

Rapport annuel 2005, 15 décembre 2005

# CoSyPCM

## Combi-Système avec Matériaux à Changement de Phase

Auteur et coauteurs	S. Citherlet et J. Bony
Institution mandatée	Ecole d'Ingénierie et de Gestion du Canton de Vaud (HEIG-VD/LESBAT)
Adresse	Rte de Cheseaux 1
Téléphone, e-mail, site Internet	Tél.: 024 / 557 63 54 stephane.citherlet @heig-vd.ch
N° projet / n° contrat OFEN	12536
Durée prévue du projet (de - à)	Octobre 2003 à décembre 2006

### RÉSUMÉ

Pendant l'année 2005, les travaux suivants ont été effectués :

- Modèle numérique : Amélioration du modèle numérique pour TRNSYS (hystérésis, surfusion, etc.)
- Expérimentation : Différentes configurations et types de PCM ont été mesurés
- Vérification de la conformité de la distribution des températures entre simulations et les résultats expérimentaux



## But du projet

Ce projet a pour but d'évaluer les performances d'un combi-système solaire contenant des éléments fixes remplis avec des matériaux à changement de phase (PCM). L'utilisation de ces matériaux a pour avantages de réduire la taille du stock (densité de chaleur plus grande) et d'améliorer l'efficacité de l'installation solaire car les PCM permettent d'obtenir des températures de fluide plus basses que pour une installation traditionnelle.

## Travaux effectués et résultats acquis

### 1 Modèle numérique

Depuis plusieurs décennies, différents modèles numériques de stockage d'énergie utilisant des PCM ont été développés. Quelques uns de ces modèles ont été élaborés pour travailler avec le logiciel de simulation TRNSYS. Malheureusement, aucun n'a donné suffisamment de satisfaction pour permettre une large diffusion de ce modèle, soit par manque de temps pour tester sa fiabilité, soit par manque de flexibilité pour permettre de modéliser différentes formes de PCM.

Nous avons donc décidé, comme 2 autres groupes impliqués dans la Tâche 32, de développer un modèle compatible avec TRNSYS. Dans notre cas, il a été choisi de partir du Type60 de TRNSYS qui est un modèle pour une cuve de stockage standard admettant jusqu'à 100 couches et de l'adapter pour lui permettre de tenir compte de l'utilisation des PCM

Le Type60 standard intègre trois échangeurs de chaleur tubulaires, deux entrées/sorties directes dont une charge stratifiée possible et deux apponts. La cuve peut être considérée verticale ou horizontale. Ce modèle permet ainsi de simuler la plupart des cuves de stockage. La discréétisation verticale par couche appelée également nœud (*Figure 1a*) permet de définir le degré de précision des calculs qui augmentera avec l'accroissement du nombre de ces nœuds. La hauteur et les pertes thermiques de chaque couche peuvent être définies séparément. Cela permet de prendre en compte les pertes par pont de froid comme par exemple un piquage de conduite. En cas d'inversion de température, froid en haut et chaud en bas, il y a un mélange complet entre les couches considérées. La hauteur de l'entrée d'eau froide détermine donc la hauteur de la zone basse de la cuve où la température est uniforme si cette eau entrant est plus froide que celle située en bas de cuve.

La *Figure 1b* et l'équation (1) illustrent les différents flux de la chaleur considérés pour le bilan d'énergie dans chaque  $i^{\text{ème}}$  nœud de la cuve [1]. Il est à noter que la température est uniforme dans chacune de ces couches.

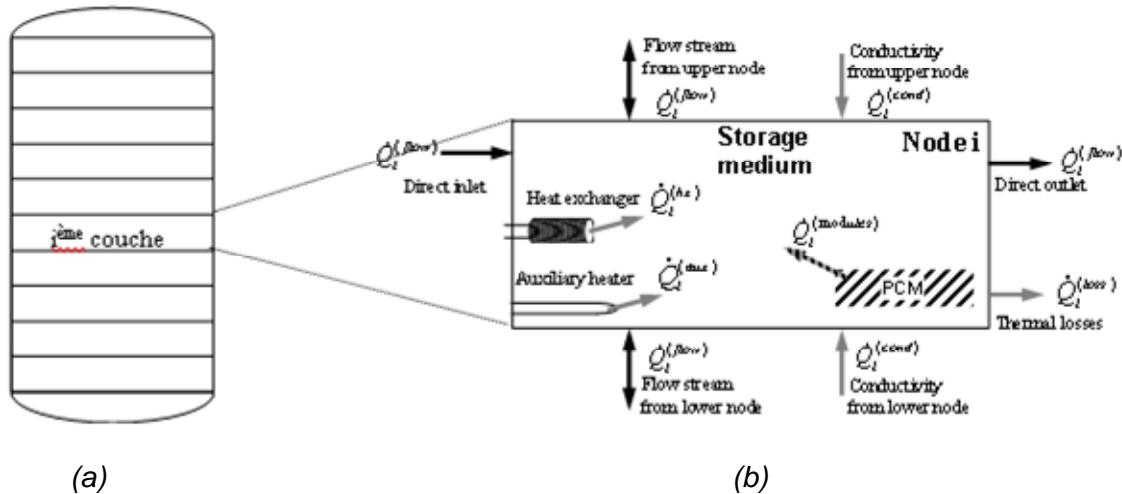


Figure 1 : Bilan d'énergie dans chacun des nœuds.

Avec :  $Q^{(flow)}$  = débit d'entrée ou de sortie de la couche  
 $Q^{(hx)}$  = transfert de chaleur avec un échangeur  
 $Q^{(aux)}$  = énergie d'appoint  
 $Q^{(cond)}$  = transfert de chaleur par conduction  
 $Q^{(loss)}$  = pertes thermiques  
 $Q^{(modules)}$  = transfert de chaleur entre l'eau et le PCM

$$\dot{Q}_i^{(medium)} = \dot{Q}_i^{(flow)} + \dot{Q}_i^{(hx)} + \dot{Q}_i^{(aux)} + \dot{Q}_i^{(cond)} + \dot{Q}_i^{(loss)} + \dot{Q}_i^{(modules)} \quad (1)$$

L'équation régissant le transfert de chaleur entre l'eau et le PCM se présente sous la forme suivante [2]:

$$\dot{Q}_i^{(modules)} = -N^{(modules)} \left\{ U_i A_i^{PCM} \cdot [T_i - T_i^{PCM}(h_i^{PCM})] \right\} \quad (2)$$

Avec :  $N^{(modules)}$  = nombre de container de PCM  
 $U$  = coefficient de transfert de chaleur eau/PCM  
 $A$  = surface de contact eau/container  
 $T$  = température de l'eau  
 $T^{PCM}$  = température de surface du container

Le calcul de transfert de chaleur à travers le PCM utilise la méthode enthalpique, c'est-à-dire qu'il y a en premier un calcul de l'enthalpie suivi de celui de la température. On obtient une fonction  $T(h)$  continue et réversible qui est en fait une succession de 5 droites. Deux pour la chaleur sensible en phase solide ou liquide et trois droites dans la partie de changement de phase. La Figure 2 illustre cette fonction où chaque petit carré représente le découpage en 5 parties. La précision ainsi obtenu et suffisante pour les calculs.

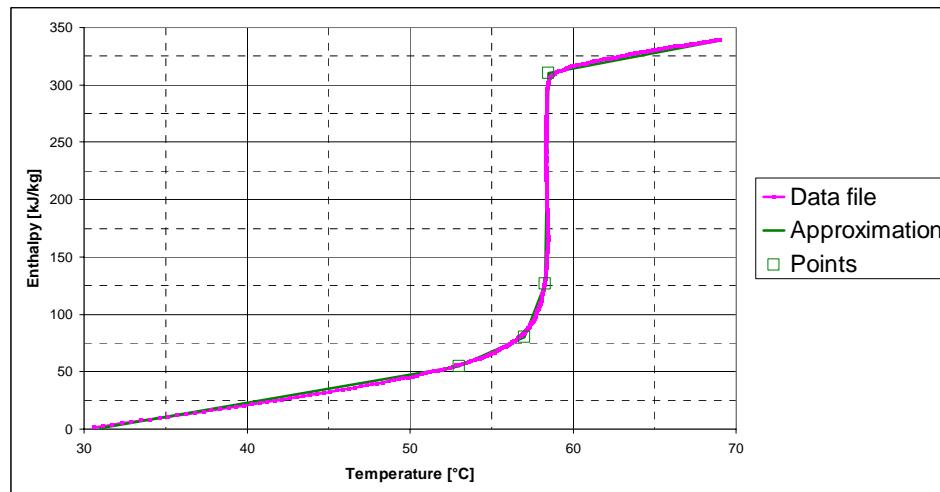


Figure 2 : Courbe de l'enthalpie en fonction de la température divisée en 5 portions de droite.

### 1.1 DISCRETISATION DU PCM

Le modèle de calcul interne au PCM est de type à 2 dimensions. Il permet d'utiliser des éléments de PCM de formes différentes : cylindre, sphère ou plaque. Nous avons utilisé une approche du type pelure d'oignon, qui consiste à représenter un élément de PCM par une succession de couche d'épaisseur constante, et dont la forme dépend de l'objet comme le montre la Figure 3.

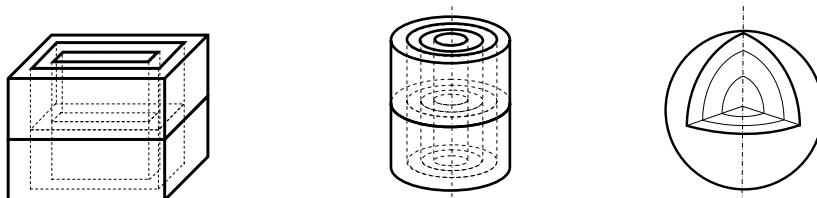


Figure 3 : Différentes formes modélisables avec pour chacune la discrétisation.

Pour chaque couche, on effectue un bilan énergétique (figure et équations ci-dessous) en supposant une température uniforme dans le volume du nœud correspondant.

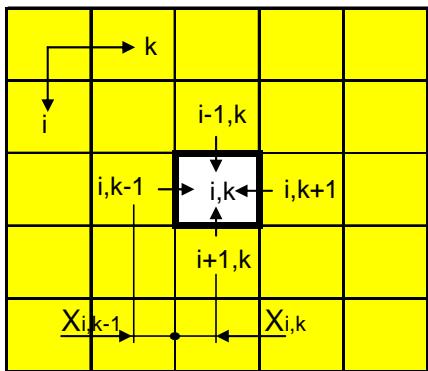


Figure 4 : maillage dans le PCM.

