

ANALYSE NUMÉRIQUE DE LA FUSION DE MATÉRIAUX À CHANGEMENT DE PHASE DANS UNE ENCEINTE RECTANGULAIRE CHAUFFÉE PAR UNE PAROI LATÉRALE

Zohir YOUNSI ^a, Annabelle JOULIN ^{a,*}, Laurent ZALEWSKI ^a, Stéphane LASSUE ^a,
et Daniel ROUSSE ^b

^a LAMTI – Faculté des Sciences Appliquées de l'Université d'Artois, Technoparc FUTURA 62400 Béthune Cedex France

^b Department of applied sciences – Université du Québec à Chicoutimi, 555, boulevard de l'Université, Chicoutimi Qc G7H 2B1 Canada

RÉSUMÉ

L'utilisation de matériaux à changement de phase (MCP) en vue du stockage de chaleur dans les bâtiments a été l'une des premières applications pour ces matériaux. L'objectif général de cette étude est d'intégrer des éléments de MCP dans des parois de murs solaires passifs. En vue de la réalisation de cet objectif, une étude sur le comportement complexe du matériau doit être effectuée. La modélisation du processus de fusion d'un matériau à changement de phase MCP27 (sels hydratés) est présentée dans cet article. La formulation enthalpique est utilisée pour les simulations numériques effectuées en 1D et en 2D. Il s'agira à terme d'introduire ce modèle dans un outil plus global de simulation de composants solaires.

Mots Clés : matériau à changement de phase, méthode enthalpique, fusion, stockage de chaleur

NOMENCLATURE

Symboles :

A	Matrice
B	Fonction de porosité
a	Diffusivité thermique (m ² /s)
b	Constante ($b=0,0003$)
C	Constante ($C=10^9$ kg/m ² s)
c	Chaleur spécifique (J/kg.K)
f	Fraction liquide
g	Gravité (m/s ²)
L	Chaleur latente de fusion (J/kg)
L_x	Longueur de la cavité (m)
L_y	Hauteur de la cavité (m)
Pr	Nombre de Prandtl
P	Pression (Pa)
R	Rapport d'aspect (L_x/L_y)
Ra	Nombre de Rayleigh
S	Terme source
Ste	Nombre de Stefan
T	Température (K)
t	Temps(s)
u	Vitesse selon x (m/s)
v	Vitesse selon y (m/s)

ΔV

x	Volume de contrôle
y	Direction x (m)
	Direction y (m)

Lettres Grecques

λ	Conductivité thermique (W/m.K)
β	Coefficient d'expansion thermique (K ⁻¹)
Γ	Coefficient de diffusion
μ	Viscosité (kg/m.s)
ρ	Densité (kg/m ³)
φ	Variable
ω	Facteur de sous-relaxation

Indices / Exposants

c	Position de l'interface
F	Fusion
l	Phase liquide
P	Nœud en présence
ref	Température de référence
S	Phase solide
0	Valeur initiale
w	Relatif à la paroi gauche

1. INTRODUCTION

Dans le contexte énergétique actuel et vraisemblablement futur, les outils et méthodes de conception des bâtiments et des systèmes énergétiques et thermiques associés évoluent très rapidement. Il est en effet nécessaire de mettre en œuvre des procédés

permettant une utilisation rationnelle des énergies d'origine fossile et d'augmenter de manière conséquente les moyens de capter, stocker et gérer les énergies renouvelables. De ce point de vue, après avoir recherché les moyens d'économiser l'énergie en particulier au niveau de l'isolation des bâtiments, il est d'actualité de favoriser les systèmes permettant d'augmenter les gains

* auteur correspondant
annabelle.joulin@univ-artois.fr

solaires d'un bâtiment tout en préservant le confort des occupants en toutes saisons [1-4].

