

Etude des Transferts Thermiques au Sein d'un Lit de Particules Contenant un Matériau à Changement de Phase pour le Stockage de Chaleur

M. BELOT^a, G. VINAY^a, A. TOUTANT^b, Q. FALCOZ^b

a. IFP Energies Nouvelles, 1 avenue Bois Préau, 92500 Rueil-Malmaison

malik.belot@ifpen.fr

guillaume.vinay@ifpen.fr

b. Laboratoire PROMES (UPR 8521), 7 rue du Four Solaire 66120 Odeillo Font-Romeu

Université de Perpignan Via Domitia

adrien.toutant@univ-perp.fr

quentin.falcoz@univ-perp.fr

Résumé :

Le procédé AA-CAES (Advanced Adiabatic Compressed Air Energy Storage) vise à stocker de l'électricité via la compression d'air. Il est possible de stocker la chaleur alors créée afin d'améliorer le rendement du procédé, par exemple dans des lits (fixes ou fluidisés) de particules contenant un Matériau à Changement de Phase (MCP). Les effets du changement de phase, notamment la convection naturelle dans la particule lorsque le MCP est en phase liquide, influencent les transferts thermiques dans l'ensemble du lit. Le travail réalisé a donc consisté à évaluer l'impact de ce phénomène à l'aide de simulations sous OpenFOAM d'une unique particule en phase liquide afin de l'implémenter par la suite dans un lit entier. Les résultats obtenus ont permis de déterminer l'effet de la convection sur les échanges et d'établir une corrélation reliant le nombre de Nusselt aux nombres de Prandtl et Rayleigh de la particule. Cette corrélation permet de recalculer l'évolution temporelle de la température moyenne de la particule à partir de la connaissance des nombres de Prandtl et Rayleigh. La température moyenne ainsi recalculée et la température moyenne obtenue par simulation sous OpenFOAM ont ensuite été comparées pour divers couples (Rayleigh, Prandtl) afin de valider cette corrélation.

Abstract :

AA-CAES (Advanced Adiabatic Compressed Air Energy Storage) is a process which aims to store electricity by compressing ambient air. The heat produced can be stored in particle beds (packed or fluidized) made of Phase Change Material (PCM) which will modify the heat transfer throughout the whole bed compared with solid particle beds. One phenomenon involved is the natural convection occurring when the PCM is in liquid phase, whose effect was investigated by simulating an isolated particle in liquid phase in the OpenFOAM software. A correlation between the Nusselt and Prandtl and Rayleigh numbers was established and validated by comparison of the predicted temporal

evolution of the mean temperature of the particle with the profiles obtained in the OpenFOAM simulations for different (Rayleigh, Prandtl) values.

Mots clefs : Transferts thermiques ; Convection naturelle ; Matériaux à Changement de Phase ; CFD Changement de phase

1 Introduction

La convection naturelle au sein d'une particule contenant un Matériau à changement de phase (MCP) en phase liquide est un phénomène influençant les transferts thermiques entre la particule de MCP et le fluide environnant en modifiant le champ de température interne par advection (par rapport au cas d'une particule solide dans laquelle le transfert sera purement conductif). L'objectif de cette étude est d'analyser l'influence de cette convection naturelle sur les transferts thermiques pour une particule isolée et d'établir un modèle permettant de prendre en compte ses éventuels effets en vue d'une implémentation ultérieure dans le code de calcul PeliGRIFF (<http://www.peligriff.com>, voir les travaux de l'équipe pour une description et une évaluation des performances du code [1-3]) à l'échelle microscopique (soit un lit contenant jusqu'à quelques milliers de particules) puis mésoscopique (jusqu'à quelques millions de particules).

2 Description du problème

Le maillage de la particule (voir **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**) a été réalisé en 3D à l'aide de l'outil de génération *snappyHexMesh* inclus dans OpenFOAM avec un raffinement sur les bords de la sphère de manière à obtenir une meilleure précision au niveau de la zone où s'effectuent les transferts thermiques entre le fluide externe et le MCP. Par souci de simplicité, l'impact de ce fluide externe a été pris en compte en imposant une valeur donnée à la température de la paroi de la particule tout au long des simulations, plus élevée que la température initiale du MCP.