Bilan énergétique (changement d'enthalpie) :

$$\frac{\Delta h_{i,k}}{\Delta t} = \dot{Q}_{i,k-1 \rightarrow i,k} + \dot{Q}_{i,k+1 \rightarrow i,k} + \dot{Q}_{i-1,k \rightarrow i,k} + \dot{Q}_{i+1,k \rightarrow i,k} \quad (3)$$

Transfert de chaleur entre 2 nœuds :

$$\dot{Q}_{i,k-1 \rightarrow i,k} = \left( \frac{\lambda_{i,k}}{x_{i,k}} + \frac{\lambda_{i,k-1}}{x_{i,k-1}} \right) \cdot A_{i,k-1 \rightarrow i,k} \cdot (T_{i,k-1} - T_{i,k}) \quad (4)$$

Avec :  $i$  = axe vertical lié au découpage de la cuve

$k$  = axe horizontal du découpage du PCM

$\lambda$  = coefficient de conduction thermique

$x$  = distance entre 2 nœuds

$A$  = surface d'échange entre 2 nœuds

## 1.2 RESOLUTION NUMERIQUE DES EQUATIONS

La résolution numérique de ce type de calculs peut se réaliser avec une méthode soit explicite soit implicite.

A) La méthode *explicite* est simple à programmer mais est conditionnellement stable. Cela demande d'avoir une limite du pas de temps suffisamment petit afin d'éviter de diverger. La durée de la simulation devient plus importante.

B) La méthode *implicite* est plus complexe à programmer mais elle est inconditionnellement stable. Il n'y a pas de limite du pas de temps si ce n'est pour permettre une bonne précision de calculs.

Comme le temps de calculs peut être relativement long, nous avons comparé trois méthodes programmées en Visual Basic sur un tableur Excel afin d'analyser les performances de ces trois approches pour choisir la plus appropriée à ce projet :

1) *Méthode semi-implicite Gauss-Seidel*, utilisée dans les cas de phénomène non linéaire tel que le changement de phase. Il est à noter que la résolution d'équation est basée sur le principe de la méthode itérative brièvement expliquée ci-dessous :

Soit le système suivant de 3 équations à 3 inconnues :

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = y_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = y_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = y_3 \end{cases}$$

On résout le système de la manière suivante :

$$\begin{cases} x_1 = \frac{y_1 - (\alpha_{12} \cdot x_2 + \alpha_{13} \cdot x_3)}{\alpha_{11}} \\ x_2 = \frac{y_2 - (\alpha_{21} \cdot x_1 + \alpha_{23} \cdot x_3)}{\alpha_{22}} \\ x_3 = \frac{y_3 - (\alpha_{31} \cdot x_1 + \alpha_{32} \cdot x_2)}{\alpha_{33}} \end{cases}$$

On donne aux inconnues les valeurs arbitraires initiales  $x_2^0, x_3^0$ .

On porte  $x_2^0$  et  $x_3^0$  dans la 1<sup>ère</sup> équation et on obtient :  $x_1^1 = \frac{y_1 - (\alpha_{12} \cdot x_2^0 + \alpha_{13} \cdot x_3^0)}{\alpha_{11}}$

Cette nouvelle valeur de  $x_1$  est portée dans la 2<sup>ème</sup> équation du système, donnant :

$$x_2^1 = \frac{y_2 - (\alpha_{21} \cdot x_1^1 + \alpha_{23} \cdot x_3^0)}{\alpha_{22}}$$

De même dans la 3<sup>ème</sup> équation, on porte  $x_1^1$  et  $x_2^1$ .

$$x_3^1 = \frac{y_3 - (\alpha_{31} \cdot x_1^1 + \alpha_{32} \cdot x_2^1)}{\alpha_{33}}$$

Lorsqu'une inconnue est utilisée, c'est automatiquement la plus récente valeur calculée. Ainsi, le calcul de chaque nœud au pas de temps n est réalisé avec une partie des résultats du pas n-1 et du pas de temps n. La proportion de résultats au pas de temps n par rapport à ceux n-1 augmente au cours de la résolution. Ceci assure en théorie une convergence des calculs rapide. Dans notre cas où le système est fortement non linéaire lors du changement de phase, un facteur de relaxation ( $kr$ ) est nécessaire et compris entre 0 et 1. Il agit sur la différence entre la valeur calculée au temps n et celle du temps n-1 (équation ci-dessous).

$$x_1^{*n} = x_1^{n-1} + kr(x_1^n - x_1^{n-1})$$

2) La *Méthode explicite* simple, contrairement à la méthode précédente, calcule chaque nœud au pas de temps n avec les résultats du pas n-1. C'est une méthode simple qui demande une attention particulière au choix du pas de temps afin d'éviter une divergence des calculs. Ce pas de temps (équations (8) et (9)) se calcule en fonction des coefficients de transfert de chaleur (convection et conductif) ainsi que la capacité thermique de chaque nœud et est dépend également de la position du nœud considéré [3].

Pour un nœud en surface :

$$Fo(2 + Bi) \leq 1/2 \quad (5)$$

Pour un nœud dans un matériau :

$$Fo \leq 1/4 \quad (6)$$

Avec :

$$Fo = \frac{\lambda \cdot t}{\rho \cdot Cp \cdot x^2} \quad \text{et} \quad Bi = \frac{\alpha \cdot x}{\lambda} \quad (7)$$

Le pas de temps est calculé pour :

- un nœud à l'interface eau/PCM

$$t = \frac{\rho \cdot Cp \cdot x^2}{2\lambda(2 + \alpha \cdot x/\lambda)} \quad (8)$$

- un nœud dans un matériau

$$t = \frac{\rho \cdot Cp \cdot x^2}{4\lambda} \quad (9)$$

$Fo$  = nombre de Fourier [-]

$Bi$  = nombre de Biot [-]

$\lambda$  = coefficient de conduction du PCM [W/(m.K)]

$t$  = pas de temps de simulation [s]

$\rho$  = masse volumique du PCM [kg/m<sup>3</sup>]

$Cp$  = chaleur massique du PCM [J/(kg.K)]

$x$  = distance entre deux nœuds [m]

$\alpha$  = coefficient de convection entre l'eau et le PCM [W/(m<sup>2</sup>.K)]

3) Méthode explicite double (avec interpolation et moyenne). Cette dernière permet d'augmenter le pas temps (jusqu'à 4 fois selon la variation du changement de température) par rapport à l'explicite simple et d'affiner la précision. Le principe est de calculer 2 pas de temps à la suite. A partir du 2ème pas de temps, une interpolation linéaire est appliquée pour le pas de temps précédent. Ensuite, une moyenne est calculée entre cette interpolation et la température calculée lors du 1er pas de temps. La Figure 5 illustre ce type d'approche et son intérêt principal est une précision accrue pour un même pas de temps.

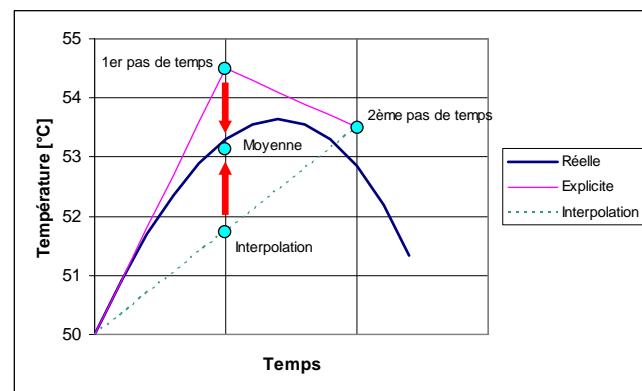


Figure 5 : Principe de la méthode explicite double.

Le tableau ci-dessous résume les différents avantages et inconvénients liés à chacune de ces méthodes.

Méthode	Avantages	Inconvénients	Conclusion
Explicite simple	Simple à programmer.	Conditionnellement stable.	Est de vitesse équivalente à la méthode double, mais elle est plus simple à programmer
Explicite double	Plus rapide en théorie et plus précise que la méthode simple.	Conditionnellement stable	N'est pas plus rapide en moyenne que la méthode simple mais elle est plus compliquée à programmer.
Implicite	Plus rapide que les autres méthodes en dehors du changement de phase. Inconditionnellement stable en théorie	Lors du changement de phase, le facteur de relaxation doit être tellement petit que la simulation est moins rapide.	Beaucoup trop lent avec un petit facteur de relaxation et plus complexe à programmer.

Avec TRNSYS, la rapidité d'exécution est également tributaire du pourcentage de module de PCM introduit dans la cuve. En effet, le pas de temps interne du Type60 devient de plus en plus petit quand la quantité d'eau par couche diminue au point que le pas de temps lié au PCM lui même n'est plus prépondérant. S'il y a peu de PCM dans la cuve, la méthode explicite double devient plus rapide que la méthode simple. En contrepartie, s'il y a beaucoup de PCM (à partir de 40 ou 50% en volume) la méthode explicite simple peut être plus rapide. Puisque nous désirons mettre le plus de PCM possible, et que la programmation de cette dernière méthode est plus facile nous utilisons dans le modèle de cuve uniquement la méthode explicite simple.

La faible conduction thermique dans les PCM implique un transfert de chaleur fortement influencé par les boucles convectives à l'intérieur même de ces matériaux. Dans une installation solaire pour le chauffage et l'eau chaude sanitaire, nos avons besoin d'une forte puissance pour la fourniture de l'énergie. Il est donc indispensable d'augmenter grandement le transfert de chaleur entre le PCM et le fluide caloporteur (généralement de l'eau).

L'amélioration du transfert thermique peut être réalisée de différentes manières. Soit en diminuant fortement la taille du module de PCM (bille de petit diamètre, jusqu'à 5 mm), surface de contact importante vis-à-vis de l'épaisseur. Soit en augmentant la conduction à l'intérieur même du module en incorporant des éléments à fort coefficient de conduction (copeaux ou nid d'abeilles en aluminium,...). Ces différentes manières diminuent l'effet convectif à l'intérieur du matériau sans toutefois qu'il soit négligeable comme le montre les mesures réalisées au laboratoire (*Figure 6*).

