

# Modélisation numérique de la fusion/solidification d'un lit de particules de MCPs au sein d'une unité de stockage thermique

Rémy OSIPIAN<sup>1</sup>, Seyed-Amir BAHrani<sup>1</sup>, André BONTEMPS<sup>2</sup>, Kamel AZZOUZ<sup>3</sup>, Laurent ROYON<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire Matière et Systèmes Complexes (MSC), UMR 7057 CNRS & Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, 75013 Paris, France.

<sup>2</sup>Institut des Energies de Demain (LIED), UMR 8236 CNRS & Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, 75013 Paris, France.

<sup>3</sup>Valeo Thermique Habitacle, Centre de recherche, 78321 La Verrière, France

**Résumé** - Un modèle numérique permettant de simuler le comportement dynamique et thermique d'une unité de stockage de chaleur latente est proposé. Cette unité est constituée d'une enceinte de forme cylindrique, chargée de capsules sphériques remplies de matériaux à changement de phase et traversée par le fluide caloporteur. La résolution du problème s'effectue à l'aide des équations de conservation. Le modèle développé en 1D permet d'évaluer la durée d'une phase de stockage en fonction du nombre de Reynolds et de l'intervalle de température  $\Delta T$ .

## Nomenclature

$d_p$	diamètre de la particule de MCP, $m$	<i>Symboles grecs</i>	
$D$	diamètre du lit de particules, $m$	$\varepsilon$	porosité
$H$	hauteur du lit de particules, $m$	$\rho$	masse volumique, $kg.m^{-3}$
$C_p$	capacité thermique massique, $kJ.kg^{-1}.K^{-1}$	$\lambda$	conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$
$T$	température, $^{\circ}C$	$\mu$	viscosité dynamique, $Pa.s$
$t$	temps, $s$		
$u_f$	vitesse d'écoulement du fluide, $m.s^{-1}$	<i>Indices et exposants</i>	
$a_p$	surface spécifique de la particule par unité de volume, $m^{-1}$	$f$	fluide
$h_f$	coefficient de transfert convectif, $W.m^{-2}.K^{-1}$	$p$	particule
$y$	ordonnée, $m$	$i$	initial
$Pr$	nombre de Prandtl	$s$	stockage
$Re$	nombre de Reynolds	<i>onset</i>	début de fusion
		<i>endset</i>	fin de fusion

## 1. Introduction

L'utilisation des véhicules électriques reste encore marginale en raison principalement de leur autonomie, qui est par ailleurs fortement diminuée l'hiver par la mise en route du système de chauffage. Notre recherche vise à proposer une solution technologique pour améliorer ce défaut en proposant le développement d'un système actif par chaleur latente dédié spécifiquement au chauffage de l'habitacle. Cette solution, appelée batterie thermique repose sur l'utilisation de matériaux à changement de phase (MCP) de type solide-liquide, qui ont la propriété d'absorber de fortes quantités de chaleur (latente) sous des faibles volumes et de stabiliser à un niveau de température quasi-constant le système dans lequel ils sont insérés. En période d'utilisation, la chaleur stockée est récupérée par un fluide caloporteur pour être alors transférée et envoyée dans l'habitacle au niveau d'un échangeur air/eau. La figure 1 illustre le fonctionnement des phases de charge/décharge de l'unité de stockage au sein du véhicule.

La batterie thermique, considérée dans cette étude, est constituée d'un lit fixe de particules de MCP de taille millimétrique afin de bénéficier d'un rapport surface/volume important. Un fluide caloporteur à base d'éthylène-glycol permet d'échanger la chaleur par convection avec les particules, qui sont composées d'un corps gras enrobé par une couche d'élastomère. Le travail que l'on présente ici porte sur la modélisation des échanges thermiques au sein de la batterie pendant une phase de stockage de l'énergie. Il s'agit d'un travail préliminaire qui sera complété à l'avenir par une modélisation de la colonne en phase de déstockage. Ce modèle numérique est développé d'une part pour évaluer les paramètres physiques influant sur la cinétique des échanges thermiques et d'autre part pour optimiser le fonctionnement de la batterie.