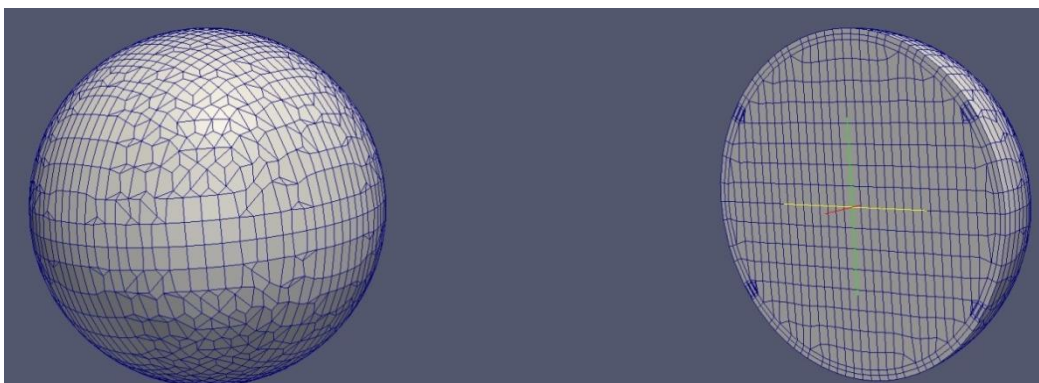


Figure 1 : Maillage de la particule simulée sous OpenFOAM

Afin de couvrir une gamme de nombre de Rayleigh et de Prandtl significative tout en gardant un temps de calcul et de traitement raisonnable, l'étude a, dans un premier temps, été menée en considérant les 9 cas (numérotés de 0 à 8) présentés dans le Tableau 1 ci-dessous. Ces cas ont été choisis de manière à se placer dans des conditions réalistes au regard des conditions opératoires potentiellement présentes dans un lit de particules utilisé pour le stockage thermique.

Tableau 1 : Cas considérés pour l'étude de l'influence de la convection naturelle

Rayleigh \ Prandtl	59,76	5,976	0,5976
$3,3 \cdot 10^7$	0	1	2
$3,3 \cdot 10^6$	3	4	5
$3,3 \cdot 10^5$	6	7	8

Le solveur utilisé, *buoyantBoussinesqPimpleFoam*, est un solveur fonctionnant en régime transitoire qui permet le couplage entre le champ de vitesse et de température par l'approximation de Boussinesq. Cette dernière consiste à considérer que les variations de masse volumique du fluide sont assez petites pour que leur influence soit négligée, excepté dans le terme correspondant aux forces de gravité dans l'équation de quantité de mouvement.

2 Validation du modèle numérique

Le maillage et les différents paramètres de l'étude ont été validés à travers une convergence en maillage et en pas de temps réalisées sur le cas où les transferts de quantité de mouvement et de chaleur sont les plus rapides, c'est-à-dire le cas 2, qui correspond au plus grand nombre de Rayleigh et au plus petit nombre de Prandtl.

La simulation a été effectuée pour trois pas de temps ($\Delta t_1 = 10^{-2}$ s ; $\Delta t_2 = 10^{-3}$ s ; $\Delta t_3 = 10^{-4}$ s) et trois niveaux de raffinement de maillage ($f_1 = 2036$; $f_2 = 12792$; $f_3 = 86852$ cellules) différents. Les valeurs de la température moyenne et de la quantité d'énergie échangée entre le fluide et la paroi ont été ensuite récupérées pour différents temps physiques d'une part et moyennées sur l'ensemble de la simulation d'autre part. Les résultats sont regroupés dans les tableaux Tableau 2 et Tableau 3 ci-dessous :

Tableau 2 : Valeurs de la température et du flux entre la paroi et le liquide pour la convergence en pas de temps

Moyenne	<T> (K)	<Flux> (W)	t = 5s	T (K)	Flux (W)	t = 50s	T (K)	Flux (W)
Δt_3	312.4912	21.6917	Δt_3	309.8545	47.4178	Δt_3	313.1340	13.6621
Δt_2	312.4895	21.5447	Δt_2	309.8436	47.7953	Δt_2	313.1319	13.7134
Δt_1	312.4924	21.8392	Δt_1	309.8505	47.3560	Δt_1	313.1320	13.7099

Tableau 3 : Valeurs de la température et du flux entre la paroi et le liquide pour la convergence en maillage

Moyenne	<T> (K)	<Flux> (W)	t = 5s	T (K)	Flux (W)	t = 50s	T (K)	Flux (W)
f_3	312.4998	24.4638	f_3	309.0860	47.7993	f_3	313.1340	13.6602
f_2	312.4895	21.5447	f_2	309.0436	47.7953	f_2	313.1319	13.7134
f_1	312.4847	20.0918	f_1	309.0255	48.6082	f_1	313.1320	13.5944

Les valeurs contenues dans ces tableaux ne varient pas de manière monotone avec le pas de temps ou le niveau de raffinement du maillage. Ainsi, il n'est pas possible d'utiliser la méthode d'interpolation de Richardson pour déterminer l'erreur faite par rapport à un maillage/pas de temps infiniment fin.