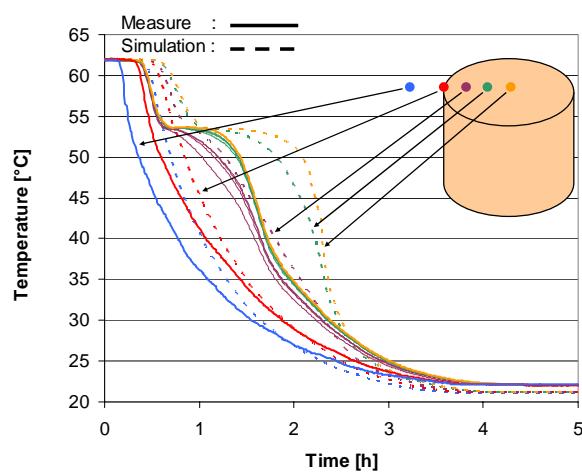
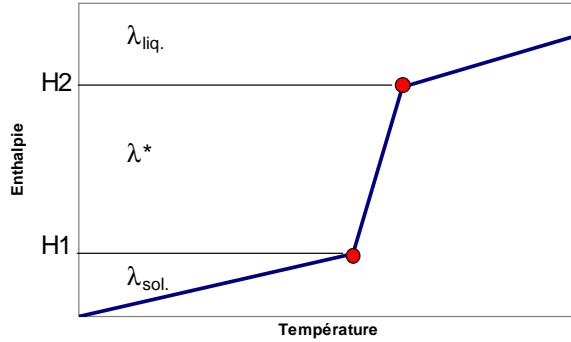


Figure 6 : Refroidissement d'un module de paraffine contenant 5% de copeaux d'aluminium.

Toutefois, pour diminuer la complexité et par conséquent le temps de simulation, la convection interne au PCM n'est pas modélisée. Il est possible de prendre en compte de cette augmentation de transfert de chaleur par convection en augmentant le coefficient de conduction à l'état liquide.

### 1.3 CONDUCTION THERMIQUE DANS LE PCM A L'ETAT SOLIDE OU LIQUIDE

Afin de prendre en compte la différence de conduction thermique entre les états solide et liquide d'un matériau, l'utilisateur peut donner 2 valeurs distinctes pour le coefficient de conduction en phase solide et liquide. Lors du changement de phase, cette valeur de conduction thermique est calculée par interpolation linéaire en fonction de l'enthalpie (*Figure 7*).



*Figure 7 : Détermination du coefficient de conduction thermique  $\lambda$  en fonction de l'enthalpie  $H$ .*

En-dessous de la valeur de l'enthalpie  $H_1$ , le coefficient de conduction thermique  $\lambda$  est constant et est égal à  $\lambda_{sol}$ . Au-dessus de la valeur de l'enthalpie  $H_2$ , le coefficient de conduction thermique  $\lambda$  est constant et est égal à  $\lambda_{liq}$ . Entre  $H_1$  et  $H_2$  :

$$\lambda^* = \lambda_{sol} + \frac{(\lambda_{liq} - \lambda_{sol})}{(H_2 - H_1)}(H^* - H_1)$$

Où  $H^*$  est la valeur de l'enthalpie au moment considéré.

Cette fonction permet également d'ajuster la valeur de la conduction à l'état liquide pour tenir compte de l'augmentation de transfert de chaleur par convection interne au PCM.

### 1.4 CONVECTION ENTRE L'EAU ET LE PCM

Le coefficient de convection est calculé pour chaque couche, un calcul est prévu selon la forme choisie :

- Plaque → convection plaque verticale
- Cylindre → idem plaque
- Sphère → convection autour d'une sphère en convection libre et dans un lit de sphère pour la convection forcée [4].

Le tableau et les équations ci-dessous définissent les différents calculs du coefficient convectif en fonction de la forme du module de PCM ainsi que du mode d'écoulement du fluide autour de ces modules.

Convection	Plaque ou cylindre vertical	Lit de sphères
Libre laminaire	$Nu = \left\{ 0.825 + \frac{0.387.Ra^{1/6}}{\left[ 1 + (0.492/\text{Pr})^{9/16} \right]^{8/27}} \right\}^2$	$Nu = 2 + 0.56 \left( \frac{\text{Pr}}{0.846 + \text{Pr}} Ra \right)^{1/4}$
Libre turbulent		
Forcée laminaire	$Nu_x = 0.332 \text{Re}_x^{1/2} \cdot \text{Pr}^{1/3}$	$Nu_{\text{laminaire}} = 0.664 \cdot (\text{Re}/\varepsilon)^{1/2} \cdot \text{Pr}^{1/3}$
Forcée turbulent	$Nu_x = 0.0296 \text{Re}_x^{4/5} \cdot \text{Pr}^{1/3}$	$Nu_{\text{turbulent}} = \frac{0.037(\text{Re}/\varepsilon)^{0.8} \text{Pr}}{1 + 2.443(\text{Re}/\varepsilon)^{-0.1} (\text{Pr}^{2/3} - 1)}$ $Nu_{\text{Global}} = 2 + (Nu_{\text{laminaire}}^2 + Nu_{\text{turbulent}}^2)^{1/2}$ $Nu = (1 + 1.5(1 - \varepsilon)) \cdot Nu_{\text{Global}}$ <p>(<math>\varepsilon</math>=fraction de vide dans le lit)</p>

Calcul de Nu mixte entre la convection libre et forcée :

$$Nu_{\text{Mixte}} = (Nu_{\text{Libre}}^3 + Nu_{\text{Forcée}}^3)^{1/3}$$

Coefficient de convection :

$$\alpha = \frac{Nu_{\text{Mixte}} \cdot \lambda}{x} \quad [\text{W/m}^2 \cdot \text{K}]$$

Un coefficient correcteur a été déterminé pour prendre en compte l'effet de découpage vertical du module de PCM en différentes couches (pour plaque ou cylindre). En effet, le coefficient de convection évolue de façon non linéaire le long de la paroi considérée (*Figure 8*). Ainsi, Le nombre de couche influence fortement le calcul de la convection. Plus ce nombre de couches est important, plus le calcul se rapproche de la réalité. Dans un premier temps, nous avons réalisé des calculs dans différentes configurations :

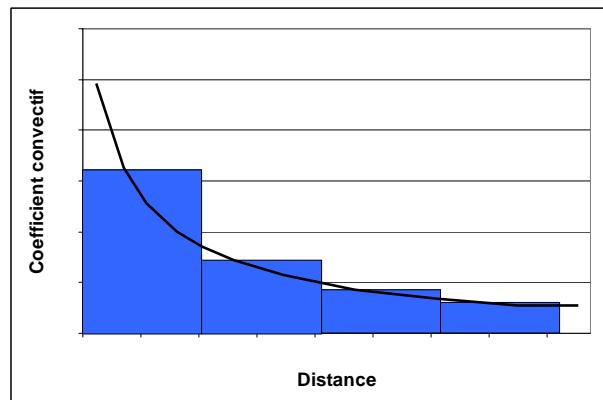


Figure 8 : Evolution du coefficient convectif le long d'une paroi.  
-courbe noire = valeur réelle  
-histogramme bleu = calculs pour 4 couches

nombre de couches verticales, convection libre ou forcée, laminaire ou turbulent, hauteur du module de PCM et à différents niveaux de température. Ensuite, une comparaison avec la courbe théorique (courbe noire de la *Figure 8*) a permis de définir une équation pour le calcul d'un coefficient correcteur.

Lors des premières comparaisons entre les mesures et les simulations, différents comportements des PCM comme entre autre l'hystéresis ou la surfusion ont été observés. Afin de prendre en compte ce type de comportement, le modèle numérique a été modifié.

## 1.5 HYSTERESIS

Le phénomène d'hystérésis apparaît lors du refroidissement de certains matériaux. Il se traduit par un retard du changement de phase. Il ne dépend pas de la présence de phase liquide ou solide aux alentours, et donc ce processus peut être calculé indépendamment pour chaque nœud de PCM.

Dans un premier temps, le modèle ne tenait pas compte de ce phénomène d'hystérésis et le chauffage ou le refroidissement se faisaient sur la même courbe.

Suite aux mesures effectuées pour la validation, l'implémentation de ce comportement physique fut nécessaire. La *Figure 9* illustre cette nouvelle fonction. Il y a un simple décalage de la courbe enthalpique selon un  $\Delta T$  défini dans le paramétrage dont la valeur est déterminée par mesures expérimentales. Lors d'une modification du processus de chauffage ou de refroidissement du PCM dans la zone de changement de phase, la pente de transition est la même que celle de la phase solide dans la partie inférieure du changement de phase et identique à celle de la phase liquide dans la partie supérieure du changement de phase. Ceci évite toute discontinuité de la courbe enthalpique, lorsque le point de transition est proche du changement de phase complet (liquide ou solide).

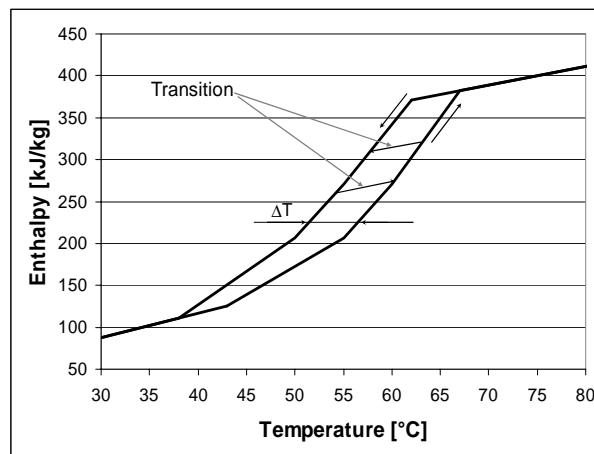


Figure 9 : Principe du modèle d'hystérèse.

## 1.6 SURFUSION

Contrairement au phénomène précédent, la surfusion dépend de la présence ou non de la phase solide. La détermination de l'apparition de ce processus tient compte de l'état global du module de PCM. Il faut que tout soit en phase liquide pour que la surfusion puisse se produire. Au moment du refroidissement, dès qu'une partie du PCM atteint le point de cristallisation, tout le reste du PCM passera en phase solide (courbe couleur bleue de la *Figure 10*). Mais ce phénomène peut débuter à une température inférieure à la température de la fin du changement de phase solide à liquide.

