

Modélisation et prototype du stockage de chaleur à basse température par un matériau cimentaire

Khadim Ndiaye^{1*}, Stéphane Ginestet¹, Martin Cyr¹

¹Université de Toulouse; UPS, INSA; LMDC (Laboratoire Matériaux et Durabilité des Constructions de Toulouse); 135, avenue de Rangueil; 31 077 Toulouse cedex 4, France, Phone: 33-5- 61-55-99-16,

* (auteur correspondant : kndiaye@insa-toulouse.fr)

Résumé - Le stockage d'énergie renouvelable est aujourd'hui essentiel pour améliorer la performance énergétique des bâtiments et limiter leur impact sur l'environnement. La plupart des matériaux adsorbants sont capables de stocker de la chaleur mais à une température élevée (exemple des zéolites, utilisées à 200°C). L'ettringite, hydrate principal des liants sulfoalumineux, présente l'avantage d'avoir une grande densité de stockage à basse température (60°C). Un matériau de stockage monolithe à base de ciment sulfoalumineux est développé dans un travail antérieur. Pour stocker de l'énergie thermique, ce matériau poreux est intégré dans un réacteur thermochimique cylindrique où la chaleur est chargée et déchargée, respectivement, par déshydratation endothermique et réhydratation exothermique.

Pour prédire le comportement du système de stockage, un modèle bidimensionnel de stockage basé sur les modèles existants dans la littérature et prenant en compte les spécificités du matériau cimentaire monolithe, a été développé. Le bilan d'énergie et le bilan de masse dans le réacteur thermochimique (adsorbant cylindrique) génèrent un système d'équations différentielles non-linéaires et fortement couplées. La résolution numérique de ce système est effectuée par discrétisation spatiale en utilisant la méthode des différences finies et par intégration temporelle des variables d'état (température et pression de vapeur d'eau). La programmation est réalisée à l'aide du logiciel MatLab ®.

Le résultat de la simulation du modèle, avec les propriétés du matériau mesurées, est utilisé comme étude de conception pour réaliser le prototype cylindrique au laboratoire. Les capteurs hygrométriques placés dans le matériau permettent de mesurer l'évolution de la température et de l'humidité relative pendant la phase de chargement et de déchargement de chaleur.

Le résultat des essais de stockage et de déstockage de chaleur avec le prototype a servi de preuve de concept du principe de stockage thermochimique par l'ettringite d'une part et d'autre part, de moyen de validation du modèle numérique.

MOTS-CLÉS : stockage thermochimique, hydratation-déshydratation, ettringite, modélisation, prototype

Nomenclature

a	Diffusivité thermique, m^2/s	q_{equ}	Quantité d'eau présente dans le matériau à l'équilibre de sorption, kg/m^3
b, c, n	constantes du modèle des isothermes d'adsorption de Pickett	q_m	Quantité d'eau nécessaire pour recouvrir d'une monocouche la surface adsorbant, kg/m^3
c_e	Capacité thermique massique de l'eau liquide, $J/(kg.K)$	r	Coordonnée radiale du repère cylindrique, m
c_g	Capacité thermique massique de la vapeur d'eau, $J/(kg.K)$	R	Constante des gaz parfaits, $J/(mol.K)$
c_s	Capacité thermique massique du matériau cimentaire, $J/(kg.K)$	R_1	Rayon intérieur du tube métallique, m
C_h	Capacité thermique massique homogénéisée des trois phases, $J/(kg.K)$	R_2	Rayon extérieur du tube métallique, m
HR	Humidité relative, %	R_3	Rayon extérieur du matériau, m
D_v	Coefficient de diffusion de vapeur d'eau, m^2/s	t	Temps, s
K	Perméabilité au gaz du matériau, m^2	T	Température, K
L	Longueur du réacteur thermochimique, m	u	Vitesse de la phase adsorbée (vapeur d'eau) dans le matériau, m/s
M	Masse molaire de la phase adsorbée, eau, kg/mol	v	Vitesse du fluide caloporteur (eau liquide) dans le tube métallique, m/s
n_f	Nombres de mailles radiales dans le fluide caloporteur, -	z	Coordonnée axiale du repère cylindrique, m
n_s	Nombre de mailles radiales dans le matériau solide, -		
n_z	Nombre de mailles longitudinales, -		
NUT	Nombre d'Unités de Transfert, -		
p	Pression partielle de vapeur d'eau, Pa		
p_{vs}	Pression de vapeur saturante, Pa		
q	Quantité d'eau présente dans le matériau, kg/m^3		