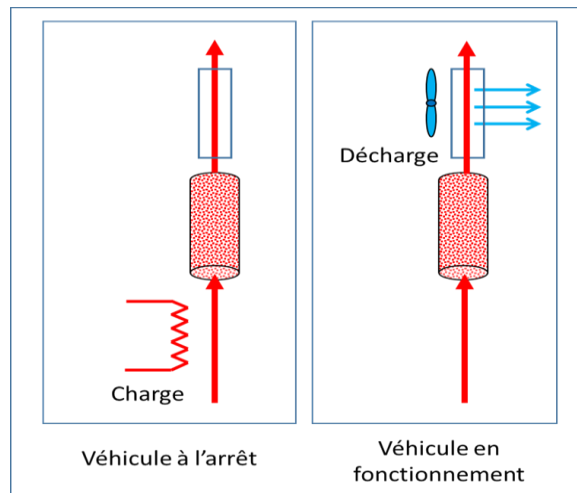


Figure 1- Principe de fonctionnement du système de stockage/déstockage

La modélisation d'un tel système physique n'est pas nouvelle en soi et a déjà fait l'objet de nombreuses publications dans la littérature spécialisée [1]–[4]. Deux approches sont développées pour décrire le transfert de chaleur : le modèle homogène et le modèle hétérogène. Le modèle homogène considère le système solide-liquide comme un milieu homogène équivalent avec une température locale unique *e.g.* [5]. Cette approche néglige le gradient de température entre le solide et le liquide. Le modèle hétérogène prend en considération les deux phases -liquide et solide- et repose sur l'écriture et la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles issues de bilans *e.g.* [6]. Pour chacune de ces approches, on rencontre des modèles uni- ou bi-dimensionnels selon que le gradient radial soit considéré ou pas. Une des principales difficultés qui apparaît dans la modélisation est la prise en compte du changement de phase. Elle apparaît dans la non-linéarité des propriétés physiques à l'interface liquide-solide et dans le déplacement de cette interface au cours du temps [7]. En l'absence de solution analytique simple pour des matériaux de dimension finie, deux types de méthodes ont été développés : les méthodes à suivi d'interface qui nécessitent l'utilisation de schémas numériques avec maillage fixe ou mobile afin de connaître la position exacte de l'interface à chaque pas de temps et les méthodes à domaine fixe, comme par exemple la méthode enthalpique, ou la méthode de la capacité thermique apparente, qui considère un seul jeu d'équations de bilans pour les deux phases. Dans le cadre de notre travail, nous avons choisi de considérer un modèle à deux phases et d'adopter la méthode de la capacité thermique massique équivalente  $C_{p_{eff}}$  pour caractériser les propriétés de changement de phase du matériau. Une expression analytique gaussienne est choisie pour modéliser l'évolution du  $C_{p_{eff}}$  autour de la température de changement d'état. L'influence du débit du fluide et de l'intervalle de température de fonctionnement sur la dynamique du processus de charge est étudiée. Les résultats numériques obtenus sont comparés aux résultats issus de la littérature afin de valider notre modèle.

## 2. Modélisation numérique

### 2.1. Description du modèle

L'unité de stockage thermique est constituée d'une enceinte cylindrique aux parois isolantes, chargée de capsules sphériques remplies de MCP et traversée par un fluide caloporteur. La batterie est dans une position verticale. Dans les parties supérieure et inférieure se trouvent des filtres-diffuseurs qui permettent à la fois d'homogénéiser la diffusion du fluide caloporteur dans l'enceinte et de maintenir les billes de particules à des positions fixes pendant le passage du fluide. Lors du processus de charge, le fluide caloporteur entre à température constante par le bas de la batterie pour céder ou accumuler de la chaleur par transfert convectif. La charge est considérée comme complète lorsque la température devient uniforme sur l'ensemble du système. Avant de détailler les équations du modèle, il est fondamental de préciser les hypothèses :

- Les parois sont supposées calorifugées et on pose par conséquent une condition de flux nul sur les parois latérales en contact avec l'extérieur.
- Les filtres-diffuseurs ne sont pas pris en compte dans le modèle.
- L'écoulement du fluide caloporteur est axial selon l'axe noté  $y$  et s'effectue du bas vers le haut.
- La vitesse de l'écoulement est supposée constante et uniforme.
- Les propriétés des MCP sont constantes excepté pour la capacité thermique massique  $C_p$  qui dépend de la température du matériau.
- Le lit est fixe et composé de particules sphériques de MCP de même diamètre.
- La porosité  $\varepsilon$  est isotrope et constante.
- Le transfert de chaleur radiatif est négligé.
- Il n'y a aucune source de chaleur interne au sein de la batterie.
- Le modèle est unidimensionnel selon l'axe  $y$ .