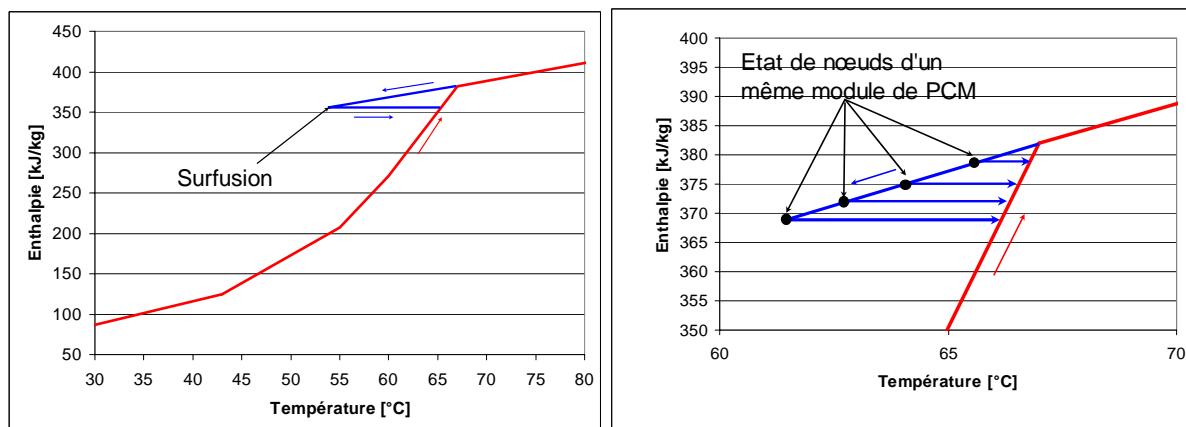


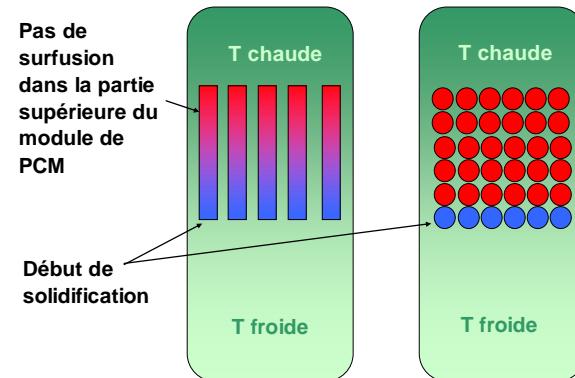
Figure 10 : Principe du modèle de surfusion.

Ainsi, pour des cylindres ou des plaques, la surfusion pourra apparaître une seule fois lors du processus de refroidissement. En effet, lorsque la cristallisation débute autour d'un noyau de condensation, la solidification va se propager de proche en proche dans tout l'élément avec une vitesse qui est supposée ici instantanée, car nous n'avons aucun moyen de connaître la vitesse de propagation de la cristallisation dans l'élément, comme le montre la partie de gauche de la *Figure 11*.

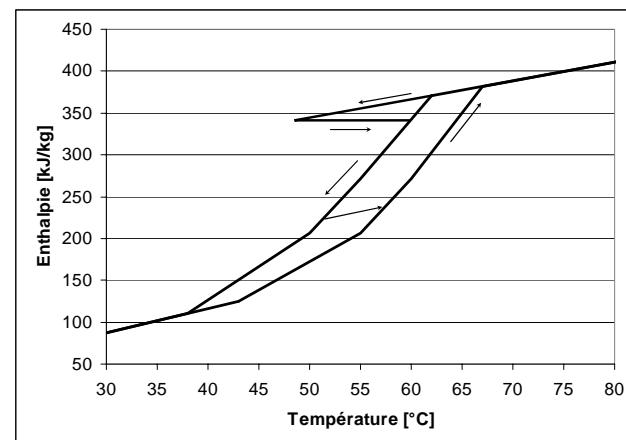
Dans le cas de module sphérique, ce phénomène apparaîtra à chaque couche de sphères. En effet, lors de la décharge, la partie basse de la cuve se refroidi en premier.

Dans le cas d'un lit de sphères, la première couche inférieure de sphères passera en surfusion alors que les autres devront attendre que la cuve finisse de se décharger, comme schématiser dans la partie de droite de la *Figure 11*.

Les phénomènes d'hystérésis et de surfusion peuvent également s'ajouter entre eux comme l'illustre la *Figure 12*. Dans le modèle, chacun de ces phénomènes sont traités indépendamment l'un de l'autre par un indicateur d'état spécifique. Il est à noter que le processus de surfusion ne peut pas intervenir avant celui d'hystérèse, ce qui en simplifie la programmation.



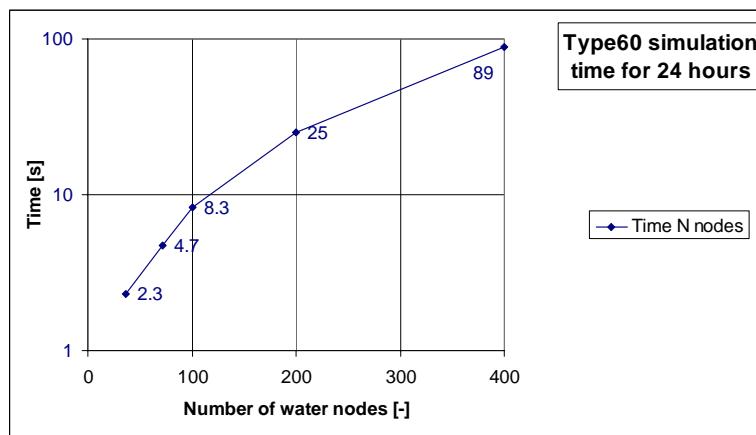
*Figure 11 : Différence de propagation de la cristallisation selon le type de container.*



*Figure 12 : Combinaison de l'hystérèse et de la surfusion.*

## 1.7 REDUCTION DU TEMPS DE CALCULS

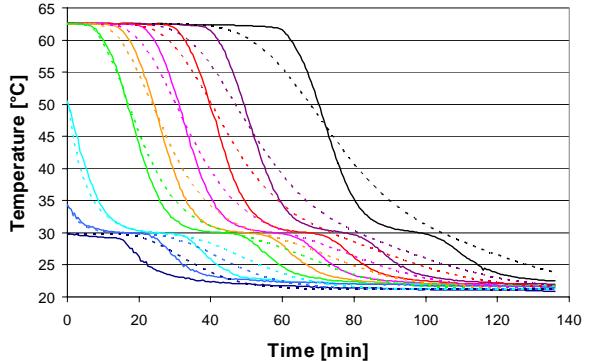
Afin d'avoir une bonne précision de calculs, il est utile d'avoir un nombre de couches important dans la cuve d'eau. Malheureusement, cette augmentation du nombre de couches (diminution de la taille des couches) entraîne également une élévation du temps de calculs. La *Figure 13* illustre cet accroissement du temps de calculs avec le type 60 de TRNSYS pour une simulation représentant 24 heures d'utilisation réelle. Il est à noter que le modèle de cuve TRNSYS accepte jusqu'à 100 couches dans sa version standard.



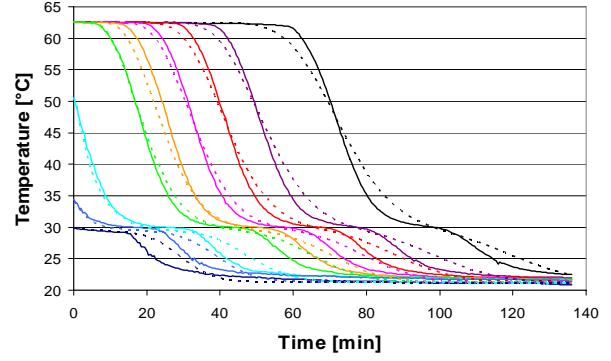
*Figure 13 : Augmentation du temps de calculs en fonction du nombre de couches. Le processeur utilisé est un Pentium 4 de 1,6 GHz.*

Ce problème est connu des utilisateurs de TRNYS et est généralement contourné en réduisant le nombre de couche dans la cuve, donc en perdant de la précision, afin d'avoir des temps de calculs raisonnables. Pour une simulation annuelle, il est couramment admis que le nombre de couches peut être faible, environ 10 [7], les imprécisions se compensant tout au long des calculs. Par contre, pour des simulations sur du cours terme, le nombre de couches doit être plus élevé.

Les graphiques de la *Figure 14* illustrent les différences entre les mesures de températures réalisées dans une cuve d'eau et les simulations réalisées avec respectivement 36, 100 et 400 couches. Les températures expérimentales sont en trait fort alors que celles issues de simulations sont en pointillés. Les courbes représentent 9 températures à différents niveaux dans une cuve de 500 litres. La partie haute de cette cuve est à 63 [°C] (couleur verte à noire) et la partie basse est à 30 [°C] (bleue foncée). Une injection d'eau froide à 21 [°C] pour un débit de 250 [l/h] est appliquée en partie basse. Il est clair que les meilleurs résultats de simulations sont obtenus avec un nombre important de couches. Pour comparer le comportement d'un module de PCM entre des mesures et des simulations, il est primordial d'avoir une bonne similitude de comportement de la cuve en eau entre le modèle numérique et l'expérimentation en utilisant dans ce cas 400 couches.



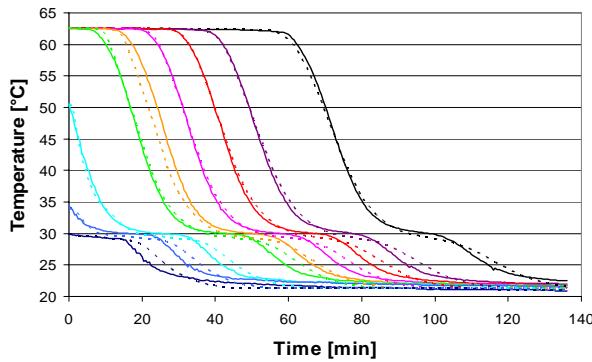
(a) 36 couches – Temps de calculs 0.6 [s]



(b) 100 couches – Temps de calculs 1,1 [s]

Figure 14 : Influence de l'augmentation du nombre de couches sur la précision des résultats (type60 TRNSYS).

- Courbes en traits fort = mesures expérimentales
- Courbes en pointillés = simulations



(c) 400 couches – Temps de calculs 14 [s]

Jusqu'à présent, le maillage des modules de PCM était intimement lié au nombre de couches verticales discrétilisant la cuve de stockage en eau (*Figure 15*). Or le temps de calcul est encore plus sensible lorsque la cuve contient des modules de PCM, car pour chaque nœud d'eau (indice  $i$ ), il y a  $n$  nœuds de PCM (indice  $k$ ) comme le montre la *Figure 15*. Dans une cuve avec des cylindres de PCM de 50 [cm] de haut séparés verticalement par 10 couches (1 couche pour 5 [cm]) et ayant 10 nœuds radialement, cela fait un total de 100 nœuds de calculs uniquement pour le PCM. Si on augmente d'un facteur 5 le nombre de couches verticales, il y aura 500 nœuds.

