

Modélisation d'un stockage latent solide-liquide pour des process à haut rendement énergétique

Auteur : Eric PERNOT, Laboratoire de Thermique Energétique et Procédés, LaTEP, EA 1932
eric.pernot@univ-pau.fr

Co-auteurs : Erwin FRANQUET, Adrien LOMONACO, Didier HAILLOT, Jean-Pierre BEDECARRATS, Laboratoire de Thermique Energétique et Procédés, LaTEP, EA 1932

L'un des principaux leviers technologiques permettant le développement industriel de process de production énergétique, et à haute efficacité, consiste en l'élaboration d'une solution innovante de stockage de l'énergie. Ce système de stockage doit permettre de lisser la période de production et ainsi de suivre au plus près les besoins des consommateurs.

Parmi les solutions existantes, le stockage thermique par chaleur latente présente de nombreux avantages qui font qu'aujourd'hui il fait l'objet de plusieurs travaux de recherche et de développement. Cette technologie est basée sur le principe que certaines classes de matériaux libèrent (transition liquide/solide) ou accumulent (transition solide/liquide) de l'énergie lorsqu'ils sont soumis à un changement de phase.

En amont du développement d'un design de stockage, il est essentiel de comprendre et de maîtriser les processus thermiques entrant en jeu lors des phases de fusion et de solidification du matériau et cette compréhension passe par le développement de modèles numériques adaptés aux problématiques rencontrées.

Le travail réalisé au sein du LaTEP consiste à analyser les performances d'une solution de stockage via la modélisation de cette dernière en considérant les phénomènes thermiques et hydrauliques. Le travail de modélisation est effectué à l'aide du logiciel de CFD libre de droit OpenFOAM dans lequel est développé et implémenté, par le laboratoire, un module dédié au problème qui nous concerne, à savoir la résolution eulérienne (maillage fixe) des équations de conservation pour un fluide incompressible, en présence d'un changement de phase solide-liquide dominé par des mouvements convectifs (convection – dominated phase change).

L'objet de la communication est de présenter une partie des résultats obtenus via l'utilisation de l'outil de modélisation. Les propriétés thermophysiques du MCP utilisé sont des données d'entrée essentielles pour le modèle. Elles sont déterminées au sein du laboratoire. Le modèle permet de montrer la prépondérance d'une bonne détermination de ces propriétés. Un soin particulier sera également apporté à l'explicitation des modèles numériques employés pour caractériser le changement de phase.

Nomenclature

A	fonction de porosité, $\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	<i>Symboles grecs</i>	
c	capacité calorifique massique, $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	β	coefficient de dilatation thermique, K^{-1}
e	épaisseur, m	ρ	masse volumique, kg m^{-3}
g	accélération de la pesanteur, m s^{-2}	μ	viscosité dynamique, $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$
h	enthalpie massique, J kg^{-1}	ν	viscosité cinématique, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
k	conductivité thermique, $\text{W K}^{-1} \text{m}^{-1}$	<i>Indices et exposants</i>	
l	longueur, m	E	eutectique
L	chaleur latente massique, J kg^{-1}	F	fusion
P	pression, Pa	l	liquide
r	rayon, m	liq	liquidus
T	température, K	ref	référence
\vec{V}	vitesse, m s^{-1}	s	solide
x	coordonnée spatiale, m	sol	solidus
y	coordonnée spatiale, m	w	solvant
Y	fraction massique	<i>Abréviations</i>	
z	coordonnée spatiale, m	MCP	matériau à changement de phase
		CFD	computational fluid dynamics

1. Introduction

L'augmentation de la part des ressources renouvelables comme énergie primaire dans le processus de production d'électricité passe par la levée de nombreux verrous technologiques. Parmi eux, la question de l'intermittence de la ressource représente un enjeu crucial pour tous les acteurs du domaine. Dans cette optique, un recours croissant aux matériaux à changement de phase (MCP) est fait pour répondre à la problématique du lissage de la production électrique, via la mise en place d'un système de stockage thermique [1]. Plusieurs auteurs se sont penchés sur l'étude numérique des performances de ce type de stockage [2], [4], [5], [6]. Bien souvent, la détermination précise des propriétés intrinsèques des MCP employés ne fait pas l'objet d'analyses approfondies. Or ces propriétés sont des paramètres de simulation essentiels pour une détermination juste des performances du système de stockage thermique modélisé.