Lettres grecques

ε	Porosité du matériau monolithe, %
ρ	Masse volumique, kg/m^3
λ	Conductivité thermique, $W/(m.K)$
ΔH	Chaleur de sorption, J/kg
μ	Viscosité dynamique, $Pa.s$

1. Introduction

La simulation du système de stockage de chaleur utilisant les propriétés du matériau ettringitique comme paramètres intrinsèques du modèle permet de prédire le comportement du matériau de stockage durant la phase de chargement et de déchargement de chaleur, et d'aider à l'élaboration d'un prototype expérimental.

Pour atteindre ces objectifs, un modèle bidimensionnel de stockage basé sur les modèles existants dans la littérature [1] [2], a été utilisé dans cet article. Le bilan d'énergie et le bilan de masse dans le réacteur thermochimique cylindrique génère un système d'équations différentielles non-linéaires et fortement couplées. Ce système d'équations différentielles est résolu par discrétisation spatiale et intégration temporelle des dérivées de chaque variable d'état. Les résultats de simulation de la phase de stockage et de déstockage de chaleur permettent de prédire le comportement spatiotemporel du matériau cimentaire, mais aussi de fournir les conditions de fonctionnement du réacteur thermochimique cylindrique. Ces paramètres de fonctionnement sont utilisés pour concevoir et réaliser un prototype au laboratoire dans le but de valider le modèle numérique et de servir de preuve de concept du principe de stockage de chaleur par l'ettringite annoncé par Struble et Brown [3].

2. Description du réacteur étudié

Le réacteur thermochimique retenu est composé d'un tube métallique (épaisseur $R_2 - R_1$, voir Figure 1) dans lequel circule un fluide caloporteur (eau chaude $0 - R_1$) permettant de chauffer le matériau ettringitique disposé autour (épaisseur $R_2 - R_3$, voir Figure 1) durant la période de chargement de chaleur.

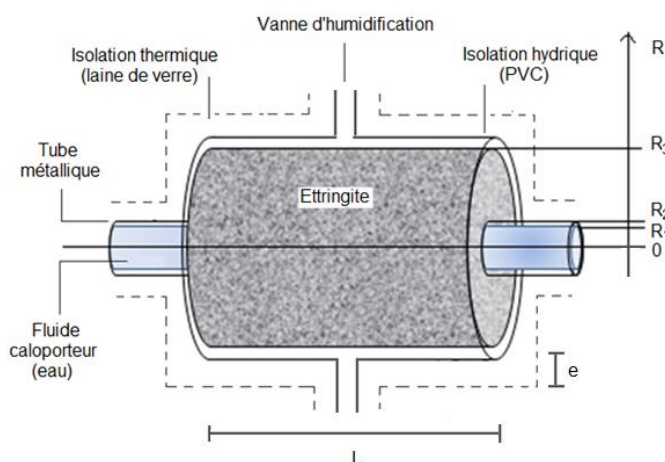


Figure 1 : Réacteur thermochimique à modéliser

En phase de charge, la chaleur (issue d'un capteur solaire à 60°C , par exemple) permet de chauffer le fluide caloporteur (eau) circulant dans le tube métallique. Par conséquent, le matériau ettringitique situé autour est chauffé à travers le tube métallique entraînant la désorption physique et la déshydratation chimique (endothermique) dans le matériau. La chaleur engendrant la réaction endothermique est stockée dans le matériau. Cette énergie thermochimique est conservée tant que le système reste isolé de la vapeur d'eau. En période de décharge, la chaleur stockée est récupérée par une humidification du matériau par de la vapeur d'eau, ce qui entraîne l'adsorption (et l'hydratation) exothermique des molécules d'eau sur l'ettringite. Dans notre modélisation, l'azote humide est utilisé à la place de l'air humide pour humidifier le matériau car la présence de CO_2 pourrait engendrer une carbonatation de l'ettringite [4].