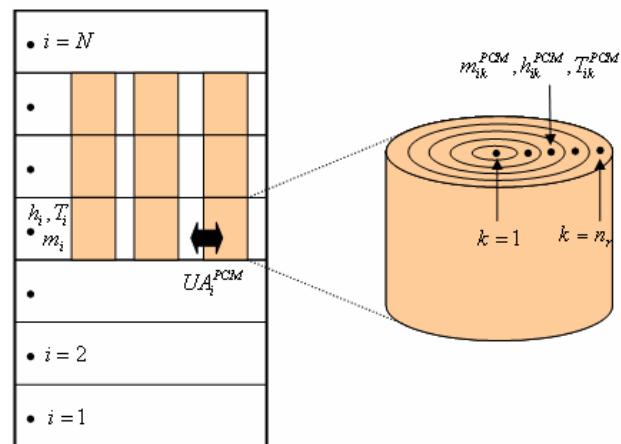
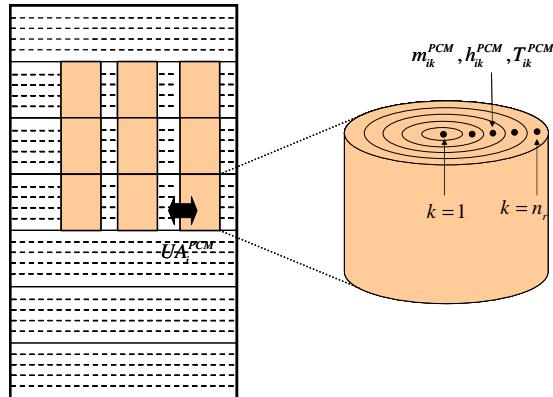


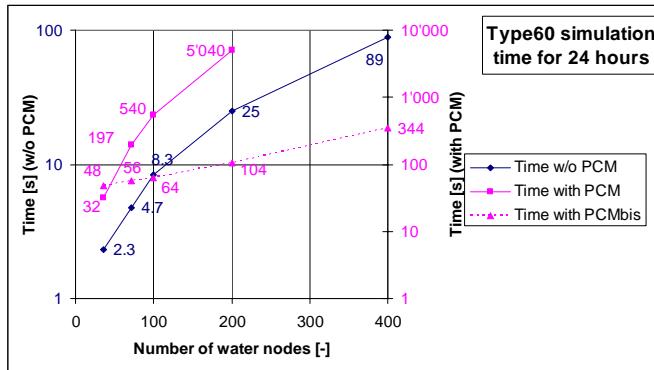
Figure 15 : Maillage classique des différents nœuds de calculs pour l'eau et le PCM.

Afin d'améliorer la précision des simulations tout en conservant des temps de calculs acceptables, l'idée développée dans le cadre de ce projet a été de dissocier les nœuds pour l'eau et ceux du PCM, comme le montre la *Figure 16*. Nous avons ainsi un gain de temps important par rapport aux premières simulations avec le PCM tout en gardant une bonne précision de calculs.

La *Figure 17* montre le temps nécessaire pour simuler notre cuve avec du PCM représentant 24 heures d'utilisation réelle. Plusieurs quantités de nœuds pour la cuve ont été simulées.



*Figure 16 : Nouveau maillage des nœuds de calculs pour l'eau et le PCM.*



*Figure 17 : Temps de calculs nécessaire pour simuler une cuve pendant 24 heures.*

Comme on le remarque, le temps nécessaire, entre une cuve sans PCM (Time w/o PCM) et avec PCM (Time with PCM), est dans notre cas multiplié par un facteur compris entre 15 et 20 selon le nombre de nœuds utilisés, ce qui est inacceptable. Avec la nouvelle méthode de découplage utilisée pour le PCM (Time with PCMbis), le temps est réduit d'un facteur 50 pour 200 nœuds dans l'eau par rapport à la méthode (Time with PCM), valeur qui augmente avec le nombre de nœuds. Bien sûr, ces valeurs ne sont qu'indicatives car elles dépendent du type de processeur, du type de cuve avec ou sans échangeur et du type de PCM pris en compte.

En plus du gain de temps de simulation, cette solution a les avantages suivants pour une simple cuve en eau :

- de séparer une cuve en un nombre important de couches, par exemple 200, en introduisant les températures initiales pour 20 couches seulement si ces dernières sont subdivisées en 10. En effet, lors de mesures, il est rare d'avoir plus de 20 mesures de température dans une cuve. Il est fastidieux et arbitraire de définir des températures dans un grand nombre de couches où il n'y a pas de mesure.
- de changer le nombre de couches sans devoir changer les 'Outputs' dans le deck permettant ainsi de visualiser son influence et d'optimiser le temps de simulation.
- d'utiliser plusieurs cuves dans un même deck sans devoir augmenter le nombre de 'Derivatives' (nombre températures initiales) inscrit dans le fichier 'param.inc'.

24 heures en fonction du nombre de nœuds d'eau. Ces temps de calculs ont été obtenus avec un processeur Pentium 4 de 1,6 GHz.

w/o PCM = sans PCM

with PCM = avec PCM sans découplage des couches eau/PCM

with PCMbis = avec PCM utilisant la nouvelle découplage des nœuds eau/PCM.

## 2 Expérimentation

Afin d'analyser la conformité du modèle numérique, une série d'expériences a été effectuée pour mesurer la variation temporelle et spatiale de la température dans un récipient contenant différents types et différentes configurations de PCM. Le principe expérimental était d'effectuer un cycle de charge suivi d'une décharge thermique du PCM tout en mesurant l'évolution dans le temps de la température en différents points à l'intérieur du PCM.

- La *charge thermique* impliquant le changement de phase dans le PCM (chaleur latente) s'effectue en plongeant le récipient contenant ce même PCM solide dans un stock d'eau ayant une température supérieure à la température de solidification.
- La *décharge thermique* de la chaleur latente contenue dans le PCM s'effectue en remplissant d'eau froide (à une température inférieure à la température de solidification) le stock d'eau chaude contenant le récipient de PCM liquide. Ce dernier étant déjà dans ce stock d'eau lors du début de cette étape, une attention particulière est portée à l'uniformité de la température dans le PCM.

### 2.1 RECIPIENT CONTENANT LE PCM

La *Figure 18* montre le récipient employé pour cette série d'expériences. Cette bouteille en aluminium est utilisée dans le domaine de la chimie, ses dimensions et son volume sont :

Diamètre  $\varnothing_{ext} = 88$  [mm]  
 Hauteur totale  $H = 237$  [mm]  
 Contenance = 1.1 [litres]  
 Epaisseur des parois = 0.3 [mm]



*Figure 18 : Récipient utilisé.*

La bouteille avec son bouchon en polypropylène ont été testés à la pression. En effet, la paraffine a une dilatation d'environ 10% lors du changement de phase (augmentation en se liquéfiant, contrairement à l'eau). Afin d'éviter les fuites, le joint d'origine en mousse polyéthylène a été remplacé par deux rondelles, une en aluminium et l'autre en caoutchouc comme le montre la *Figure 19*. Ainsi la pression relative de test atteinte a été de 3 bars à une température de 85 [°C]. Le remplissage de la bouteille pourra se faire avec un peu plus de 1 litre de PCM.



*Figure 19 : Fermeture améliorée.*

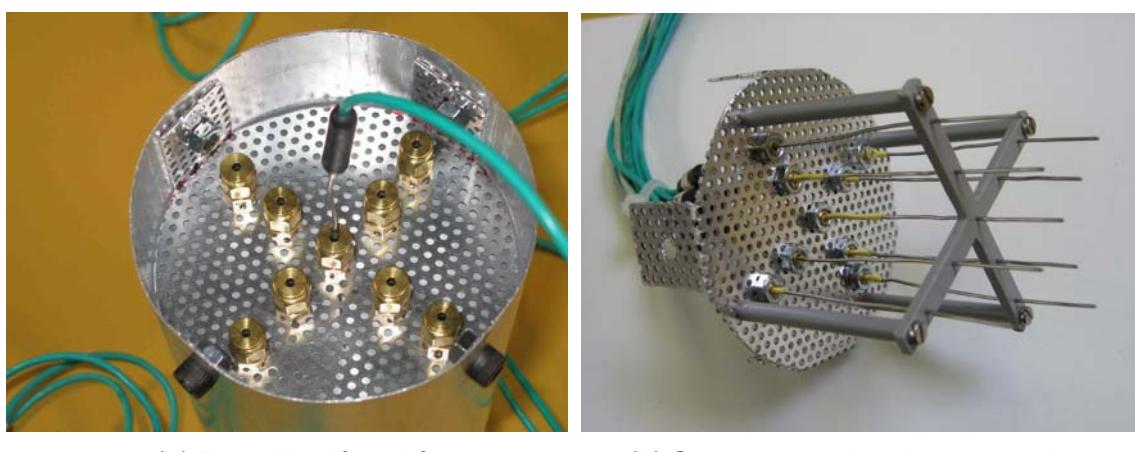
## 2.2 SONDES DE MESURE DE TEMPERATURE

Afin de pouvoir suivre l'évolution temporelle de la température dans le PCM, des thermocouples ont été placés en plusieurs points à l'intérieur du PCM. Différentes approches ont été considérées en fonction du type de PCM étudié. En effet, le positionnement des sondes est très important afin de pouvoir comparer mesures expérimentales et résultats de simulations. Il a donc fallut trouver des solutions adaptées aux PCM utilisés pour assurer le positionnement précis des sondes dans le récipient avant et après remplissage du PCM.

Les quatre situations suivantes ont été considérées :

### 2.2.1 Paraffine pure

Le goulot de la bouteille est supprimé afin de faire sortir les câbles des sondes de mesures de température comme le montre la *Figure 20a*. Pour conserver la distance entre les sondes, une grille perforée et une croix en plastique ont été utilisées comme le montre la *Figure 20b*



(a) Bouteille décapitée.

(b) Support pour les thermocouples.

Figure 20 : Système de mesures de température dans la paraffine.