L'outil présenté dans cet article permet la simulation des phénomènes thermiques couplés (transferts de chaleur et de masse), en présence de conduction et de convection, d'un système de stockage de chaleur incluant une partie latente. Nous montrons ici la prépondérance d'une bonne détermination des propriétés des matériaux à changement de phase dans l'analyse des performances d'une solution de stockage thermique. Cette analyse se fait via la modélisation du stockage en considérant les phénomènes thermiques et hydrauliques et plus particulièrement, dans le cadre de cette communication, au travers du taux de remplissage.

2. Modélisation du changement de phase solide/liquide

2.1. Équations caractéristiques

La stratégie adoptée ici s'appuie sur une résolution eulérienne (maillage fixe) des équations de conservation pour un fluide incompressible, en présence d'un changement de phase dominé par des mouvements convectifs (convection-dominated phase change). Concrètement, on repart de la formulation des équations de conservation qui se présente sous la forme du système d'équations aux dérivées partielles suivant :

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{V}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \otimes \vec{V} + PI) = \vec{\nabla} \cdot (\mu \vec{\nabla} \vec{V}) - A \vec{V} + \rho \vec{g} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho h \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) \quad (3)$$

nb : on suppose que toutes les propriétés thermophysiques (capacités calorifiques, conductivités thermiques et viscosité) sont indépendantes de la température.

En ce qui concerne la prise en compte de la condition d'annulation de la vitesse lorsque le fluide passe de l'état liquide à l'état solide, on utilise la méthode enthalpique avec porosité artificielle (enthalpy-porosity method) [7]. Le principe de base consiste à supposer que le front de fusion se comporte comme un milieu poreux. Ceci implique d'ajouter un terme source de type Darcy dans les équations de quantité de mouvement. Ce terme comporte une porosité qui évolue avec la fraction solide de manière à s'annuler lorsque celle-ci est égale à un. Ainsi, on arrive à annuler progressivement la vitesse lorsqu'on passe de la phase liquide à la phase solide. En pratique ce terme source est directement proportionnel à la vitesse et fait intervenir la fonction de porosité A , que nous allons détailler plus bas.

On se place dans le cadre de l'approximation de Boussinesq, qui suppose que la masse volumique est constante hormis pour le terme de poussée hydrostatique dans l'équation de quantité de mouvement (2). Le second membre est alors grandement simplifié et fait intervenir le nouveau terme :

$$\sum \vec{F}_{\text{vol}} = -\rho g \beta (T - T_{\text{ref}}) \vec{e}_z \quad (4)$$

Finalement, la fermeture du système des équations (1) à (3) se fait par la définition de la loi d'état qui permet de relier l'enthalpie massique à la température. Nous verrons ci-dessous les deux modèles thermodynamiques envisagés dans notre étude pour un MCP.

2.2. Fermeture thermodynamique

La résolution du système d'EDP précédent implique d'explicitier la relation $h(T)$ entre l'enthalpie et la température. Dans cette section, vous seront présentées les relations dans le cas d'un corps pur et dans le cas particulier d'une solution binaire eutectique. Première remarque, la fonction $h(T)$ est discontinue pour le corps pur alors qu'elle est continue pour le mélange. Par ailleurs, dans le premier cas, le changement de phase est caractérisé par une unique température T_F et une chaleur latente L_F tandis que, dans le second cas, il se caractérise par une fusion progressive sur l'intervalle $[T_E, T_F]$ comme observé sur la figure 1.

Mathématiquement, la formulation de l'enthalpie pour un corps pur est la suivante :

$$h = \begin{cases} h_{\text{ref}} + c_s (T - T_{\text{ref}}) & \text{si } T < T_F \\ h_{\text{ref}} + c_s (T_F - T_{\text{ref}}) + Y_l L_F & \text{si } T = T_F \\ h_{\text{ref}} + c_s (T_F - T_{\text{ref}}) + L_F + c_l (T - T_F) & \text{si } T > T_F \end{cases} \quad (5)$$

Tandis que pour un binaire, on a une expression du type [9] :

