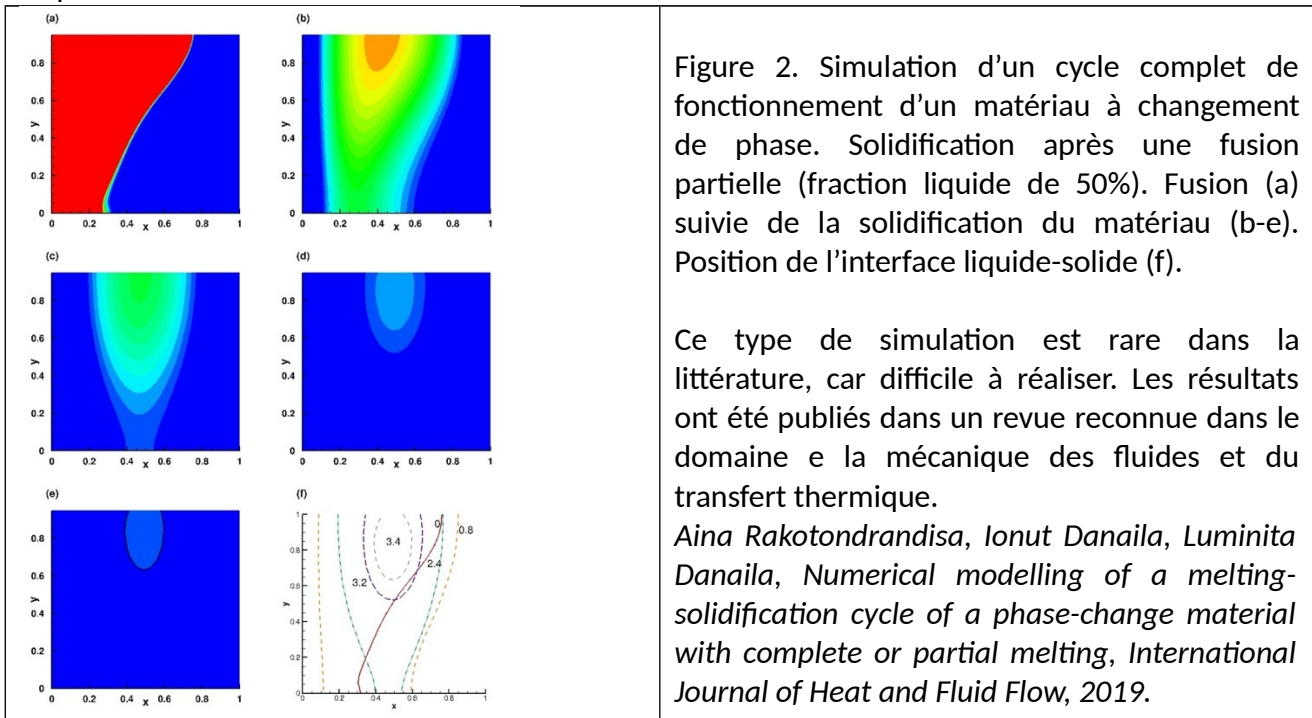
Application des MCP étudiée et commercialisée par WINCO Technologies (www.winco-tech.com). L'utilisation d'un enduit mince thermorégulant contenant des micro-capsules de MCP améliore le confort intérieur à la maison (image en haut) grâce à la suppression des excès de chaleur (courbe bleu en bas). Enerciel est un procédé breveté qui permet de réaliser d'importantes économies d'énergie en réduisant les besoins en chauffage et/ou climatisation. L'enduit Enerciel a été élu produit du BTP par les professionnels en 2013.

Néanmoins, ces dispositifs présentent un niveau de maturité encore faible et nécessitent des études approfondies. Plusieurs questions pratiques sont de grande actualité : comment les MCP réagissent à un environnement confiné, soumis à des contraintes thermiques et mécaniques fortes, quelle est la durée de vie, l'efficacité thermique de ces dispositifs après plusieurs cycles de fusion-solidification ? La réponse à ces questions demande un fort investissement en recherche (fondamentale et appliquée), notamment dans le domaine de la modélisation (physique et mathématique) et de la simulation numérique. Il s'agit de phénomènes physiques et modèles mathématiques nouveaux, qui commencent à peine à être étudiés.