Cependant, les différences obtenues entre les valeurs du pas de temps le plus petit et le plus grand sont très faibles (inférieures à 0,7 %). Il en est de même pour les valeurs de la température dans le cas de la convergence en maillage. Les différences sur les valeurs du flux sont en revanche un peu plus importantes pour la convergence en maillage, mais cela peut s'expliquer par la dépendance du calcul du flux avec le maillage dans les tous premiers instants de la simulation (le gradient de température à

la paroi étant calculé à l'aide de la distance entre la paroi et la première maille), cette dépendance étant par la suite corrigée par les valeurs de la température.

Etant donnée la faible dépendance de la température avec les pas de temps et les maillages testés, la solution médiane a été choisie pour réaliser les simulations ($\Delta t = 10^{-3}$ s et $f = 12792$ cellules) afin de garder des temps de simulation raisonnables.

En parallèle, le cas de la conduction pure ($Ra = 0$) a été simulé avec $\Delta t = 10^{-3}$ s et $f = 12792$ cellules et $Pr = 59,76$ afin de retrouver les valeurs théoriques du nombre de Nusselt ($Nu = 2$) [5] et du profil de température [6]. La Figure 2 montre la comparaison entre le profil de température analytique et issu de la simulation le long de l'axe central de la particule au bout de 2000 secondes.

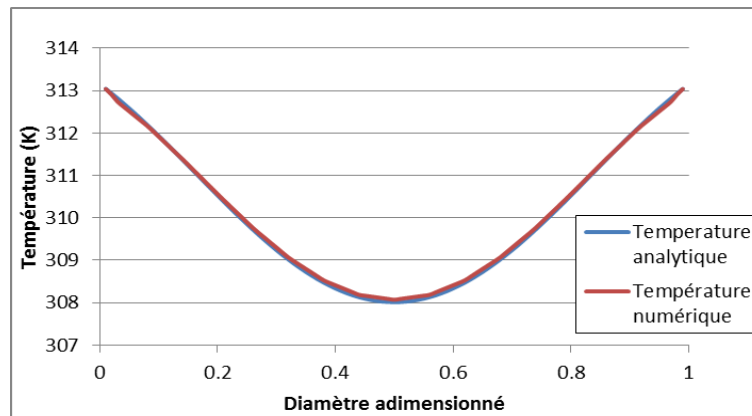


Figure 2 : Comparaison des profils de température analytique et simulé le long de l'axe central de la particule pour t=2000s

Les deux profils correspondent bien, et il en va de même pour les autres temps testés (à savoir 500, 1000 et 10000 secondes). La Figure 3 ci-dessous représente les erreurs entre température analytique et numérique en fonction du temps et du diamètre. Si l'on fait la moyenne de toutes les valeurs obtenues, on obtient finalement une erreur de 0,023 % sur le calcul de température, soit un écart absolu moyen de 0,07 K par rapport à la température analytique :

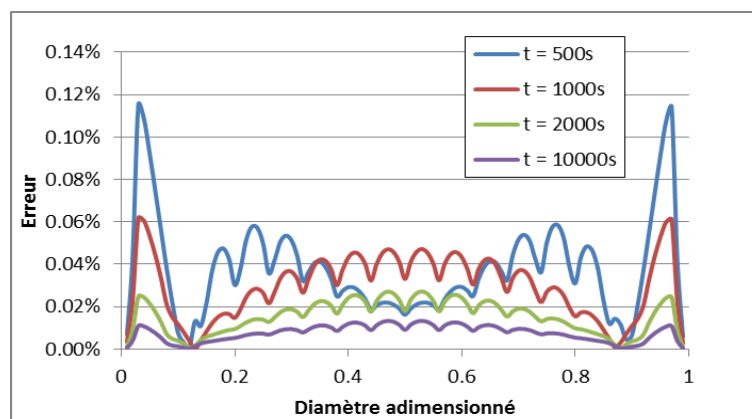


Figure 3 : Erreur à la température analytique en fonction du temps et du diamètre de la particule

Le nombre de Nusselt se stabilise à une valeur d'environ 2,093 soit un écart de 4,65 % par rapport à la valeur attendue de 2. Cela peut sembler important si l'on considère le pourcentage, cependant l'erreur absolue ne représente que 0,07 % des valeurs initiales du nombre de Nusselt, d'environ 130.