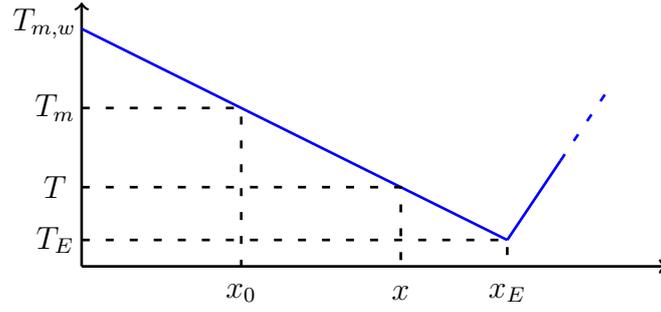


Figure 1 Phase diagram for an eutectic solution [8]

$$h = \begin{cases} h_{\text{ref}} + c_s (T - T_E) & \text{si } T \leq T_E \\ h_{\text{ref}} + \text{const1} + (T_{F,w} - T_F) \left(\frac{L_{F,w}}{T_{F,w} - T} \right) \\ \quad + c_s (T + (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T)) - c_l (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T) & \text{si } T_E \leq T \leq T_F \\ h_{\text{ref}} + c_l (T - T_F) + \text{const2} & \text{si } T > T_F \end{cases} \quad (6)$$

Avec :

$$\text{const1} = L_E - \left((T_{F,w} - T_F) \left(\frac{L_{F,w}}{T_{F,w} - T_E} \right) \right) + c_s \left(T_E + (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_E) \right) - c_l (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_E) \quad (7)$$

Et :

$$\text{const2} = c_s \left(T_F + (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_F) \right) - c_l (T_{F,w} - T_F) \ln (T_{F,w} - T_F) + \text{const1} \quad (8)$$

Concernant l'expression de la fraction massique de liquide Y_l du corps pur, on suppose une variation linéaire de la forme :

$$Y_l = \begin{cases} 0 & \text{si } h < c_s T_F \\ \frac{h - c_s T_F}{L_F} & \text{si } c_s T_F \leq h < c_s T_F + L_F \\ 1 & \text{si } h \geq c_s T_F + L_F \end{cases} \quad (9)$$

Dans le cas de la solution binaire, on définit la fraction massique liquide comme suit :

$$Y_l = \begin{cases} 0 & \text{si } h < 0 \\ \frac{h}{\text{const2}} & \text{si } 0 \leq h < \text{const2} \\ 1 & \text{si } h \geq \text{const2} \end{cases} \quad (10)$$

2.3. Fonction de porosité

Dans leur article original, Voller & Prakash [7] ont proposé l'expression suivante pour la fonction de porosité :

$$A = -C \frac{(1 - \lambda)^2}{\lambda^3 + q} \quad (11)$$

avec C et q des constantes déterminées expérimentalement pour rendre compte de la morphologie du poreux, et λ la porosité associée ayant pour définition $\lambda = 1 - Y_s$.

2.4. Résolution numérique

Ayant défini le système d'EDP caractérisant notre problème d'un changement de phase liquide/solide en présence d'effets convectifs, nous nous intéressons désormais à la méthode numérique utilisée pour son intégration.

La résolution envisagée se fait donc avec le logiciel libre OpenFOAM [10], qui est un code volume fini centré aux mailles développé en C++. Dans la version 2.2.1 que nous utilisons, le modèle de transition de phase qui nous intéresse n'est pas disponible, nous l'avons donc développé afin qu'il soit implémenté dans la librairie de modèles physiques d'OpenFOAM. En pratique, nous utilisons une méthode de résolution découplée des EDP basée sur l'algorithme PIMPLE. Celui-ci est une combinaison des algorithmes bien connus PISO (Pressure-Implicit Split-Operator) et SIMPLE (Semi-Implicit method for Pressure-Linked Equations) et résout donc les équations en grille décalée.

3. Résultats

3.1. Définition du cas test

Afin de bien démontrer le propos de cette étude, nous allons considérer le cas simple d'un stockage rectangulaire (dimension 400x10 mm), avec température fixe à la limite inférieure et une condition adiabatique sur les autres parois. On regardera successivement le cas d'une charge, d'une décharge et d'un cycle. Concernant le MCP, nous envisagerons les fermetures thermodynamiques présentées plus haut, avec deux situations différentes pour le cas de la solution binaire ; en pratique, les fonctions utilisées sont celles visibles sur la figure 2(a). Les propriétés des matériaux simulés sont quant à elles données dans les tableaux 1 et 2. Le calcul se fait sur un maillage régulier, identique pour chaque cas, défini par un pas d'espace de 8x1 mm. Le pas de temps est de 0.02 s. Ces valeurs ont été choisies de telle sorte à assurer la stabilité numérique de notre simulation.