Contexte scientifique et base de départ des travaux de thèse

Le projet de thèse se place dans la continuité de deux projets développés récemment au LMRS : le projet international « EPSRC Modelling of vortex rings » avec l'Université de Brighton, Royaume Uni (2014-2017) qui a permis le développement d'un code pour la simulation d'écoulements fluides et le projet M2NUM (2015-2018, financé par la région Normandie) qui a permis de développer des modèles mathématiques pour des configurations simples de MCP.

Les travaux de thèse d'Aina Rakotondrandisa (thèse financée par la région Normandie dans le cadre du projet M2NUM) ont permis le développement théorique de nouvelles méthodes numériques (discrétisation en éléments finis, algorithme d'adaptation de maillage) pour la simulation 2D de MCP. Ces méthodes ont été implémentées et testées intensivement en utilisant des codes de calcul développés dans le cadre de l'environnement FreeFem++ (logiciel libre développé à l'UPMC par une équipe de mathématiciens). Plusieurs configurations complexes de MCP (Figure 2) ont pu être ainsi simulées.



Les réalisations de cette thèse (dont la soutenance aura lieu en septembre 2019) permettront de partir d'une base solide pour attaquer les objectifs proposés pour la nouvelle thèse. En particulier, les résultats obtenus en 2018 sur la simulation 3D sont très encourageants et offrent la possibilité d'aller vers la simulation de configurations réalistes, plus proches de celles industrielles.

La nouvelle thèse se déroulera dans le cadre du nouveau projet Régional M2SiNuM (01/10/2018 - 30/09/2021). Dans le cadre de ce projet, Ionut Danaila est le responsable du partenaire LMRS, avec un axe de recherche intitulé : *Modélisation mathématique et simulation numérique pour une meilleure efficacité énergétique des bâtiments et des datacenters*. L'étudiante bénéficiera ainsi d'un environnement scientifique stimulant et de la possibilité de participer aux nombreuses collaborations nationales et internationales établies dans le cadre du projet M2SiNuM.

Objectifs de la thèse

Les travaux de thèse vont combiner la modélisation mathématique et la simulation numérique pour étudier l'intégration des matériaux à changement de phase dans des dispositifs de régulation thermique des bâtiments. Il comportera deux volets distincts :

- la simulation numérique de l'écoulement d'air et des effets thermiques à l'intérieur du bâtiment ou du datacenter (géométrie complexe, présence des circuits de

climatisation/refroidissement),

- la modélisation de la présence des MCP dans les murs des bâtiments (modèles mathématiques pour les conditions aux limites, homogénéisation mathématique pour les matériaux complexes).

La finalité du projet est l'intégration des modèles et méthodes numériques ainsi développés dans un simulateur numérique unique qui permettra de configurer de manière optimale un bâtiment ou un datacenter utilisant des solutions innovantes pour la gestion énergétique.

Programme de travail et calendrier prévisionnel

Les tâches prévisionnelles de l'étude s'articulent dans le programme de travail suivant :

1^{ère} année : étude bibliographique, prise en main des programmes FreeFem++ existants pour la simulation de MCP, simulation de nouvelles configurations (de type datacenter). L'accent sera mis sur le développement et la validation du code pour des configurations 3D, en utilisant le calcul parallèle. Ces développements seront basés sur des méthodes de décomposition de domaine à un ou plusieurs niveaux et utiliseront une bibliothèque récente (HPPDM) disponible librement dans la communauté mathématique. Les calculs seront effectués sur les machines du centre de calcul régional CRIANN.

2^{ème} année : analyse et modélisation mathématique des modèles plus réalistes pour les PCM. La formation de dendrites dans la zone mixte entre la phase solide et celle liquide sera modélisée et simulée numériquement. Le nouveau modèle sera intégré dans le code de calcul 3D. Une deuxième étape de modélisation concernera des configurations de datacenter avec des murs en MCP : des modèles simplifiés (de type conditions aux limites) seront nécessaires pour réaliser des simulations rapides et efficaces de configurations complexes.

3^{ème} année : modélisation physique et interface avec les interlocuteurs industriels. Des configurations de calcul ont été proposées par notre collaborateur industriel, Orange Labs, qui dispose de données expérimentales. Le volet optimisation des dispositifs de refroidissement sera abordé également. Cette dernière année sera aussi consacrée à la valorisation des travaux (publications et solutions industrielles) et la rédaction du manuscrit de thèse.

Valorisations envisagées :

- publications (revues de mathématiques et de physique),
- collaborations (conventions de recherche) avec les interlocuteurs industriels,
- contributions au développement local par la distribution libre (auprès des PME locales intéressées, comme AREELIS) de nos logiciels open-source pour la simulation de MCP.