Le nombre de Biot, évaluant le rapport entre la résistance thermique de conduction interne au sein de la particule sphérique et la résistance thermique de convection, est égal à 0,145, soit proche de 0,1. Ainsi, le champ de température dans la particule peut être considéré comme quasi-uniforme.

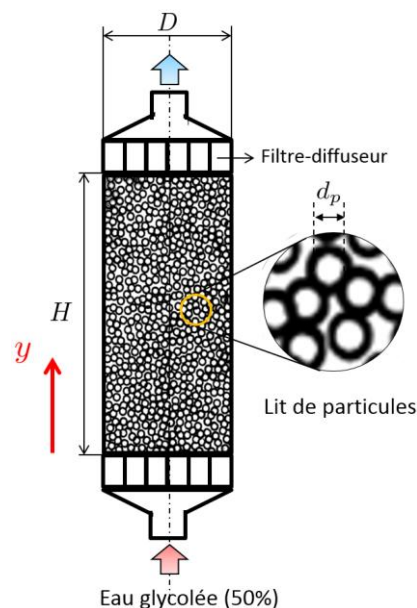


Figure 2 - Représentation schématique de la colonne de stockage

Le schéma général et simplifié de l'unité de stockage est illustré à la figure 2. La hauteur et le diamètre du lit de particules sont notés  $H$  et  $D$ . Le contenu du réservoir est chargé de

particules de MCP de diamètre  $d_p$  avec une porosité de  $\varepsilon$ . La vitesse de l'écoulement du fluide caloporteur sera notée  $u_f$ . Les paramètres et les principales caractéristiques de la batterie sont détaillés dans le tableau 1.

<i>Paramètres</i>	
Hauteur du réservoir $H$	200 mm
Diamètre du réservoir $D$	160 mm
Diamètre de la particule de MCP $d_p$	1.5 mm
Porosité $\varepsilon$	0.4

Tableau 1 : *Paramètres principaux de la batterie*

La fusion/solidification du lit de particules de MCP traversé par le fluide caloporteur est régie par les équations de conservation. Le lit étant un milieu poreux, ces équations se décomposent en deux parties : une partie fluide correspondant au transfert de chaleur à travers le fluide caloporteur et une partie solide correspondant au transfert de chaleur à travers le MCP. En considérant les hypothèses stipulées précédemment, les équations du modèle sont les suivantes :

$$\text{Partie fluide} \quad \varepsilon \rho_f C p_f \frac{\partial T_f}{\partial t} + \varepsilon u_f \rho_f C p_f \frac{\partial T_f}{\partial y} = \varepsilon \lambda_f \frac{\partial^2 T_f}{\partial y^2} + a_p h_f (T_p - T_f) \quad (1)$$

$$\text{Partie solide} \quad (1 - \varepsilon) \rho_p C p_p \frac{\partial T_p}{\partial t} = (1 - \varepsilon) \lambda_p \frac{\partial^2 T_p}{\partial y^2} + a_p h_f (T_f - T_p) \quad (2)$$

Le coefficient volumique de transfert convectif,  $h_f$ , pour l'unité de stockage s'écrit [8]:

$$h_f = \frac{[2 + 1.1 \text{Re}_p^{0.6} \text{Pr}^{1/3}] \lambda_f}{d_p} \quad (3)$$

$$\text{D'après [9], } a_p = \frac{6(1 - \varepsilon)}{d_p} \quad (4)$$

Les nombres de Reynolds et de Prandtl  $Re_p$  et  $Pr$  s'écrivent respectivement :

$$\text{Re}_p = \varepsilon \frac{\rho_f d_p u_f}{\mu_f} \quad (5) \quad \text{Pr} = \frac{C p_f \mu_f}{\lambda_f} \quad (6)$$

## 2.2. Propriétés du MCP lors du changement de phase

L'équation (2) du modèle met en jeu la capacité thermique massique  $Cp$  du MCP. Le matériau considéré dans le projet est un alcool gras, qui présente un point de fusion autour de 70°C. La figure 3a présente la courbe expérimentale de cette propriété obtenue par calorimétrie différentielle (DSC). On se propose de modéliser cette courbe de capacité thermique massique par une expression analytique de type gaussienne

$$Cp_{THE} = Cp_{moy} + \frac{L}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(T - T_m)^2}{2\sigma^2}} \quad (7)$$

où  $T_m$  est égale à 70°C et l'écart type  $\sigma$  égal à 0.88°C. La chaleur latente  $L$ , correspondant à l'aire sous la courbe est, pour les deux représentations présentées figure 3a, égale à 192 kJ/kg.