3 Résultats

3.1 Corrélation pour le nombre de Nusselt

Les simulations montrent bien l'effet de la convection naturelle sur les transferts thermiques. La Figure 4 ci-dessous montre l'évolution de la température moyenne de la particule en fonction du temps dans le cas de la conduction et le cas 0 du Tableau 1 (soit $Ra = 3,3.10^7$ et $Pr = 59,76$).

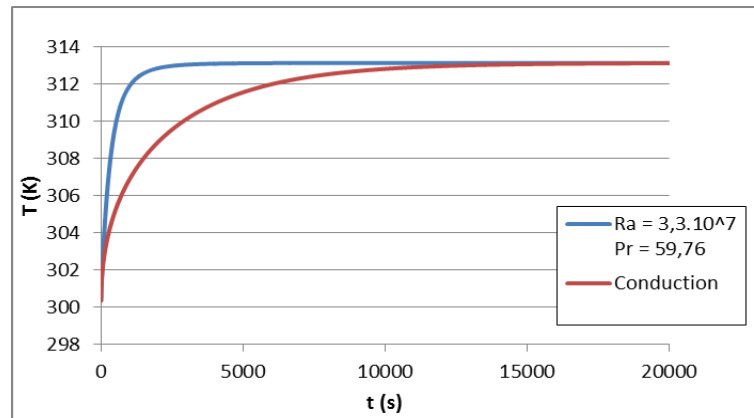


Figure 4 : Comparaison de la variation de la température moyenne de la particule au cours du temps entre le cas conductif et le cas 0 ($Ra = 3,3.10^7$, $Pr = 59,76$)

Comme cela était attendu, la présence de la convection naturelle accélère de manière significative les transferts thermiques, le maximum de température n'étant atteint qu'après environ 4 fois plus de temps lorsqu'elle n'est pas présente. Cette accélération est due au transport de liquide chaud des parois vers le haut de la particule tandis que le liquide froid descend au centre, comme le montre la Figure 5 suivante :

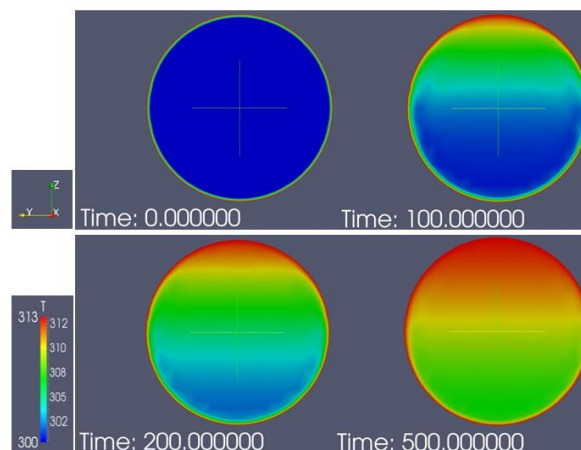


Figure 5 : Evolution de la température de la particule au cours du temps, $Ra = 3,3.10^7$ et $Pr = 59,76$

Afin de prendre en compte cette influence lors du calcul de la température d'une particule, nous avons choisi d'établir une corrélation entre le nombre de Nusselt, le nombre de Prandtl et le nombre de Rayleigh à la manière des corrélations présentes dans la littérature, pour des cas proches, notamment [7] qui propose, pour une cavité rectangulaire en régime permanent la corrélation empirique suivante :

$$Nu = 0,224Ra^{0,257}Pr^{0,056} \quad (1)$$

Une corrélation de ce type a l'avantage d'être simple à établir et permet de déterminer le flux reçu par la cavité uniquement à partir de données facilement accessibles (propriétés du fluide et température). C'est donc une corrélation sous cette forme qui a été établie dans cette étude.