Thématique détaillée au regard de l'insertion dans un ou plusieurs RIN

La thématique de la thèse s'insère dans les objectifs de recherche du Pôle *Sciences du Numérique*, Axe 5 *Structures et modèles analytiques*, en abordant les sujets de recherche suivants : modélisation mathématique, méthodes numériques et leur analyse numérique, simulation numérique, calcul parallèle. Les applications visées font partie des objectifs du projet RIN M2SiNUM (2018-2021) du Pôle *Sciences du Numérique*.

Mots-clés : Modélisation mathématique, simulation numérique, équations de Navier-Stokes, transfert de chaleur, éléments finis, décomposition de domaine, calcul parallèle.

Experts recusés :

Nom, Unité(s) de recherche, Ville(s)

APPRECIATION DU PROJET ET DU CANDIDAT

Le candidat a-t-il été identifié au moment du dépôt du dossier ?

- Oui
 Non

Si non, indiquer uniquement les avis concernant le projet de thèse

Avis motivé du directeur de thèse sur la recherche envisagée en ce qui concerne les objectifs scientifiques et

Avis du directeur d'unité sous l'angle des thématiques de recherche du laboratoire :

(Cet avis est obligatoire avant tout dépôt sur la plateforme COMUE)

Le thème des matériaux à changements de phase a progressivement gagné en importance au LMRS depuis maintenant 4 ans. Sous l'impulsion de Ionut Danaila, il a fait l'objet d'un premier projet régional aujourd'hui achevé avec la Région Haute-Normandie, d'un projet PEPS de l'AMIES (Agence des Mathématiques en Interaction avec l'Entreprise et la Société), d'un projet international avec Brighton puis d'un contrat industriel avec Orange et actuellement d'une partie du projet RIN M2SiNum qui vient de démarrer. Présentant un enjeu écologique certain, ce thème est structurant pour toute une partie de l'équipe "EDP et calcul scientifique" (1 professeur, 1 maître de conférences, 1 ingénieur de recherche, 1 post-doctorant) et est porteur d'interactions potentielles avec les physiciens. Cette thèse va notamment permettre d'aller plus loin dans la simulation pour optimiser la gestion énergétique d'un datacenter. Par ailleurs, ce sera aussi l'occasion d'impliquer pour la première fois un jeune maître de conférences, arrivé en 2015 au LMRS, dans l'encadrement d'un étudiant en thèse. Pour toutes ces raisons, j'émet un avis très favorable à cette demande de RIN allocation 100% qui s'intègre totalement à la stratégie du laboratoire.

Pierre CALKA

RENSEIGNEMENTS CONCERNANT LE OU LES DIRECTEUR(S) DE THESE DEVANT OBLIGATOIREMENT ETRE TITULAIRE DE L'HDR

1. Docteurs ayant soutenu depuis 2013 : sous la direction de I. Danaila

NOM prénom	% d'encadrement et nom du co- directeur ou co- encadrant	Type d'allocation ^A	Date d'inscription	Date de soutenance	Insertion Professionnelle ^B	Publications ou brevets ^C
MOGLA N Raluca	80% (S. Le Masson, Orange, 20%)	CIFRE	04/2010	11/201 3	Ingénieur études à Londres, Granta Design Ltd.	- - -

1. I. Danaila, R. Moglan, F. Hecht, S. Le Masson, A Newton method with adaptive finite elements for solving phase-change problems with natural convection, **J. of Computational Physics**, 274, p. 826-840 (2014).
2. R. Moglan, I. Danaila, S. Le Masson, Méthodes d'ordre élevé pour la simulation numérique des phénomènes thermo-aérauliques dans les armoires de télécommunications, Rencontres Mathématiques de Rouen, 2013.
3. R. Moglan, I. Danaila, S. Le Masson, High order numerical simulations of convection in domains with heated obstacles : application to heat management in telecom outdoor cabinets, European Fluid Mechanics Conference (EFMC9), Rome, 2012.
4. R. Moglan, I. Danaila, S. Le Masson, Méthodes d'ordre élevé pour la simulation numérique des phénomènes thermo-aéraulique dans les armoires de télécommunications, Congrès Français de Thermique, SFT 2012.
5. R. Moglan, I. Danaila, S. Le Masson, Simulation numérique des phénomènes thermo-aérauliques dans les armoires de télécommunications, Journées AUM/AFM, Rouen, 2012.