## 2.3. Conditions initiales et conditions limites

Les conditions initiales et les conditions limites sont:

$$\left\{ \begin{array}{l} t = 0 ; \\ t > 0 ; y = 0 ; \\ t > 0 ; y = H ; \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} T_f = T_p = T_i \\ T_f = T_{entrée} ; \frac{\partial T_p}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial T_f}{\partial y} = 0 ; \frac{\partial T_p}{\partial y} = 0 \end{array}$$

## 3. Résultats et discussions

### 3.1. Validation du modèle numérique

N'ayant pas encore effectué d'essais expérimentaux sur notre batterie thermique, on se propose de valider notre modélisation sur les résultats publiés par Izquierdo-Barrientos et al [10]. Dans leur étude, ils utilisent une unité de stockage contenant des capsules sphériques de MCPs (Rubitherm-GR50), ayant 1.64mm de diamètre équivalent. La hauteur et le diamètre de la batterie sont de 200mm. Le fluide caloporteur utilisé pour le processus de charge/décharge est de l'air. Le lit de particules est initialement à la température  $T_i$  de 15°C et le fluide caloporteur entre à la température  $T_{entrée}$  de 65°C. La courbe expérimentale du  $C_p$  du matériau utilisé dans leur étude est représentée figure 3b, que l'on modélise par une courbe d'allure gaussienne. On remarque la présence d'une transition de type solide-solide autour de 25°C, qui n'est pas prise en compte dans notre représentation du  $C_p$ .

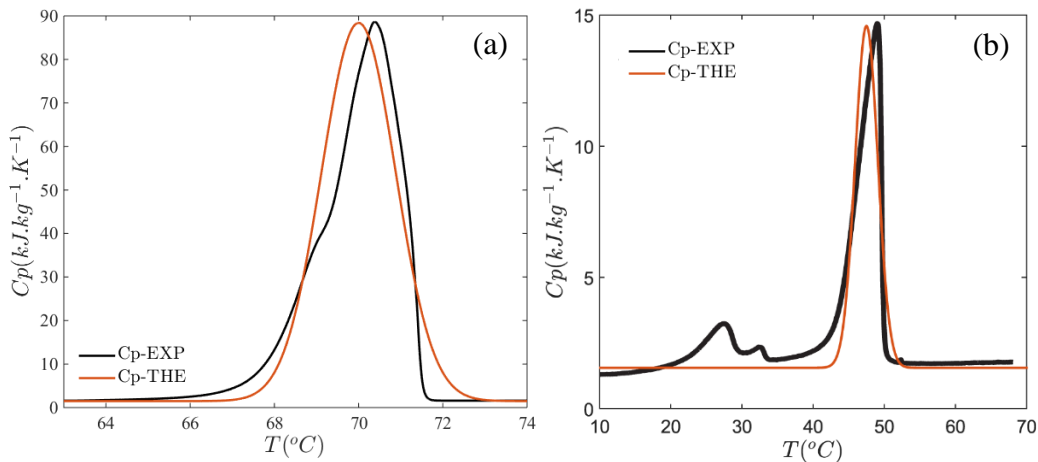


Figure 3 – Capacité thermique massique du a) MCP à base d'alcool gras, (b) Rubitherm-GR50 d'après Izquierdo et al.[10]. En noir, les données expérimentales obtenues par DSC et en rouge, l'approche analytique de type gaussienne

L'étude comparative expérience-modélisation est présentée figure 4 à travers l'évolution de la température des particules de MCP lors du processus de charge au sein de la batterie à différentes hauteurs. Sur la position dans la colonne de stockage, on remarque que le phénomène de changement de phase apparaît à des temps différents en raison de la stratification de la température. Les résultats numériques apparaissent en bon accord avec les résultats expérimentaux, permettant ainsi la validation du modèle. Les légères différences peuvent s'expliquer par la modélisation du  $C_p$  qui présente quelques disparités avec le thermogramme expérimental de la figure 3b. Notamment, la transition de type solide-solide, présente à 25°C, se manifeste sur les courbes de températures expérimentales par une modification de la pente de la courbe, et celle-ci n'est pas prise en compte dans la simulation.