3. Formulation mathématique du problème physique

3.1. Hypothèses retenues

Les parois transversales de l'adsorbeur (à $z = 0$ et $z = L$) sont supposées. Le modèle de diffusion simplifié [5] est utilisé ici comme modèle de cinétique de sorption, la diffusion de la vapeur d'eau est supposée radiale. Le modèle de Pickett [6] est utilisé, car il représente bien les isothermes de sorption mesurés en laboratoire sur le matériau. On suppose ici que la loi de Darcy s'applique à notre matériau poreux. La phase gazeuse est considérée comme un gaz parfait. L'écoulement du fluide caloporteur se comporte comme un écoulement de Poiseuille.

3.2. Ecriture des bilans énergétiques et massiques

Le modèle bidimensionnel est basé sur le bilan énergétique et de masse dans le matériau.

- Bilan énergétique dans le fluide caloporteur

$$\frac{\partial T_f}{\partial t} + 2 \left(1 - \left(\frac{r}{R_1} \right)^2 \right) \cdot \nabla T_f - \frac{\lambda_f}{\rho_f \cdot c_f} \nabla^2 T_f = 0 \quad (1)$$

- Bilan énergétique et massique dans le matériau cimentaire

$$\frac{\partial(c_h T)}{\partial t} + \nabla(\rho u c_g T) - \nabla(\lambda \nabla T) = (1 - \varepsilon) \Delta H \frac{\partial q}{\partial t} \quad (2)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho u) = -(1 - \varepsilon) \frac{\partial q}{\partial t};$$

$$u = -\frac{K}{\mu} \nabla p; c_h = \varepsilon \rho u c_g + (1 - \varepsilon)(\rho_s c_s + q \cdot c_e)$$

- Cinétique de sorption [5] et isothermes de sorption [6]

$$\frac{\partial q}{\partial t} = a \frac{D_v}{R_3^2} (q_{equ} - q); q_{equ}(HR, T) = \frac{q_m c HR(1 - HR^n) + b n HR^n(1 - HR)}{(1 - HR)((1 - HR) + c(HR + b HR^n))} \quad (3)$$

- La condition de raccordement fluide/métal et métal/matériau en tenant compte de la non-accumulation d'énergie dans le métal

$$\frac{\partial T_f}{\partial r}(R_1, z, t) = \frac{\lambda_m}{\lambda_f} \frac{1}{R_1} \frac{T_f(R_1) - T(R_2)}{\ln\left(\frac{R_1}{R_2}\right)}; \frac{\partial T}{\partial r}(R_2, z, t) = \frac{\lambda_m}{\lambda} \frac{1}{R_2} \frac{T_f(R_1) - T(R_2)}{\ln\left(\frac{R_1}{R_2}\right)} \quad (4)$$

Les conditions limites utilisées en cycle stockage - déstockage sont données au Tableau 1.

	Phase de chargement	Phase de déchargement
$z=0$	$T_f(\mathbf{r}, \mathbf{0}, \mathbf{t}) = 60^\circ\text{C}$	$T_f(r, 0, t) = 20^\circ\text{C}$
$r=R_3$	$p(R_3, z, t) = 0 \text{ Pa};$	$p(R_3, z, t) = 2200 \text{ Pa}$

Tableau 1 : Conditions limites en phase de chargement et de déchargement de chaleur

Ce système d'équations différentielles est résolu par discrétisation spatiale avec un schéma de différences finies vérifié selon la méthode décrite par Sun et al. [1]. L'intégration temporelle est effectuée par la méthode de Gear [7]. Les propriétés du matériau mesurées au laboratoire, sont utilisées comme paramètres du modèle de simulation.

4. Simulation numérique du réacteur de stockage

4.1. Phase de chargement de chaleur

Dans cette phase, le fluide caloporteur (eau liquide) entre à extrémité du tube métallique central (à $z = 0$) en une température de 60°C . La chaleur est alors transmise au matériau ettringitique disposé autour du tube métallique, par le fluide caloporteur. L'évolution temporelle de la température du matériau sur la Figure 2 confirme le chauffage mais montre une répartition spatiale non uniforme de la température dans le matériau. La déshydratation endothermique permet ainsi de stocker de la chaleur dans le matériau.