La paraffine liquide est ensuite versée dans le récipient. Après refroidissement, ce récipient est plongé dans la cuve d'essai, sortie des câbles de sondes vers le bas. En effet, la paraffine reste dans le haut du récipient pour différentes raisons :

- non miscible dans l'eau
- densité à l'état solide et liquide inférieure à l'eau
- pas de mouvement important de l'eau de la cuve

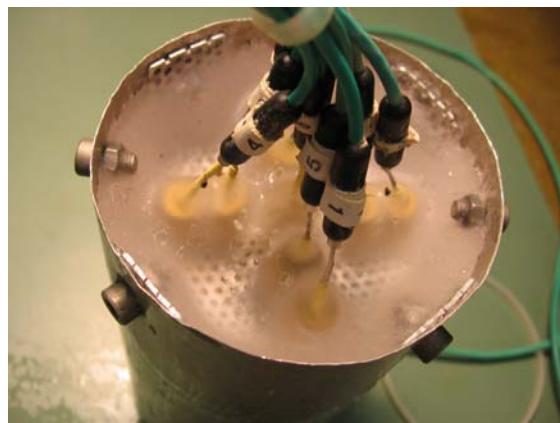
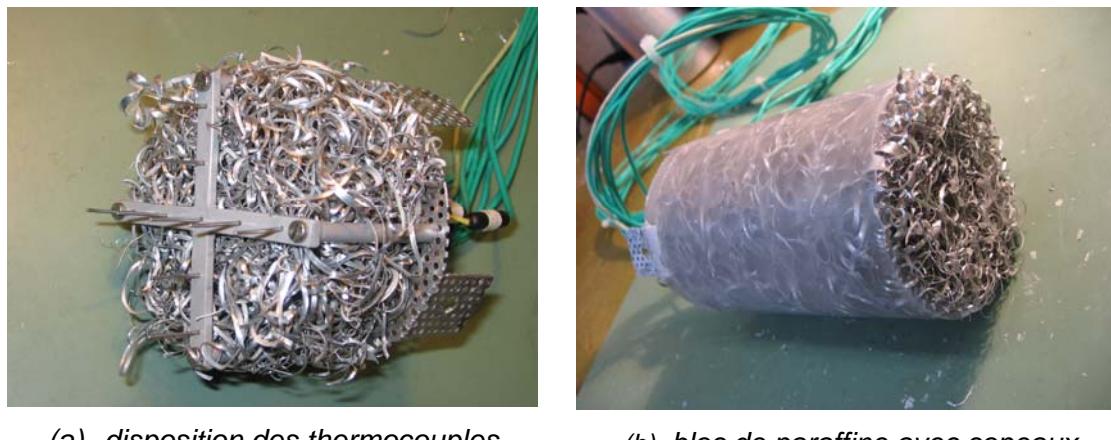


Figure 21 : Récipient rempli de paraffine avec sorties des thermocouples.

### 2.2.2 Paraffine + copeaux d'aluminium

Pour améliorer la conduction dans la paraffine, le récipient contenant la paraffine a été préalablement rempli avec des copeaux d'aluminium. Deux concentrations différentes de ces copeaux d'aluminium ont été testées, 5 et 10% en volume.

Dans ce cas, les sondes de température sont glissées à travers les copeaux d'aluminium. Comme pour le cas précédent, la position des sondes est garantie par une croix en PVC qui permet également de maintenir les copeaux d'aluminium avant de placer l'ensemble dans le récipient comme le montre la *Figure 22*. La paraffine liquide est ensuite versée dans le récipient afin de remplir les interstices entre les copeaux d'aluminium.



*Figure 22 : Copeaux d'aluminium avec 5% en volume.*

### 2.2.3 Paraffine + nid d'abeilles en aluminium

Une seconde solution a été testée pour améliorer la conduction dans la paraffine par l'ajout d'un nid d'abeilles en aluminium comme le montre la *Figure 23*. Ce nid d'abeilles représente un volume occupé d'aluminium de 2%.

Comme précédemment, le goulot d'une bouteille en aluminium a été enlevé afin de permettre le passage de la structure alvéolaire

Les sondes ont été glissées dans les cavités (cf. image). La paraffine liquide a été ensuite versée pour remplir les alvéoles.

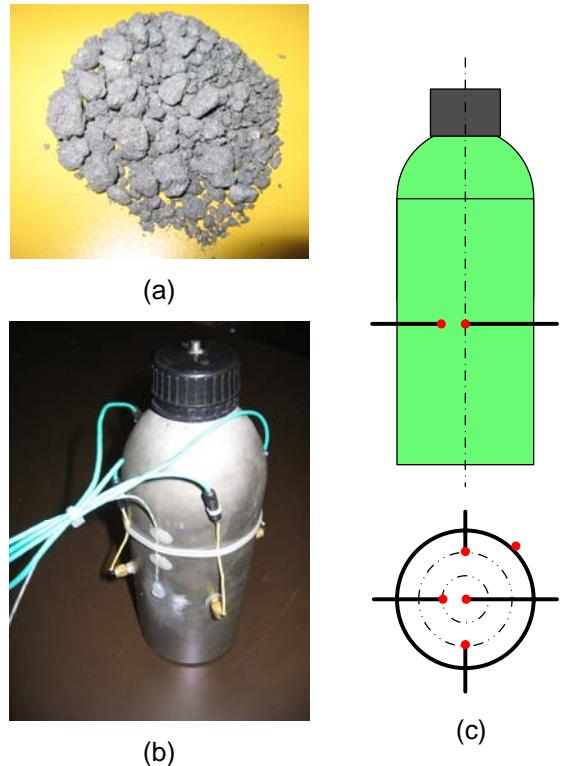


*Figure 23 : Disposition des thermocouples dans le nid d'abeilles.*

#### 2.2.4 Acétate de sodium + graphite

Un troisième test a été réalisé avec de l'acétate de sodium et du graphite. Il a fallut changer le mode de mesures de par le fait des caractéristiques physico-chimiques, comme la densité plus élevée que l'eau et la miscibilité avec cette dernière. Nous avons donc utilisé une bouteille fermée et les quatre thermocouples ont été disposés perpendiculairement à la surface de la bouteille mais à des profondeurs différentes comme le montre la *Figure 24*.

La densité est d'environ 1.3 en remplissant la bouteille en plusieurs fois et en tassant à chaque remplissage de façon à casser les granulés.



*Figure 24 (a) : Granulés d'acétate de sodium+graphite.*

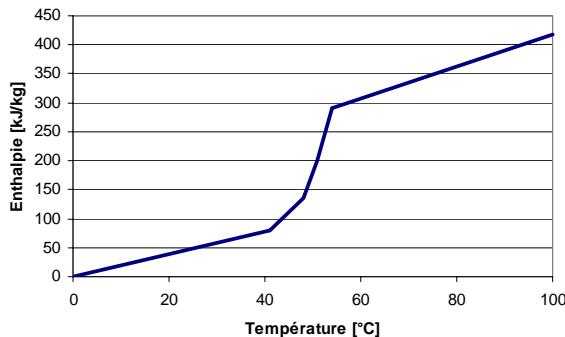
*Figure 24 (b) et (c): Bouteille contenant l'acétate de sodium+graphite avec le système de mesures.*

Le tableau ci-dessous résume les propriétés thermiques de la paraffine et de l'acétate de sodium utilisés dans ces expériences :

Propriétés	Paraffine (RT54)	Acétate de sodium + graphite
Conduction [W/m.K]	0.2 (solide et liquide)	4 (solide et liquide)
Densité [kg/l]	0.9 (solide) – 0.75 (liquide)	1.3 à 1.4 (solide et liquide)
Cp [kJ/kg]	1.8 (solide) – 2.4 (liquide)	2 (solide et liquide)
Chaleur latente [kJ/kg] [kJ/l]	180 150	150 240
Température de transformation	54	58

Les figures ci-dessous montrent les courbes enthalpiques des deux PCM utilisés pour ces expériences.

Paraffine : mesures réalisées à l'Université de Lleida (Espagne)



Acétate de sodium + graphite : mesures réalisées à l'Université de Graz (Autriche)

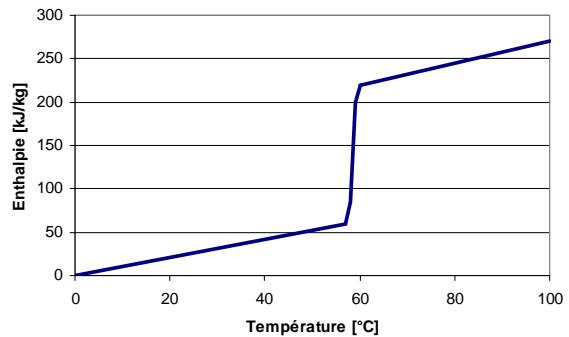


Figure 25 : Courbes enthalpiques pour la paraffine (RT54) et l'acétate de sodium+graphite.

Comme cette série d'expériences consistait à comparer les mesures expérimentales et les résultats de simulations, il était important que la paraffine soit homogène. Or, nous avons constaté que des cavités d'air se formaient dans la paraffine lorsque cette dernière était refroidie trop rapidement. La Figure 26 montre la formation de ces cavités en fonction de trois durées différentes de refroidissement du récipient contenant une même quantité de paraffine.



Figure 26 : Influence de la vitesse de refroidissement sur la formation de cavité.

Le refroidissement de la surface extérieure induit la formation de cavités. En effet, la paraffine forme une coque solide le long du récipient alors que l'intérieur reste liquide. Mais en se solidifiant, la paraffine se contracte d'environ 10%.

Si la solidification est lente, la paraffine latérale se rétracte progressivement et la surface supérieure suit le mouvement par gravité et remplit le vide ainsi formé.

Si la solidification est trop rapide, la paraffine latérale se rétracte rapidement et la surface supérieure ne peut pas suivre le mouvement et donc remplit le vide ainsi formé. Il y aura ainsi apparition d'une cavité d'air.

### 2.3 CUVE GRISE

Avant de débuter un test, notre cuve de 500 litres était maintenue à une température constante au-dessus de la température de fusion (différente selon le PCM analysé). Puis le récipient, contenant le PCM à l'état solide et équipé de sondes de température, était plongé dans la cuve.



Figure 27 : Cuve grise en plastique et son système de mesures de températures.

Une fois le PCM complètement fondu, un temps de stabilisation thermique permet de s'assurer de l'homogénéité de la température dans le PCM.