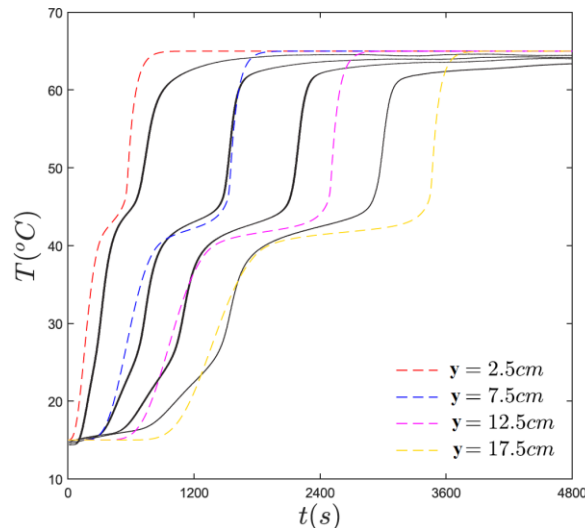


Figure 4 – Comparaison entre les résultats numériques (en pointillés) et les données expérimentales (en trait continu) d'Izquierdo et al. pour différentes hauteurs au sein du lit.

### 3.2. Profils de températures au sein de la batterie thermique

On utilise maintenant la modélisation dans le cadre de notre batterie thermique en vue d'évaluer la dynamique des échanges thermiques avec un lit fixe constitué de particules d'alcool gras. Le fluide caloporteur est de l'eau glycolée à 50%.

La figure 5 montre l'évolution de la température du MCP à différentes hauteurs adimensionnées ( $Y=y/H$ ) au sein de la batterie lors d'un processus de charge thermique. La température d'entrée du fluide est de  $90^{\circ}\text{C}$ . Le lit de particules est initialement à la température de  $5^{\circ}\text{C}$ . Le nombre de Reynolds calculé à l'entrée de la colonne est de  $Re=100$ . Par la suite, le nombre de Reynolds correspondra toujours au nombre calculé à l'entrée de la colonne (à ne pas confondre avec  $Re_p$ ).

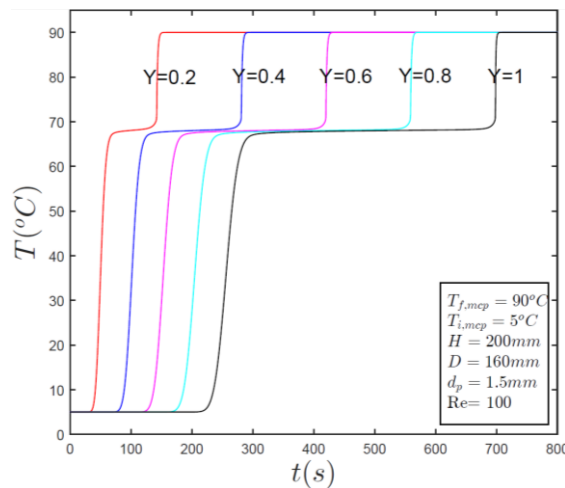


Figure 5 – Évolution de la température du MCP à différentes hauteurs adimensionnées lors d'un processus de charge thermique

Le transfert thermique entre le fluide et le solide s'effectue par convection. Chacune des courbes peut être divisée en cinq sections : la 1<sup>ère</sup> section est la période du début de charge thermique où la température reste à la température initiale de  $5^{\circ}\text{C}$ , le MCP n'ayant absorbé aucune énergie. La 2<sup>ème</sup> section est la période de charge où le MCP commence à emmagasiner de l'énergie par chaleur sensible. La 3<sup>ème</sup> section correspond à une absorption d'énergie par chaleur latente. Celle-ci démarre à la température de  $T_{onset}=65^{\circ}\text{C}$  et termine à  $T_{endset}=71.7^{\circ}\text{C}$ .