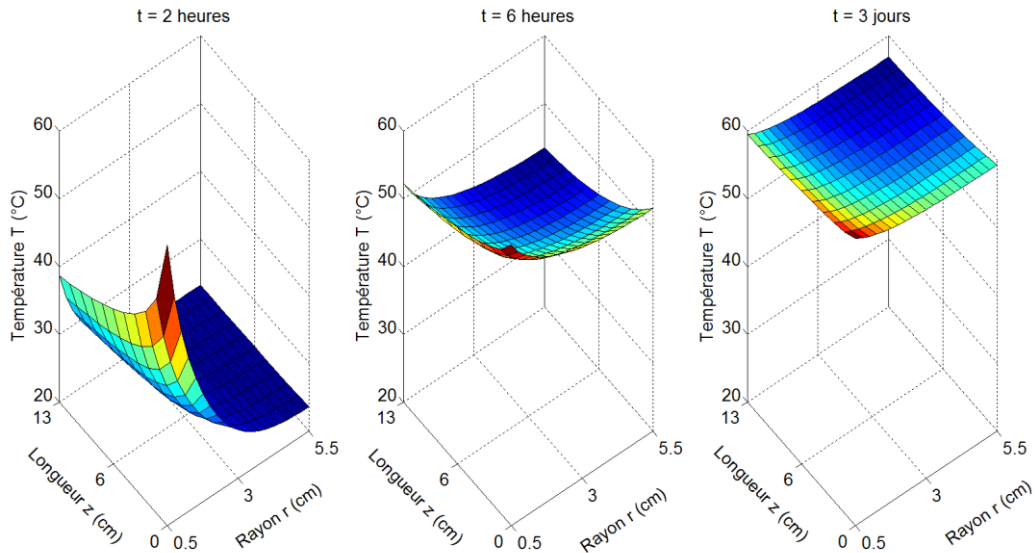


Figure 2 : Evolution de la température dans le matériau en phase de chargement

4.2. Phase de déchargement de chaleur

La phase de déstockage de la chaleur débute par une humidification radiale du matériau. Cette humidification du matériau est réalisée en imposant une haute pression de vapeur sur à la face extérieure du matériau (à R_3).

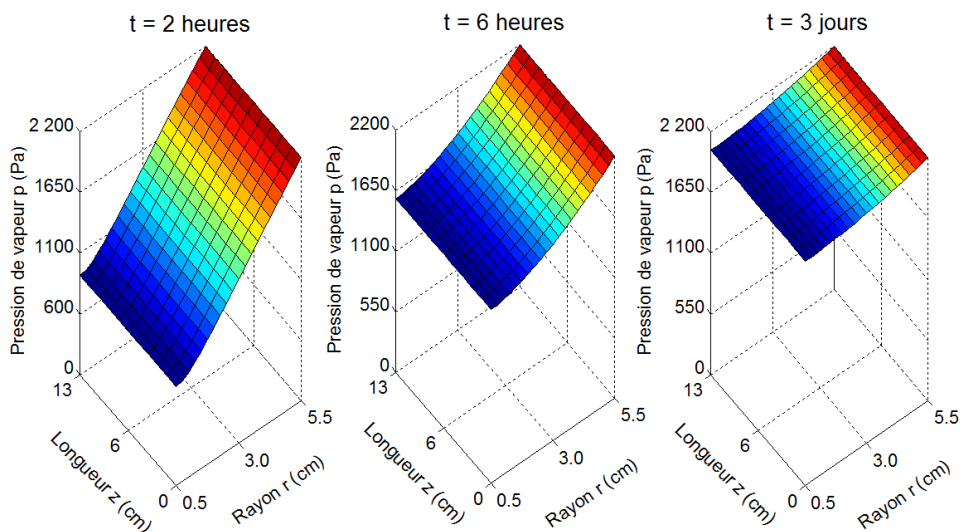


Figure 3 : Evolution de la pression de vapeur d'eau dans le matériau en phase de déchargement

La vapeur d'eau se diffuse radialement dans la porosité du matériau de l'extérieur vers l'intérieur (Figure 3). L'adsorption exothermique de la vapeur d'eau sur le matériau engendre un déchargement progressif de la chaleur stockée. La restitution de la chaleur se manifeste par l'augmentation de la température du matériau jusqu'à 15°C après 6h d'humidification (Figure 4). Ensuite, la baisse de la température notée au 3^{ème} jour est liée à l'évacuation de la chaleur par le fluide caloporteur.