ρ	c_s	c_l	k	L_F	T_F	β	ν
820	930	700	0.2	254 000	308.15	$1 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-6}$

Tableau 1 *Propriétés thermophysiques MCP corps pur.*

Afin de comparer les résultats renvoyés par l'ensemble de nos simulations, nous allons calculer le taux de remplissage (ou fill factor) au cours du temps. Ce paramètre, très souvent utilisé

ρ	c_s	c_l	k	$L_{F,w}$	$T_{F,w}$	β	ν	L_E	T_E
820	890	700	0.2	321 000	306.3	$1 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-6}$	0	300

Tableau 2 *Propriétés thermophysiques MCP solution binaire.*

comme critère de performance d'un système de stockage thermique, est défini comme le rapport de l'énergie stockée (ou déstockée) à un instant donné sur la capacité totale de stockage (ou de déstockage) maximale du système. Nous présenterons alors l'évolution du fill factor au cours du temps durant les différentes simulations.

3.2. Charge et décharge

Les résultats liés à la dynamique de charge/décharge du système sont présentés sur les figures 2(c) et 2(d) en fonction de la modélisation retenue pour le MCP pour des temps physiques similaires. Ici la température de la paroi inférieure est fixée à $326.15K$ dans le cas d'une charge et à $298.15K$ dans le cas d'une décharge. Il est clair que l'on aboutit à des résultats différents, pouvant aller jusqu'à 10% d'écart en stockage et jusqu'à 20% en déstockage. Sachant que le taux de remplissage est un paramètre essentiel pour les industriels dans le processus de dimensionnement du système, un tel écart peut clairement compromettre les conditions opératoires optimales.

3.3. Cyclage

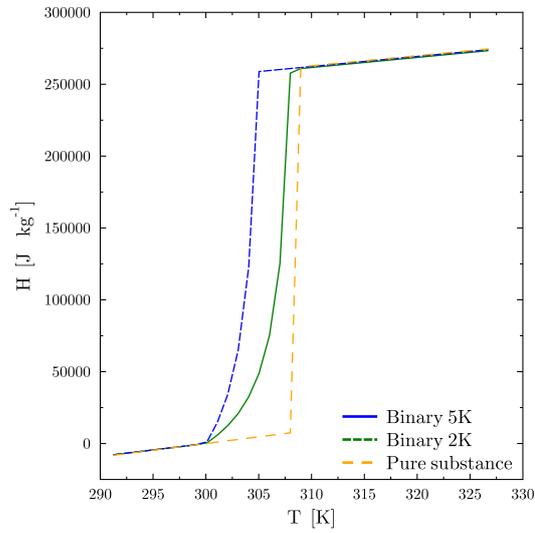
Si l'on envisage maintenant une situation proche des conditions réelles de fonctionnement de ce type d'installation, il est nécessaire d'envisager un cycle charge/décharge du stock. Les résultats de simulation correspondants sont fournis sur la figure 2(b); il est clair que selon la façon de modéliser le MCP, on peut aboutir à une erreur sur la quantité totale stockée et de facto à la valeur finale encore disponible à la fin du cycle. Concrètement, cela signifie que l'on pourrait stopper le processus de stockage bien avant d'être certain d'avoir complètement saturé le système ou au contraire que l'on devra maintenir une circulation du fluide caloporteur au-delà du temps nécessaire. De manière similaire, on peut facilement imaginer que le stock se déchargera avec une dynamique bien différente de ce qui était initialement prévu lorsque le nombre de cycles augmentera; en pratique, cela risque de conduire à des situations où aucune énergie ne sera disponible, ce qui implique un arrêt de la production.

4. Conclusion

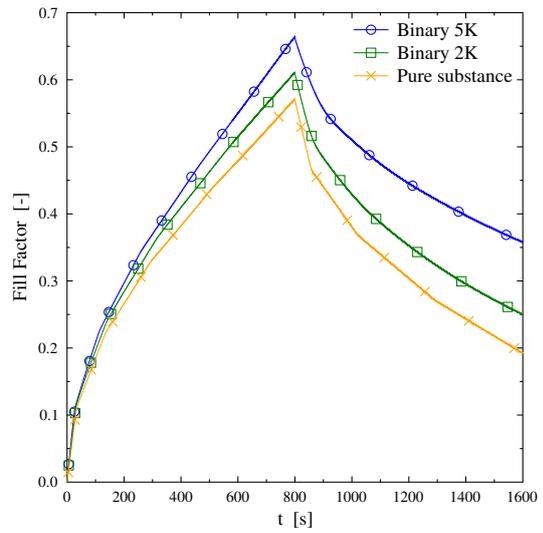
Au travers de l'analyse d'un critère énergétique, le taux de remplissage, il a été démontré dans notre étude l'enjeu que représente une bonne détermination des propriétés du MCP en phase de dimensionnement d'un système de stockage thermique. Mais l'influence de ces paramètres thermodynamiques s'observe également sur d'autres variables, par exemple, lorsque l'on étudie l'évolution du front de fusion et sa déformation au cours du temps induite par les mouvements convectifs dans la phase liquide.