L'évolution de la température dans cette section s'effectue plus lentement en raison de la forte quantité d'énergie absorbée par le MCP et celle-ci se caractérise par un palier de température quasi horizontal. La 4<sup>ème</sup> section est équivalente à la 2<sup>ème</sup> section où le transfert d'énergie se fait par chaleur sensible. Enfin, dans la dernière section, la température atteint la température maximale de 90°C. Sur cet exemple on remarque que la durée de stockage nécessaire pour que la colonne soit entièrement à 90°C est de  $t_s = 700s$ .

### 3.3. Durée de stockage en fonction du nombre de Reynolds $Re$

La modélisation constitue un outil pour évaluer l'influence de certains paramètres de contrôle sur la dynamique des échanges. On se propose de l'utiliser pour connaître l'influence du débit imposé sur la durée de la phase de stockage, notée  $t_s$ . La figure 6a présente la durée complète de stockage en fonction du nombre de Reynolds pour un MCP ayant subi une variation de température  $[T_i, T_{entrée}] = [5, 90]$ . On peut observer que la durée  $t_s$  diminue en augmentant le nombre de Reynolds. Plus la vitesse d'écoulement augmente et plus le stockage thermique de la batterie est rapide. Cela s'explique par le transfert thermique convectif entre le fluide caloporteur et le MCP qui s'améliore lorsque le débit augmente. Cette variation peut s'exprimer sous la forme :

$$t_s = 22923Re^{-0.74} \quad (8)$$

### 3.4. Durée de stockage en fonction de la différence $\Delta T = T_{entrée} - T_i$

Le modèle peut également être utilisé pour évaluer l'influence de la température d'entrée du fluide. La figure 6b présente, pour différentes valeurs du nombre de Reynolds (100, 250, 500, 1000), la durée complète de stockage en fonction de l'intervalle de température  $\Delta T = [T_{entrée} - T_i]$  subi par le MCP. Notons que seule la température  $T_{entrée}$  varie dans la modélisation. En effet, les calculs ont démontré que la variation de la température initiale  $T_i$ , sur une échelle de valeurs de 5°C à 65°C, n'influe pratiquement pas sur la durée de stockage. Ainsi, nous avons décidé de fixer la température  $T_i$  à 5°C dans cette évaluation et nous avons choisi de faire varier uniquement la température d'entrée, sur une échelle de valeurs de 72°C à 95°C ( $\Delta T$  s'échelonne donc de 67°C à 90°C). La figure 6b montre que la durée de stockage décroît à mesure que  $\Delta T$  augmente. Mais celles-ci se stabilisent pour des valeurs de  $\Delta T$  élevées. Ce constat est encore plus significatif lorsqu'il y a augmentation du débit. Ainsi, plus le débit est élevé et moins la différence de température  $\Delta T$  influe sur la durée de stockage. La raison du phénomène de décroissance des courbes en fonction de  $\Delta T$  provient de l'élévation de la puissance thermique.