Notre laboratoire travaille depuis plusieurs années à la caractérisation et à l'optimisation de murs solaires de type « murs TROMBE » [5, 6]. Plus récemment, nous avons entrepris de réfléchir aux possibilités qu'offrent les matériaux à changement de phase (MCP) dans ce contexte des murs solaires passifs [7]. En effet, le stockage par chaleur latente apparaît avantageux en comparaison avec un stockage par chaleur sensible. Les principaux avantages étant le stockage d'une grande quantité d'énergie dans un volume réduit et la restitution à un niveau de température (dépendant du matériau) proche des températures usuelles de confort thermique. Mais ces matériaux posent de nombreux problèmes et remettent en question les procédés en termes de dimensionnement et de gestion des apports.

Notre approche est triple. Elle concerne la caractérisation expérimentale du matériau dans le contexte de son utilisation, la modélisation du comportement thermique d'une brique de MCP et en parallèle l'étude expérimentale et numérique du comportement dynamique d'un composant d'enveloppe de bâtiment. Dans cette communication, nous présenterons nos travaux de recherche visant à formuler, implémenter et valider une méthode numérique en vue de la conception et de l'optimisation de murs solaires passifs fonctionnant avec des MCP.

La fusion d'un MCP commercialisé par la société Cristopia (MCP27) est étudiée numériquement en 1D et en 2D, pour quantifier l'effet de la convection naturelle. L'étude de cas 1D fournit de nombreuses informations. En effet, l'existence d'une solution analytique de référence permet de comparer quantitativement les résultats. La méthode des volumes finis basée sur une formulation enthalpique est utilisée pour les simulations numériques. Les résultats expérimentaux viennent conforter cette démarche et sont présentés dans une autre communication du colloque.

2. DESCRIPTION DU PROBLÈME ÉTUDIÉ

Dans ce travail, le matériau à changement de phase étudié (sels hydratés) a un point de fusion situé à $+27^{\circ}\text{C}$ [8]. Les échantillons fournis par le fabricant sont des éléments parallélépipédiques (briques) de dimensions $210*140*25\text{ mm}^3$. Géométrie qui semble bien adaptée à l'intégration dans un mur.

Soit un bloc de MCP solide dans une cavité rectangulaire de hauteur L_y , de largeur L_x . Initialement le matériau est à une température T_0 ($T_0 < T_F$, $t=0$). À $t=0$, la température du mur vertical gauche est imposée brutalement égale à une température T_w ($T_w > T_F$, $x=0$, $t \geq 0$). Les deux parois horizontales sont adiabatiques ($\frac{\partial T}{\partial y} = 0$, $y=0$, $y=L_y$), alors que les parois verticales sont

isothermes. L'enceinte est présentée sur la Figure 1.

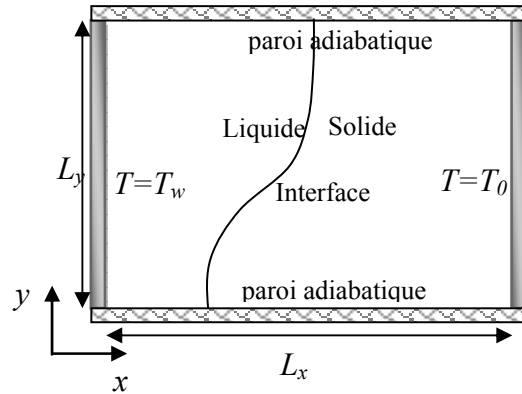


Figure 1 : schéma du problème

3. LE MODÈLE NUMÉRIQUE

3.1 Hypothèses

Afin d'écrire les équations régissant le problème physique à traiter, il est nécessaire d'effectuer un certain nombre d'hypothèses.