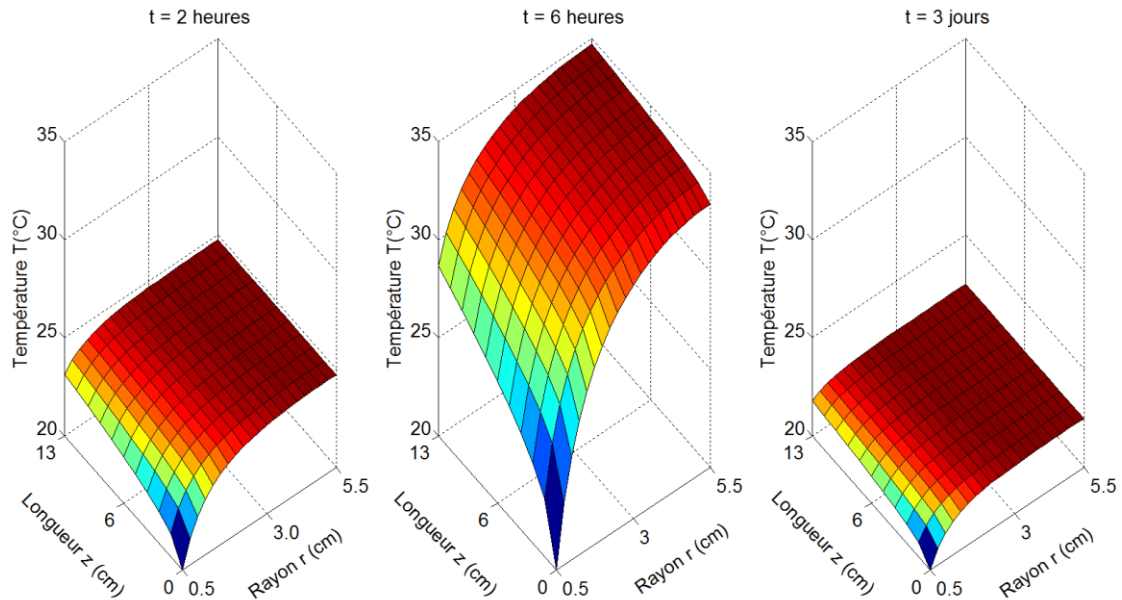


Figure 4 : Evolution de la température dans le matériau en phase de déchargement

Les résultats de cette étude numérique ont permis de mieux connaître le comportement du matériau dans le réacteur thermochimique, mais aussi de prévoir les conditions de fonctionnement du stockage utilisées pour réaliser le prototype expérimental du réacteur.

5. Prototypes et validation

5.1. Description du montage

Le réacteur thermochimique cylindrique modélisé ($D = 11\text{cm}$, $L = 13\text{cm}$) avec un tube métallique ($d = 1\text{cm}$, $L = 13\text{cm}$) est réalisé au laboratoire (Figure 5). Un banc de test de stockage installé au laboratoire permet de reproduire le fonctionnement du système de stockage.