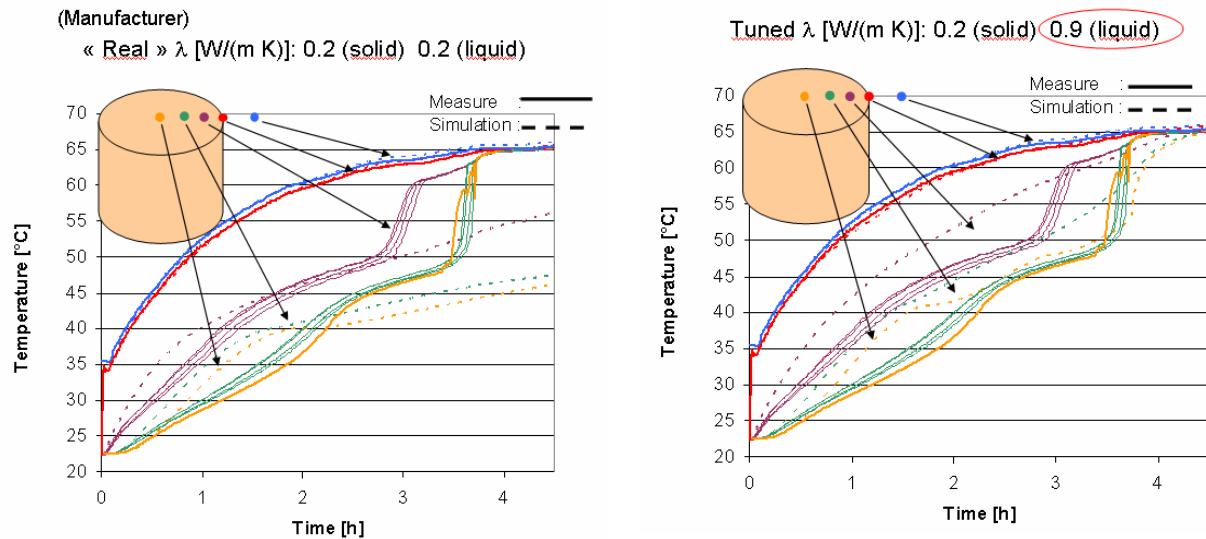
### 2.4 PRINCIPE GENERAL DE MESURES

En plus des thermocouples placés à l'intérieur même du module de PCM, neuf autres mesures de température sont réalisées dans la cuve à différents niveaux permettant d'en suivre l'évolution dans le temps. L'acquisition de toutes ces températures se fait toutes les 30 secondes. L'arrêt des mesures a lieu lorsque l'évolution des températures dans le module de PCM est nulle.

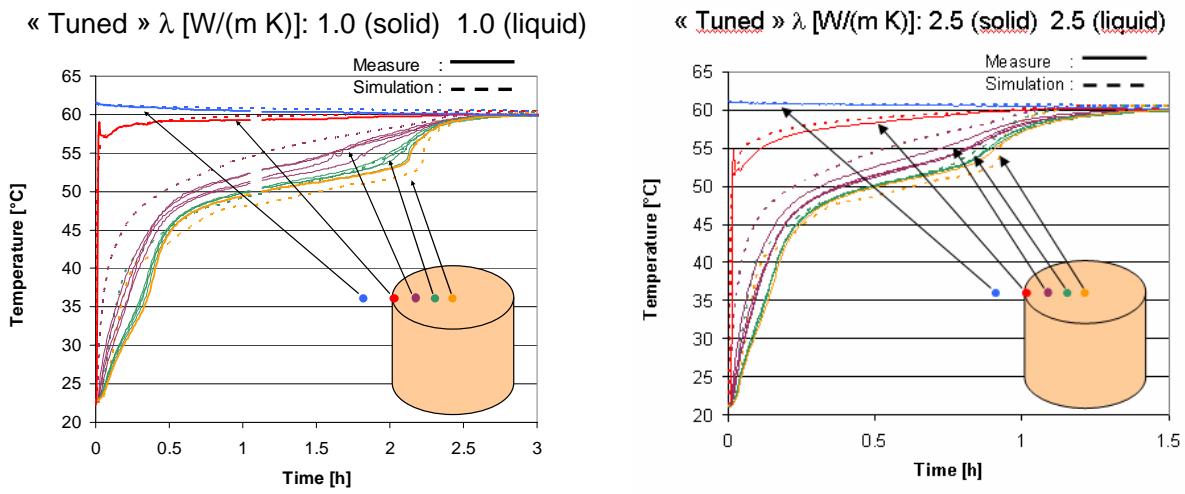
Tous les résultats expérimentaux ont été transmis à différents groupes participants à la Tâche 32, à savoir l'université de Lleida (Espagne), Université de Graz (Autriche) et Université de Lyngby (Danemark).

### 3 Comparaisons entre simulations et résultats expérimentaux

Etant donné que le modèle n'inclut pas la convection dans le PCM, la conformité entre simulations et les résultats expérimentaux n'est pas satisfaisante dans le cas de la paraffine pure comme le montre la partie de gauche de la *Figure 28*, car la convection y est importante. Afin de tenir compte artificiellement de la convection de la paraffine à l'état liquide, le coefficient de conductibilité thermique a été augmenté dans les simulations de 0.2 [W/(m K)] (valeur réelle) à 0.9 [W/(m K)] (valeur ajustée). Dans ce cas, les résultats sont meilleurs comme le montre la partie droite de la *Figure 28*.



*Figure 28 : Comparaisons simulations (pointillés) et mesures (traits pleins) pour la paraffine (RT54). A gauche, les valeurs du lambda ne sont pas ajustées. A droite, les valeurs du lambda sont ajustées afin que la fin de changement de phase se réalise au même moment.*



Paraffine avec nid d'abeilles (2% aluminium)

Paraffine avec copeaux d'aluminium (10%)

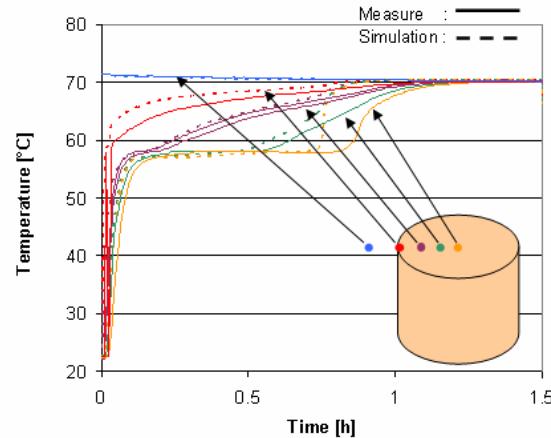
*Figure 29 : Comparaisons simulations (pointillés) et mesures (traits pleins) pour la paraffine avec adjonction d'éléments conducteur en aluminium. Les valeurs du lambda sont ajustées afin rendre les simulations proches des mesures.*

Si la convection est perturbée pas l'ajout de copeaux ou d'une structure en nid d'abeilles en aluminium ayant une conductibilité thermique élevée, la conformité entre expérience et simulation s'améliore comme le montre la *Figure 29*.

La situation s'améliore nettement lorsque la convection est négligeable voire inexistante dans le PCM comme c'est le cas dans l'acétate de sodium avec du graphite. En effet, la *Figure 30* montre une bonne conformité entre simulation et mesures.

Il ressort des mesures effectuées que la convection est un phénomène qui ne peut pas être omis dans le calcul du transfert de chaleur dans un PCM ayant une faible viscosité. Toutefois, le modèle actuel, qui ne tient pas compte de la convection, peut être raisonnablement utilisé que pour des PCM ayant une très grande viscosité à l'état liquide comme c'est le cas du sodium d'acétate avec graphite.

(Manufacturer)  
« **Real** »  $\lambda$  [W/(m K)]: 4.0 (solid) 4.0 (liquid)



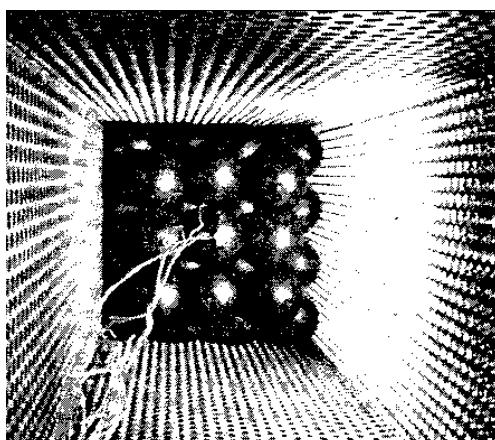
*Figure 30 : Comparaisons simulations (pointillés) et mesures (traits pleins) pour l'acétate de sodium+graphite. Dans ce cas, les valeurs du lambda n'ont pas été modifiées par rapport aux valeurs du fournisseur.*

### 3.1 COMPARAISON DU BILAN D'ENERGIE D'UNE CUVE

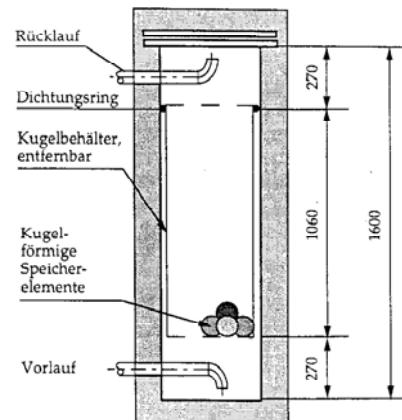
Dans le but de réaliser des bilans globaux d'énergie, nous avons effectué des comparaisons entre simulations et mesures expérimentales avec deux formes différentes de modules de PCM : sphère et cylindre.

### 3.2 LIT DE SPHERES

Les premières mesures à disposition ont été celles réalisées à l'EMPA (Project Latentwärmespeicher für die Sonnenenergienutzung: Lade- und Entladevorgänge, 1997) et concerne un lit de sphères Cristopia ST27 ( $\varnothing = 77$  [mm]) dans une cuve avec divers cas de tests charge/décharge (*Figure 31*)



*Figure 31 : Lit de Sphères Cristopia dans une cuve de section carrée.*



Les simulations effectuées sont en conformités avec les résultats expérimentaux. Toutefois, il y a quelques différences au niveau des températures dans les sphères même (*Figure 33*). Cela n'a que peu d'influence sur le résultat final (Puissance fournie - *Figure 32*) dans la mesure où cette différence de température n'est pas trop importante.

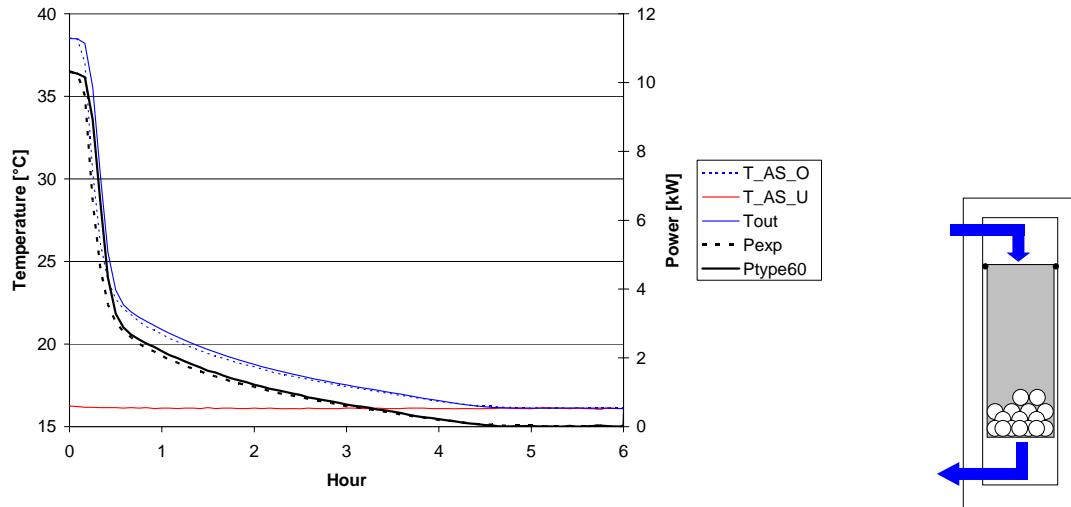


Figure 32 : Puissance lors de la décharge thermique de la cuve. Les lignes en pointillés sont des mesures alors que les lignes pleines sont le résultat de la simulation.