- Les propriétés thermophysiques du MCP sont constantes mais peuvent être différentes dans les phases liquide et solide (conductivité et chaleur spécifique).
- Le problème est bidimensionnel et transitoire.
- La conduction dans les phases solide et liquide du MCP est prise en compte, particulièrement aux premiers instants. Et même lorsqu'une bonne part du solide est sous forme liquide, la conduction demeure de l'ordre de grandeur de la convection.
- Le transfert par rayonnement est négligé.
- L'écoulement est considéré laminaire, incompressible et la convection naturelle est prise en compte par le biais de l'hypothèse de Boussinesq.
- La phase liquide est newtonienne et incompressible.
- Devant les taux de transfert de chaleur au niveau des parois verticales, la dissipation visqueuse est négligeable.
- Le MCP est pur. Dans la réalité, cette condition est difficilement rencontrée dans des matériaux commerciaux. Il s'agit ici et pour l'instant d'un problème type servant à valider une formulation numérique.
- Le MCP est homogène et isotrope.
- L'expansion du MCP est négligée et le changement de phase est isotherme.

3.2 Formulation des équations

Considérant les hypothèses mentionnées, les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et d'énergie qui décrivent le phénomène s'écrivent :

Région solide

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_s \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] \quad (1)$$

Région liquide

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2)$$

$$\rho_l \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + Bu \quad (3)$$

$$\rho_l \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \rho g \beta (T - T_{ref}) + Bv \quad (4)$$

Pendant le processus de résolution des équations de mouvement, les deux termes sources permettent d'annuler les vitesses dans la région solide et éventuellement dans la paroi. Un des modèles classiques pour la suppression de vitesse est celui de Darcy [9]:

$$B = -\frac{C(1-f)^2}{(f^3 + b)} \quad (5)$$

La constante C doit être suffisamment élevée afin d'annuler les vitesses dans la région solide et b est un petit nombre introduit ici simplement pour éviter une division par zéro dans le cas d'une fraction liquide nulle. Ici, $C = 10^9 \text{ Kg/m}^2\text{s}$ et $b = 0,0003$ [9].

3.3. Conditions aux limites

- A la paroi chauffée ($x=0, y, t$)

$$u = v = 0 \quad \text{et} \quad T = T_w \quad (6)$$

- A l'interface solide/liquide ($x=x_c, y=y_c, t$)

$$u = v = 0 \quad \text{et} \quad T = T_F \quad (7)$$

- A la paroi refroidie ($x=L_x, y, t$)

$$T = T_0 \quad (8)$$

- Aux parois horizontales adiabatiques ($x, y=0, t$) et ($x, y=L_y, t$)

$$u = v = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad (9)$$

$$\text{avec} \quad T_w > T_F > T_0$$

3.4 Discrétisation

Les équations (1-4) peuvent être réécrites sous la forme générale suivante [10].

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V\phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S \quad (10)$$

où Γ est le coefficient de diffusion et S le terme source associé à la variable ϕ . En raison de la géométrie cartésienne du problème choisi, il est avantageux d'employer une discrétisation structurée du domaine de calcul. Ceci permet d'employer un algorithme de résolution de type TDMA qui accélère la convergence des solutions numériques, particulièrement dans le cas de problèmes hautement non-linéaires qui requièrent des coefficients de relaxation faibles pour obtenir la convergence. L'équation discrétisée est mise sous la forme de l'équation algébrique générale suivante:

$$A_p \phi_p = \sum A_i \phi_i + S_\phi \quad (11)$$

où A_p est le coefficient de la variable ϕ au centre de la maille. A_i sont les coefficients de la variable ϕ au centre des mailles voisines. S_ϕ est un terme source.

Tous les termes de l'équation (11) sont discrétisés au moyen de différences centrées d'ordre deux, sauf pour les termes de convection, où pour assurer la stabilité du schéma aux différences centrées, il est nécessaire de procéder à une différenciation amont. Pour cela, c'est le schéma hybride d'ordre 1 qui a été retenu ici. Les coefficients de convection sont calculés en utilisant la technique d'interpolation de Rhie-Chow. L'algorithme Simpler est retenu pour le couplage vitesse-pression car il permet d'obtenir une meilleure convergence en pression (norme résiduelle adimensionnée des équations inférieure à 1.10^{-6}).