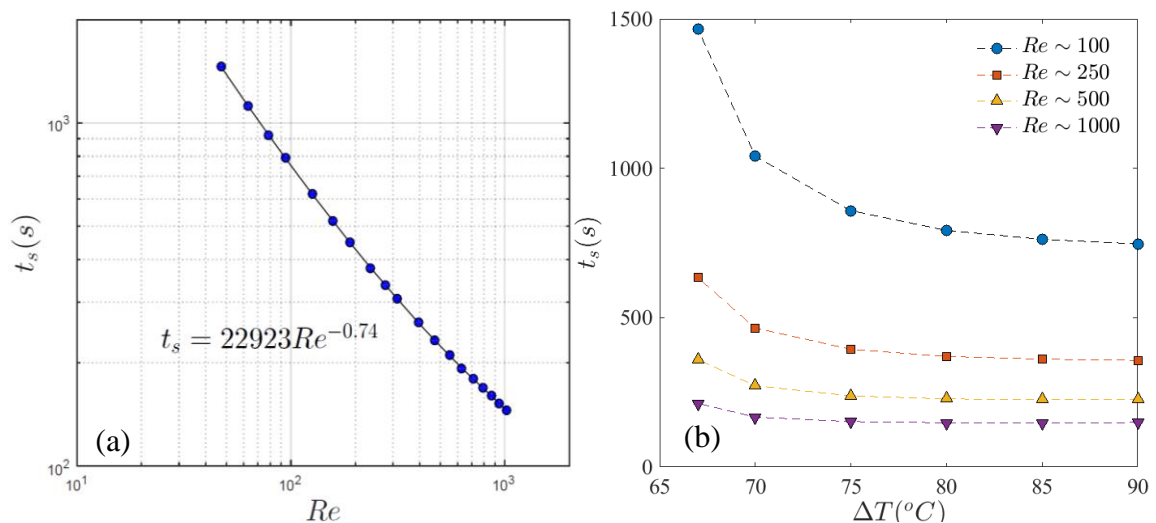


Figure 6 – Durée de stockage thermique de la batterie en fonction a) du nombre de Reynolds et b) de l'intervalle de température  $[T_{entrée} - T_i]$  pour différentes valeurs du nombre de Reynolds

## 4. Conclusion

Nous avons développé et étudié un modèle numérique unidimensionnel afin de simuler le comportement dynamique et thermique d'une unité de stockage chargée en particules de MCP. Une méthode de différences finies, mettant en jeu des équations de conservation séparées pour les parties solide et fluide, a été utilisée. Le changement de phase a été modélisé à l'aide d'une capacité thermique massique équivalente du MCP représentée par une fonction gaussienne. Une étude comparative entre nos résultats numériques et des résultats expérimentaux sur l'évolution de la température des particules de MCP lors d'une charge thermique a permis de valider le modèle. La durée de stockage thermique de la batterie a été étudiée en fonction du nombre de Reynolds et de l'intervalle de température  $\Delta T$  entre la température d'entrée du fluide caloporteur et la température initiale du lit de particules. Ces premiers résultats donnent quelques éléments de réponse dans le cadre d'une optimisation du fonctionnement du stock.

## Références

- [1] J. Wei, Y. Kawaguchi, S. Hirano, et H. Takeuchi, « Study on a PCM heat storage system for rapid heat supply », *Appl. Therm. Eng.*, vol. 25, n° 17–18, p. 2903– 2920, déc. 2005.
- [2] H. Peng, H. Dong, et X. Ling, « Thermal investigation of PCM-based high temperature thermal energy storage in packed bed », *Energy Convers. Manag.*, vol. 81, p. 420– 427, mai 2014.
- [3] S. Karthikeyan, G. Ravikumar Solomon, V. Kumaresan, et R. Velraj, « Parametric studies on packed bed storage unit filled with PCM encapsulated spherical containers for low temperature solar air heating applications », *Energy Convers. Manag.*, vol. 78, p. 74– 80, févr. 2014.
- [4] E. Tumilowicz, C. L. Chan, P. Li, et B. Xu, « An enthalpy formulation for thermocline with encapsulated PCM thermal storage and benchmark solution using the method of characteristics », *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 79, p. 362– 377, déc. 2014.
- [5] K. Nagano, S. Takeda, T. Mochida, et K. Shimakura, « Thermal characteristics of a direct heat exchange system between granules with phase change material and air », *Appl. Therm. Eng.*, vol. 24, n° 14–15, p. 2131– 2144, oct. 2004.
- [6] T. E. W. Schumann, « Heat transfer: A liquid flowing through a porous prism », *J. Frankl. Inst.*, vol. 208, n° 3, p. 405– 416, sept. 1929.
- [7] S. A. Bahrani, L. Royon, B. Abou, R. Osipian, K. Azzouz, et A. Bontemps, « A phenomenological approach of solidification of polymeric phase change materials », *J. Appl. Phys.*, vol. 121, n° 3, p. 035103, janv. 2017.
- [8] N. Wakao, S. Kaguei, et T. Funazkri, « Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid heat transfer coefficients in packed beds », *Chem. Eng. Sci.*, vol. 34, n° 3, p. 325– 336, janv. 1979.
- [9] M. Kaviany, *Principles of Heat Transfer*. John Wiley & Sons, 2002.
- [10] M. A. Izquierdo-Barrientos, C. Sobrino, et J. A. Almendros-Ibáñez, « Thermal energy storage in a fluidized bed of PCM », *Chem. Eng. J.*, vol. 230, p. 573– 583, août 2013.

## Remerciements

Les auteurs remercient la région Île de France pour le financement de cette étude à travers le FUI, dans le cadre du projet VEGETO.