Comme le nombre de Nusselt varie au cours du temps, celui-ci a été moyenné sur un intervalle de temps $[0, t_{lim}]$ représentant la période durant laquelle la convection naturelle est réellement effective, c'est-à-dire pour laquelle l'écart de température entre la paroi de la particule et le fluide qu'elle contient est un moteur du mouvement suffisamment important. Il a ainsi été possible de relier un nombre de Nusselt unique à un couple (Prandtl, Rayleigh) pour chaque simulation. Après plusieurs essais de critères permettant de déterminer cet instant, la valeur de t_{lim} a été prise comme étant le temps à partir duquel la magnitude de la vitesse moyenne du fluide au sein de la particule était inférieure à 80% de sa valeur maximale.

Les coefficients de la corrélation ont ensuite été ajustés à partir d'une régression linéaire de la forme logarithmique de cette expression par une méthode des moindres carrés. L'expression suivante a finalement été obtenue :

$$Nu = 1,26Ra^{0,22}Pr^{0,054} \quad (2)$$

Ces valeurs sont du même ordre de grandeur que celles de la corrélation (1) notamment.

3.2 Test de la corrélation

Afin de s'assurer que les travaux précédents permettaient une prédiction correcte des transferts thermiques au sein d'une particule, les corrélations établies ont été utilisées pour recalculer l'évolution de la température moyenne du fluide au cours du temps. Pour cela, le nombre de Nusselt issu de la corrélation a été calculé à partir des nombres de Rayleigh et de Prandtl de chaque cas puis injecté dans le bilan de variation de la température moyenne de la particule au cours du temps.

Ce nombre de Nusselt peut toutefois être calculé de deux manières différentes :

- Nombre de Nusselt constant calculé à partir du nombre de Rayleigh initial (par exemple $Ra = 3,3 \cdot 10^7$ pour le cas 0)
- Nombre de Nusselt variable calculé en actualisant le nombre de Rayleigh avec la température moyenne de la particule au cours du temps.

La Figure 6 compare les valeurs de la température obtenues par la simulation (courbe bleue) entre l'instant initial et celui où 95% de la valeur finale est atteinte, de la température recalculée à l'aide du nombre de Nusselt constant via l'équation (courbe rouge) et la température recalculée à l'aide du nombre de Nusselt variable (courbe verte) pour le cas 6 ($Ra = 3,3 \cdot 10^5$ et $Pr = 59,76$) pour lequel l'erreur est la plus grande.

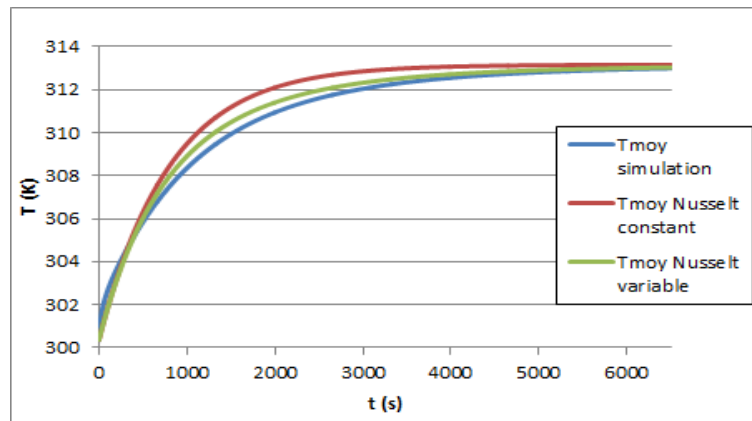


Figure 6 : Variation de la température en fonction du temps simulée (en bleu), calculée avec un Nu constant (en rouge), calculée avec un Nu variable (en vert) pour le cas 6 ($Ra = 3,3 \cdot 10^5$ et $Pr = 59,76$)

Dans tous les cas, les profils obtenus sont en bonne adéquation avec les données tirées des simulations. Les calculs de la température effectués en considérant le nombre de Nusselt variable avec le temps sont également plus précis. Les moyennes des erreurs pour l'ensemble des cas sont regroupées dans le Tableau 4 :

Tableau 4: Erreurs sur le calcul de la température comparé au profil simulé

	Nu constant	Nu variable
Erreur rel.	0.200%	0.074%
Erreur abs. (K)	0.621	0.229

Ces erreurs restent très faibles, et montrent qu'il est possible de recalculer de manière assez précise l'évolution de la température moyenne de la particule à l'aide de la corrélation.