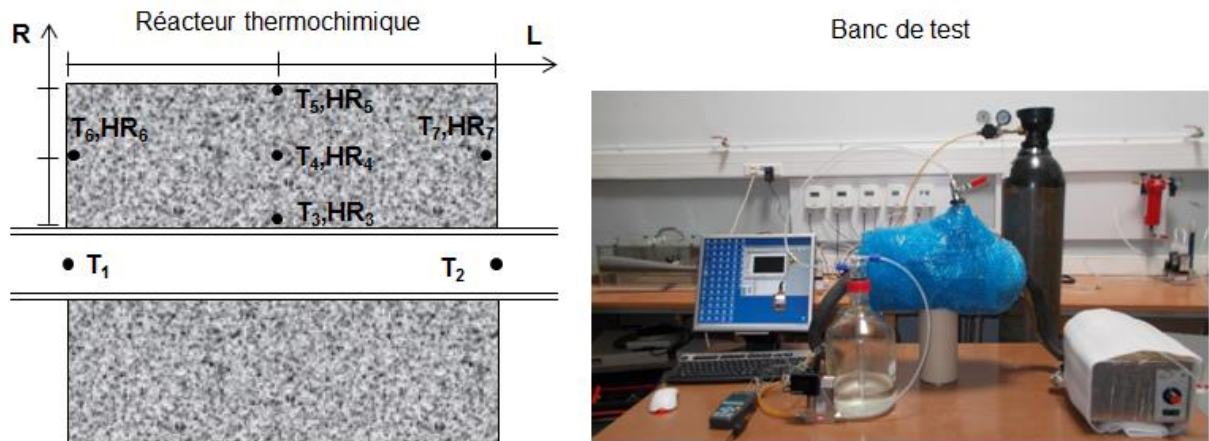


Figure 5 : Réacteur thermochimique et banc de test de stockage de chaleur

Le banc de test est composé du réacteur thermochimique, d'un élément chauffage électrique, d'un système d'humidification, d'une bouteille d'azote, et d'un module d'acquisition de données relié à un ordinateur (Figure 5). Les capteurs thermo-hydriques (incertitude des thermocouples (type K) : $0,5^{\circ}\text{C}$, incertitude des sondes hygrométriques : 2- 3%) placés dans le matériau, permettent d'enregistrer l'évolution de la température et la pression de vapeur d'eau dans le matériau et dans le fluide caloporteur au fil du temps.

5.2. Phase de chargement de chaleur

L'évolution de la température dans le matériau ettringitique à la face intérieure ($r = R_2$) et à la face extérieure ($r = R_3$) est portée sur la Figure 6. La température d'équilibre est atteinte après 24h de chauffage (Figure 6). Ceci est principalement dû à la faible conductivité thermique du matériau ($0,084 \text{ W}/(\text{m.K})$) et à sa diffusivité thermique ($1,70 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$). Les écarts entre l'expérience et le modèle sont probablement dus à un cumul des incertitudes sur les mesures des propriétés du matériau et des incertitudes liées aux capteurs (Figure 6).

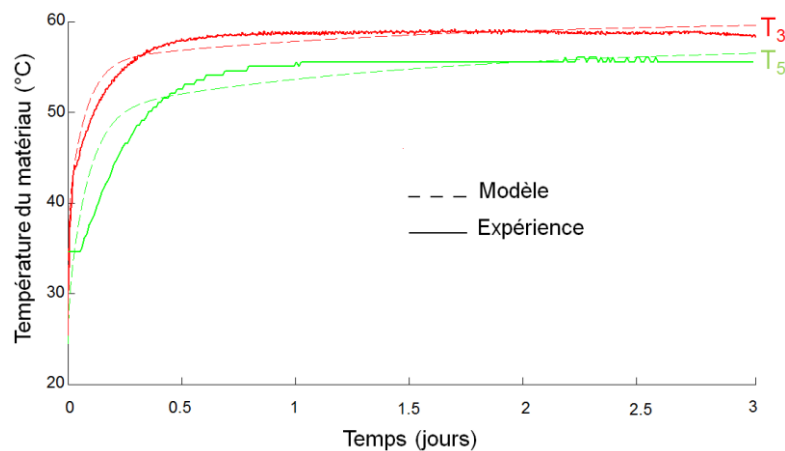


Figure 6 : Evolution de la température dans le matériau ettringite pendant la phase de chargement : Confrontation expérience et modèle

5.3. Phase de déchargement de chaleur

La phase de déchargement de chaleur est initiée par une humidification, la vanne d'humidification étant connectée au barboteur et à la bouteille d'azote.

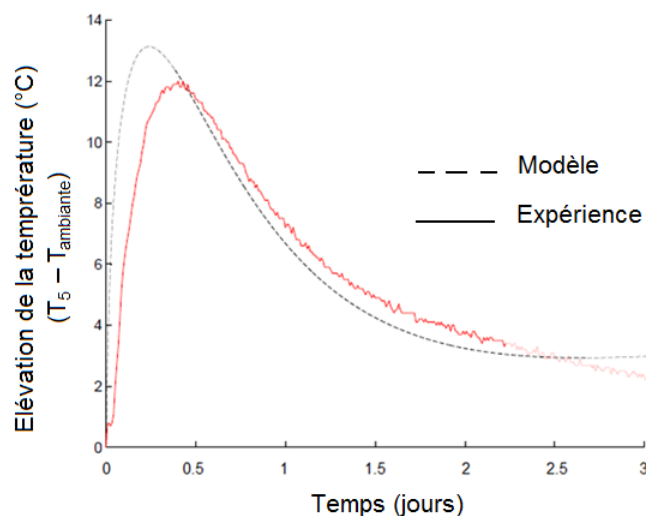


Figure 7 : Elévation de la température dans le matériau lors de la phase de déchargement de chaleur : Confrontation expérience – modèle