Dans la mise en œuvre numérique, la valeur de la fraction liquide est déterminée itérativement à partir de la solution courante du champ d'enthalpie à l'aide de l'expression suivante [3] :

$$f_p^{k+1} = f_p^k + \omega \frac{\Delta t A_p^k h_p^k}{\rho L \Delta V} \quad (12)$$

où ω est un facteur de sous-relaxation utile pour accélérer la convergence. Pendant les calculs, la correction (12) est en réalité appliquée à tous les points, ce qui impose une deuxième correction (13) pour les points qui se retrouvent avec une fraction liquide en dehors de l'intervalle $[0,1]$:

$$f_p^{k+1} = \begin{cases} 1 & \text{si } f_p^{k+1} > 1 \\ 0 & \text{si } f_p^{k+1} < 0 \end{cases} \quad (13)$$

En appliquant ces deux corrections à la suite, après la résolution du système d'équations, on détermine la nouvelle distribution de la fraction liquide. On renouvelle cette opération jusqu'à la satisfaction du critère de convergence. Une description plus détaillée de cette méthode enthalpique est fournie dans la référence [11].

3.5 Validation

La validation du code de calcul pour un problème bidimensionnel classique de changement de phase dans une cavité rectangulaire en présence de convection naturelle a été effectuée avec l'étude de trois problèmes. D'abord, le problème du solide impliquant de la glace a été étudié en 1D et en 2D afin de comparer les résultats avec et sans convection naturelle [12-14]. Puis, un problème 2D type, de la littérature, a été considéré (fusion du gallium) [15-17]. Enfin, le dernier problème considéré est le MCP 27. Seul ce problème est présenté ici [17].

4. FUSION DU MCP 27

Pour ce test, le MCP27 ($T_F=300,15$ K) est initialement à une température uniforme $T_0=288,15$ K. La température de la frontière gauche est subitement élevée à $T_w=323,15$ K. Ainsi, la fusion débute à $x=0$. Les propriétés thermophysiques utilisées sont présentées dans le Tableau 1.

Variable	Solide	Liquide
λ (W/m.K)	0,577	0,813
c_p (J/kg.K)	1751,5	2225
a (m ² /s)	$1,93 \times 10^{-7}$	$2,39 \times 10^{-7}$
ρ (kg/m ³)	1710	1530
Ste	0,234	0,297
L (kJ/kg)	172,42	
L (m)	0.2	
T_F (K)	300,15	
T_0 (K)	288,15	
T_w (K)	323,15	

Tableau 1 : Propriétés physiques du MCP 27

Tout d'abord, on peut constater sur la Figure 2, que la solution numérique 1D obtenue avec notre code de calcul FVM sur un bloc de longueur 0,2 m, est toujours

en excellent accord avec la solution analytique. De plus, on peut observer que tout au long des calculs, l'erreur sur la position de l'interface demeure très petite et qu'elle ne s'accroît pas. L'erreur relative au temps final est très petite (de l'ordre de 1,9%).

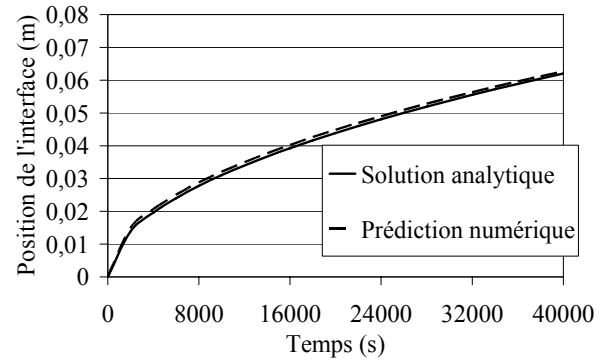


Figure 2 : Positions numérique et analytique de l'interface

La Figure 3 montre le déplacement de l'interface solide-liquide dans le cas 1D et 2D. La position de l'interface est tracée à différents moments de la fusion du MCP 27 ($t=1000$ s, $t=10\ 000$ s, $t=20\ 000$ s, $t=30\ 000$ s, et $t=40\ 000$ s). Au tout début du processus de fusion ($t=1000$ s), l'interface est presque verticale, signifiant la prédominance du mode de transfert de chaleur par conduction. Les isothermes demeurent verticales et parallèles. Au fur et à mesure, le front s'incline. Il apparaît deux points d'inflexion, l'un en haut de la cellule, l'autre en bas. Il se produit dans cette dernière région un blocage de transferts conduisant au ralentissement de l'interface.