Références

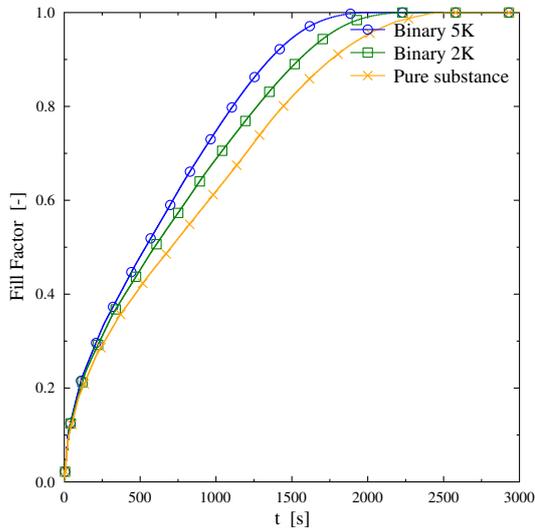
- [1] S. Weitemeyer, D. Kleinhans, T. Vogt and C. Agert, *Integration of Renewable Energy Sources in Future Power Systems : The Role of Storage*, ArXiv e-prints (2014).
- [2] A. A. Al-Abidi, S. Mat, K. Sopian, M. Sulaiman and A. T. Mohammed, CFD applications for latent heat thermal energy storage : a review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 20 (2013), 353-363.
- [3] A. A. Al-Abidi, S. Mat, K. Sopian, M. Sulaiman and A. T. Mohammed, Numerical study of PCM solidification in a triplex tube heat exchanger with internal and external fins, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 61 (2013), 684-695.
- [4] K. Nithyanandam and R. Pitchumani, Computational studies on a latent thermal energy storage system with integral heat pipes for concentrating solar power, *Energy*, 103 (2013), 400-415.
- [5] F. Agyenim, N. Hewitt, P. Eames and M. Smyth, A review of materials, heat transfer and phase change problem formulation for latent heat thermal energy storage systems (LHTESS), *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 14 (2010), 615-628.
- [6] P. Verma, S. Varun and S. Singal, Review of mathematical modeling on latent heat thermal energy storage systems using phase-change material, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 12 (2008), 999-1031.
- [7] V. Voller and C. Prakash, A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30 (1987), 1709-1719.
- [8] P. Papon, J. Leblond and P. H. E. Meijer, *The Physics of Phase Transitions : Concepts and Applications*, Springer Netherlands, 2006.
- [9] E. Franquet, S. Gibout, J.-P. Bédécarrats, D. Haillot and J.-P. Dumas, Inverse method for the identification of the enthalpy of phase change materials from calorimetry experiments, *Thermochemical Acta*, 546 (2012), 61-80.
- [10] <http://www.openfoam.com>



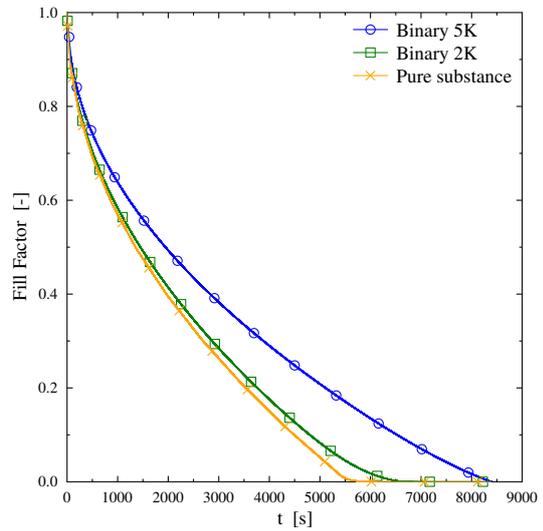
(a) Modèles thermodynamiques utilisés pour l'enthalpie du MCP.



(b) Fill Factor en cycle.



(c) Fill Factor en stockage.



(d) Fill Factor en déstockage.

Figure 2 Comparaison des taux de remplissage obtenus selon le modèle thermodynamique du MCP