VERGEZ Guillau me	75% (F. Hecht, UPMC, 25%)	ANR, projet BECASIM (porteur I. Danaila)	Oct 2013	Juin 2017	professeur agrégé de mathématiques (Rectorat de Paris)	- - -
----------------------------------	---------------------------------	---	-------------	--------------	--	-------------

1. G. Vergez, I. Danaila, S. Auliac and F. Hecht, A finite-element toolbox for the stationary Gross-Pitaevskii equation with rotation, **Computer Physics Communications**, 209, (2016), pp. 144-162.
2. G. Vergez, I. Danaila, S. Auliac, F. Hecht, A finite-element toolbox for the stationary Gross-Pitaevskii equation with rotation, Workshop on Computation Of Quantum Systems In Cold-matter Physics And Chemistry, February 22-26, 2016, The Fields Institute, Toronto.
3. Guillaume Vergez, *FreeFem++ Toolbox for the finite element resolution of the stationary Gross-Pitaevskii equation with rotation*, Workshop on Numerical Approximation of PDEs: Honoring the 60th birthday of F. Hecht, Malaga, Spain, April 20-22, 2015.
4. Guillaume Vergez, Ionut Danaila, Frédéric Hecht, *Finite element resolution of the stationnary Gross-Pitaevskii equation with rotation*, Congrès SMAI, Les Karellis, Savoie, 2015.
5. Guillaume Vergez, Simulation de condensats de Bose-Einstein avec FreeFem++, Congrès National d'Analyse Numérique, Carry-le-Rouet (France) March 31-April 4, 2014.
6. Guillaume Vergez, Méthodes numériques et simulation de condensats de Bose-Einstein, Sixth Workshop on generic PDE solvers : FreeFem++ and applications, Paris (France) December 9-11, 2014.
7. Guillaume Vergez, Méthodes numériques et simulation de condensats de Bose-Einstein, Fifth Workshop on generic PDE solvers : FreeFem++ and applications, Paris (France) December 10-12, 2013.

A : Etablissement, Région 50% et co-financeur, Région 100%, CIFRE, salarié, Contrat, CEA, CNRS, INSERM, INRA, Entreprise...

B : Indiquer année par année les différents postes occupés (fonction, établissement ou entreprise) et connus à ce jour

C : Indiquer la liste des auteurs, l'année, la revue en abrégé

2. Doctorants en cours de formation :

NOM prénom	% d'encadrement et nom du co-directeur ou co-encadrant	Type d'allocation ^A	Date d'inscription	Publications ou brevets ^B
RAKOTONDRAN DISA Aina	100%	région	01/10/2015 (soutenance prévue en septembre 2019)	- - -

1. Aina Rakotondrandisa, Ionut Danaila and Luminita Danaila, Numerical modelling of a melting-solidification cycle of a phase-change material with complete or partial melting, **International Journal of Heat and Fluid Flow**, 76, p. 57-71 (2019).
2. A. Rakotondrandisa, I. Danaila, S. Le Masson, L. Danaila : Numerical simulations of melting-solidification problems with natural convection. Application to phase-change materials. 12th European Fluid Mechanics Conference, 9 September 2018 – 13 September 2018, Vienna, Austria.
3. A. Rakotondrandisa, I. Danaila, L. Danaila : Etude numérique d'un cycle complet fusion-solidification pour un matériau à changement de phase, 26ème Congrès Français de Thermique, 29 mai- 3 juin 2018, Pau.
4. A. Rakotondrandisa, I. Danaila : Modélisation et simulation de matériaux à changement de phase, 44ème Congrès d'Analyse Numérique, 28 mai- 1 juin 2018, Cap d'Agde.
5. A. Rakotondrandisa, I. Danaila : Simulation de matériaux à changement de phase par une méthode d'éléments finis adaptatifs, 25ème Congrès Français de Thermique, 30 mai- 2 juin 2017, Marseille.
6. A. Rakotondrandisa, I. Danaila : Simulation of Phase Change Materials with an adaptative finite-element method,

8th FreeFem++ Days, December 9-11, 2016, Paris.

A : Etablissement, Région 50% en précisant le co-financier, Région 100%, salarié, Europe, CIFRE, Contrat, CEA, CNRS, INSERM, INRA, Entreprise...

B : Indiquer la liste complète des auteurs, l'année, le nom de la revue en abrégé