L'hydratation exothermique du matériau engendre la restitution de la chaleur stockée (Figure 7). La Figure 7 montre aussi un déphasage de cinétique entre le modèle et l'expérience qui s'explique, en grande partie, par le retard du barboteur (humidification manuelle) à atteindre l'humidité relative de consigne à l'entrée du matériau (surface extérieure, $r = R_3$). Ceci engendre un décalage de la réaction d'adsorption exothermique.

5.4. Bilan énergétique global du système

La puissance crête est définie comme étant la chaleur permettant au matériau d'atteindre la température maximale ($\Delta T = 12^\circ\text{C}$) par unité de temps ($P_c = \frac{mC_p\Delta T}{\Delta t}$). La quantité de chaleur stockée ou déstockée est calculée à partir de la quantité d'eau desorbée ou adsorbée ($\Delta E = (1 - \varepsilon)\Delta H(\bar{q}(t) - \bar{q}(0))$). La quantité de chaleur 61 kWh/m^3 est atteinte en phase de déchargement soit un rendement de 44% par rapport à l'énergie stockée. Ce faible rendement s'explique par le fait que la partie sensible de l'énergie stockée, contribuant à chauffer le matériau (de 20°C à 60°C), est perdue pendant la phase intermédiaire de refroidissement entre la phase de stockage et celle de déstockage. Seule la chaleur de sorption est restituée.

6. Conclusion

La simulation du modèle bidimensionnel de stockage de chaleur, basée sur le bilan énergétique et massique dans le matériau, a permis de prédire le comportement dynamique du réacteur et de prévoir les conditions de fonctionnement du réacteur thermochimique (gamme de température, de pression de vapeur, ...). Ensuite ces dernières sont utilisées pour concevoir et réaliser un prototype expérimental permettant d'effectuer des essais de stockage de chaleur au laboratoire. Ces résultats expérimentaux ont permis de valider le modèle numérique, et de servir de preuve de concept. Le matériau ettringitique développé possède non seulement une capacité autoportante ($R_c = 2\text{MPa}$), mais aussi une capacité de stockage de chaleur à basse température (61kWh/m^3) qui permettrait d'améliorer la performance énergétique des bâtiments. Ainsi, il est maintenant envisagé d'effectuer des tests dans les conditions réelles du stockage de chaleur dans le bâtiment pour valider le fonctionnement en cas réel.

Références

- [1] L. M. Sun, N. B. Amar, F. Meunier, Numerical Study on Coupled Heat and Mass Transfers in an Adsorber with External Fluid Heating, *Heat Recovery Systems & CHP* 15 (1995): 19-29.
- [2] M. Duquesne, J. Toutain, A. Sempey, S. Ginestet, E. P. del Barrio, Modeling of a nonlinear thermochemical energy storage by adsorption on zeolites, *Applied Thermal Engineering* 71 (2014): 469-80.
- [3] L. J. Struble, and P. W. Brown, Heats of dehydration and specific heat of compounds found in concrete and their potential for thermal energy storage, *Solar Energy Materials* 14 (1986): 1-12
- [4] T. Nishikawa, K. Suzuki, S. Ito, K. Sato, T. Takebe, Decomposition of synthesized ettringite by carbonation, *Cement and Concrete Research* 22 (1992): 6-14.
- [5] I. I., El-Sharkawy, B. B. Saha, S. Koyama, K.C. Ng, A study on the kinetics of ethanol-activated carbon fiber: Theory and experiments, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 49 (2006): 3104-10.
- [6] G. Pickett, Modification of the Brunauer-Emmett-Teller theory of multimolecular adsorption, *Journal of American Chemical Society* 67 (1945): 1958-1962.
- [7] C.W. Gear, L.R. Petzold, ODE methods for the solution of Differential/Algebraic systems, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 21 (1984): 521- 716.