La *Figure 32* montre les températures (rouge, vert et bleu) dans les sphères se situant dans la partie basses de la cuve (voir la ligne rouge du schéma de droite).

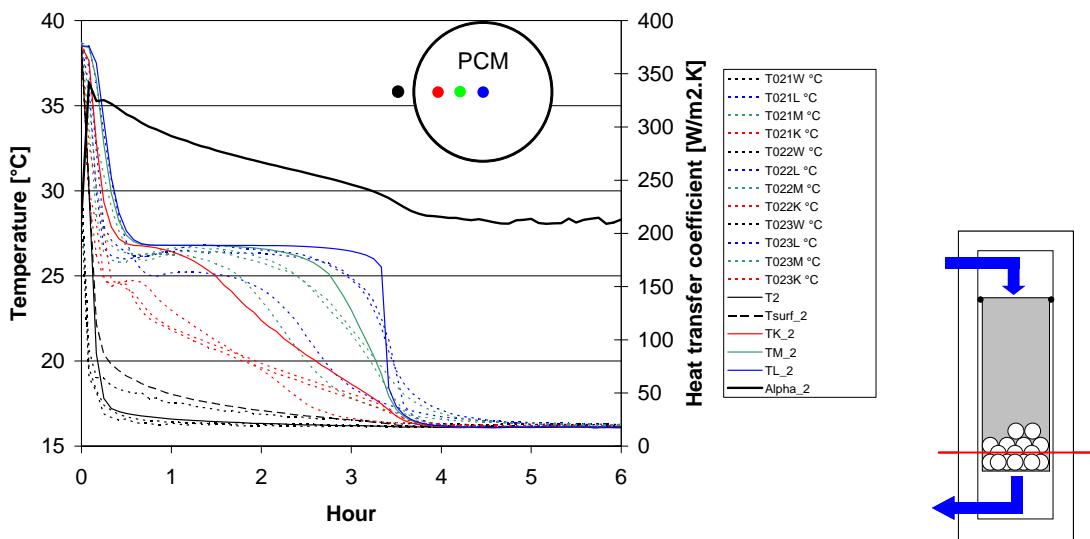


Figure 33 : Températures lors de la décharge thermique de la cuve. Les lignes en pointillés sont des mesures alors que les lignes pleines sont le résultat de la simulation.

Nous avons comparé également les résultats avec des résultats de simulations réalisées par l'équipe de Graz. Les 2 modèles donnent des résultats similaires alors que le coefficient convectif d'échange thermique entre l'eau et le PCM est 2 fois plus élevé dans l'un des 2 modèles. Ceci s'explique par le fait que le transfert de chaleur dans notre cas se fait en série, par conduction et convection à l'intérieur du module de PCM et ensuite par convection entre le PCM et l'eau. Si l'un des deux transferts est important et l'autre faible, le transfert global sera limité par ce dernier. Comme le transfert d'échange thermique est régi par le maillon faible qui est dans le cas étudié le module de PCM lui-même dans la mesure où la conduction thermique est faible (0.54 à 1.09 [W/m<sup>2</sup>.K] respectivement liquide et solide) la différence, des coefficients d'échange entre l'eau et le PCM utilisés dans les deux modèles, n'a que peu d'influence.

### 3.3 FORME CYLINDRIQUE

Nous avons également effectué des comparaisons entre simulations et mesures expérimentales sur des cylindres de paraffine réalisées en Autriche par l'université de Graz. Les mesures concernaient une cuve de un mètre de haut pour 34,6 litres avec 7 cylindres de 50 mm de diamètre remplis de paraffine. Le premier test est une charge thermique de la cuve ( $T_{init}=33$  [°C]) avec un débit d'eau de 100 [l/h] à 72 [°C]. Le deuxième test est une décharge thermique de la cuve ( $T_{init}=70$  [°C]) avec un débit d'eau de 100 [l/h] à 50 [°C]. Les figures suivantes montrent les résultats.

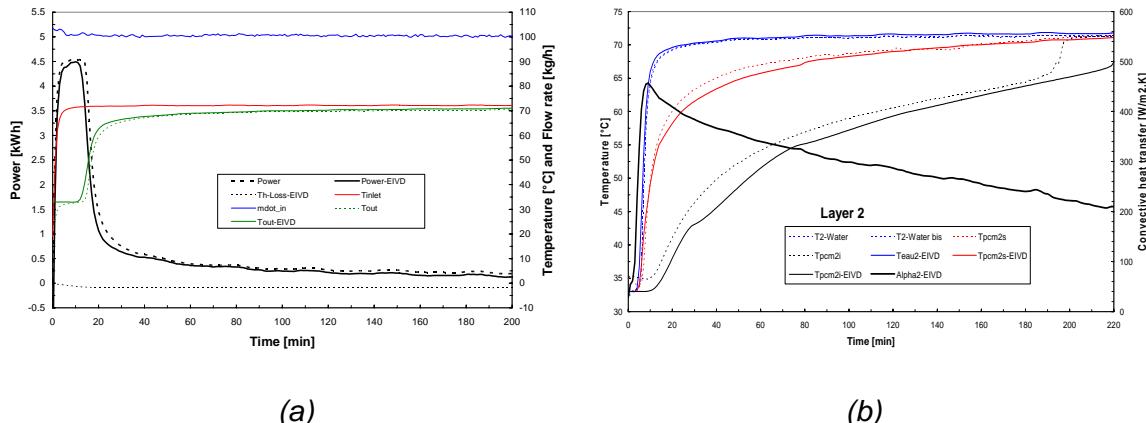


Figure 34 : (a) graphe de la puissance échangée et (b) graphe des températures et du coefficient convectif (eau/PCM) lors de la charge thermique de la cuve. Les lignes en pointillés sont des mesures alors que les lignes pleines sont le résultat de la simulation.

Nous sommes arrivés aux mêmes conclusions que pour le lit de sphères à savoir qu'il est difficile de valider nos modèles avec un matériau ayant un faible coefficient de conduction thermique.

Il paraît donc important de réaliser ce même type de tests avec des PCM ayant un coefficient de conduction élevé tel que l'acétate de sodium additionné de graphite ou de la paraffine avec un élément conducteur à l'intérieur.

## **Handbook**

Un texte synthétisant l'historique de l'application des PCMs dans le stockage thermique appliquée au solaire a été terminé et a été intégré dans le document intitulé : *Thermal Energy storage for solar and low energy buildings*.

## **Collaboration nationale**

Aucune

## **Collaboration internationale**

Une collaboration avec l'Université de Leida en Espagne (Dr. Lluisa F. Cabeza, Department of Informatics and Industrial Engineering) s'est concrétisée par un échange d'une semaine pour chaque représentant des deux écoles concernées.

1) Jacques Bony c'est rendu à Leida. Il a profité de cette visite pour améliorer ces connaissances dans les PCM, ainsi que sur les méthodes d'évaluation des caractéristiques de ces matériaux (méthodes T-history et DSC).

2) Lluisa F. Cabeza et Manuel Ibanez sont venus du 7 au 12 février 2005 à Yverdon. Pendant cette visite, nos visiteurs ont fait connaissance avec notre banc de tests Arpège.

Nous avons profité de cette venue pour recevoir également Andreas Heinz et Peter Puschnig de l'Université de Graz (Autriche) du 10 au 12 février 2005 pour faire un meeting spécifiquement dédié à la modélisation des PCM. Cette collaboration constructive et fructueuse a débouché sur un article présenté par J. Bony dans le cadre de la conférence PCM'05 qui s'est déroulée à Yverdon du 15 au 17 juin 2005.

## **Évaluation de l'année 2005 et perspectives pour 2006**

Les travaux effectués pendant l'année 2005 suivent relativement bien le planning. Par contre, la conformité entre simulations et résultats expérimentaux a montré la sensibilité du transfert de chaleur par convection pour les PCM ayant une phase liquide, comme la paraffine. Dans le cas de PCM avec une viscosité très importante voire infinie comme c'est le cas de l'acétate de Sodium avec du graphite, les simulations correspondent relativement bien aux résultats expérimentaux obtenus jusqu'ici.

Au début de l'année 2006, nous allons comparer les résultats entre simulations et expériences pour la cuve grise afin d'analyser le bilan énergétique lors d'une charge et décharge complète du PCM. Nous poursuivrons par une série de mesures en faisant des charges et des décharges partielles du PCM, afin de reproduire une situation plus réaliste de soutirage d'ECS. Nous finirons par une série de d'expériences avec Arpège afin d'analyser le cas du combi-système. Toutes ces mesures seront comparées avec le résultat des simulations

Nous allons également essayer d'améliorer quelque peu le modèle numérique pour tenir compte de manière raisonnable de la convection afin que le Type TRNSYS puisse être utilisé avec différent type de PCM. Il faut toutefois noter que ce n'est pas un problème trivial. Comme le financement se termine fin 2006, nous allons faire de notre mieux dans le temps à disposition pour améliorer cet aspect. Si prolongation de la Tâche 32 il y a, ce problème devrait peut-être faire partie des points à étudier par un des groupes.

## 4 Références

- [1] TRNSYS reference manual
- [2] J.Bony et al., Three different approaches to simulate PCM bulk elements in solar storage tank, PCM2005, Yverdon-les-Bains, juin 2005.
- [3] Franck P. Incropera, David P. De Witt, Fundamentals of heat and mass transfer, 1990.
- [4] E. Achenbach, Heat and flow characteristics of packed beds, Experimental Thermal and Fluid Science, 10:p 17-27, 1995.
- [5] Documentation Rubitherm, Allemagne (paraffine)
- [6] Documentation SGL Carbon Group, Allemagne (acetate de sodium avec graphite)
- [7] Georg Oberndorfer and al., Sensitivity of annual solar fraction of solar space and water heating systems to tank and collector heat exchanger model parameters.
- [8] Huib Visser, Energy storage in phase-change materials – Development of a component model compatible with the TRNSYS transient simulation program, Delft University of Technology, 1986.
- [9] Peter Egolf, Project Latentwärmespeicher für die Sonnenenergienutzung: Lade- und Entladevorgänge, 1997