Par ailleurs, afin de s'assurer de sa capacité à prédire la variation de température pour tous les couples (Ra , Pr) des intervalles utilisés pour l'établir (à savoir $[3,3 \cdot 10^5 ; 3,3 \cdot 10^7]$ pour le nombre de Rayleigh et $[0,5976 ; 59,76]$ pour le nombre de Prandtl) et pas seulement des 9 cas à partir desquels la corrélation a été calculée, il était nécessaire de la tester sur au moins un cas avec un couple différent de ceux du Tableau 1. Ainsi, en plus des cas déjà existants, la corrélation a également été testée sur un cas supplémentaire pour les valeurs des nombres de Prandtl et de Rayleigh de $Ra = 1,68 \cdot 10^6$ et $Pr = 1$, valeurs choisies de manière à obtenir un cas faisant partie des intervalles évoqués précédemment. La Figure 7 montre les profils de température correspondant :

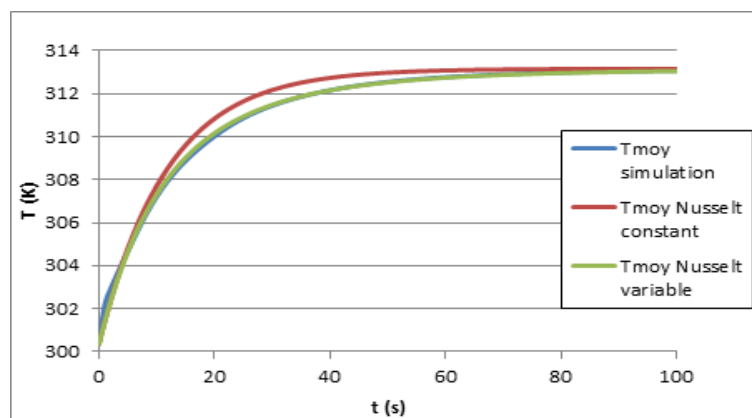


Figure 7 : Variation du profil de température du cas supplémentaire simulée (en bleu), calculée avec un Nu constant (en rouge), calculée avec un Nu variable (en vert)

L'erreur est ici similaire aux cas précédemment testés, l'évolution de la température moyenne est en effet correctement prédite par la corrélation à 0,05 K près en moyenne.

4 Conclusion et perspectives

La convection naturelle pour une particule de MCP en phase liquide a été le premier phénomène investigué lors de cette étude. Son effet est bien visible sur les transferts thermiques entre la particule et le fluide qui l'entoure. A partir de la simulation de plusieurs cas, choisis afin de couvrir une gamme de nombres de Prandtl et de Rayleigh pour lesquels l'importance de la convection naturelle est significative tout en restant dans des conditions réalistes vis-à-vis des conditions opératoires rencontrées dans un lit de particules, une corrélation permettant de déterminer le nombre de Nusselt a donc été établie.

Cette corrélation a été validée, d'abord en recalculant la variation de la température moyenne pour les cas à partir desquels elle a été établie, puis en calculant cette variation pour un nouveau cas, afin de confirmer sa capacité prédictive. Les résultats obtenus confirment la validité de la corrélation.

Les travaux restant à effectuer seront principalement réalisés sous PeliGRIFF, en vue de simuler des lits de particules de MCP. Il s'agit de l'implémentation de la corrélation pour la convection naturelle, de l'étude du changement de phase puis des études à l'échelle microscopique, suivies par l'implémentation du modèle à l'échelle méso et de l'étude de lits à cette échelle.

Références

- [1] A. Wachs, PeliGRIFF, a parallel DEM-DLM/FD direct numerical simulation tool for 3D particulate flows *Journal of Engineering Mathematics* 71 (2011) 131-155
- [2] C. Dan, A. Wachs, Direct Numerical Simulation of particulate flow with heat transfer, *International Journal of Heat and Fluid Flow* 31 (2010) 1050-1057
- [3] A. Wachs, A. Hammouti, G. Vinay, M. Rahmani, Accuracy of finite volume/staggered grid Distributed Lagrange Multiplier/Fictitious Domain simulations of particulate flows, *Computers & Fluids* 115 (2015) 154-172
- [4] M.Y. Chow, R.G. Akins, Pseudosteady-State Natural Convection Inside Spheres, *Journal of Heat Transfer* 97 (1975) 54-59
- [5] L. Landau, E. Lifchitz, *Physique théorique, vol. 5 : Mécanique des fluides*, Editions Mir, Moscou, 1989
- [6] S.S. Hsieh, S.S. Yang, Flow structure and temperature measurements in a 3-D vertical free convective enclosure at high Rayleigh numbers, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 40(6) (1997) 1467-1480