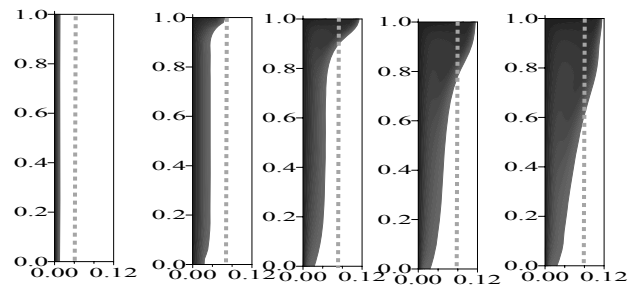


Figure 3 : Position de l'interface solide-liquide dans la fusion du MCP27 pour le cas 1D (pointillés) et 2D, aux temps $t=1000$ s, $t=10000$ s, $t=20000$ s, $t=30000$ s et $t=40000$ s.

Au fur et à mesure que la convection s'intensifie, le taux de fusion s'accroît dans la partie supérieure de l'interface. Le fluide se trouvant à proximité de la paroi chauffée acquiert de la chaleur, ce qui occasionne une augmentation de sa température et une diminution de sa densité. Alors, il monte le long de la paroi chauffée en étant accéléré. En haut de la cellule, sa quantité de mouvement est très importante, puis le fluide descend le long de l'interface solide-liquide. Au cours de sa

descente, il perd sa chaleur au profit de l'interface froide. Au bas de l'interface, le fluide est froid, et les gradients de température de même que les taux de fusion sont faibles. On peut remarquer d'ailleurs que le taux de fusion au bas de l'interface est plus faible en présence de convection naturelle qu'en présence de conduction seulement.

Sur la Figure 4 est présentée la variation de la fraction liquide pour le cas 1D et 2D. Le taux de fusion dans le cas du MCP 27 est dominé par la conduction, vu qu'il est plus important dans le cas 1D que dans le cas 2D. On peut dire que la convection freine le déplacement de l'interface solide-liquide car la fusion est concentrée uniquement dans la partie supérieure de la cavité.

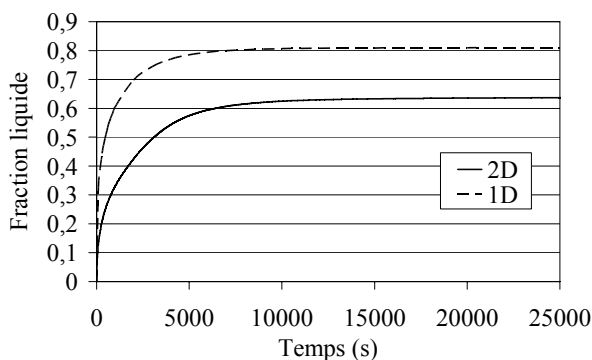


Figure 4 : Variation de la fraction liquide du MCP 27 dans le cas 1D et dans le cas 2D

L'objectif principal de cette étude étant de proposer un outil pour la conception de murs solaires passifs composés de briques de MCP, la validité des prédictions numériques doit être déterminée en les confrontant à des données expérimentales, et aussi à un autre code numérique. Les résultats expérimentaux ont été présentés dans [7], avec les détails de la méthode expérimentale fluxmétrique utilisée pour les mesures des propriétés thermophysiques et la détermination du comportement des briques de MCP. De plus, des simulations numériques sur le code de calcul Fluent 6.2 ont été effectuées en 1D.

Le temps du stockage et du déstockage prédit par les modélisations est comparé avec les mesures expérimentales réalisées.

Sur la figure 5, les variations de flux de chaleur et de température dans le MCP sont présentées en fonction du temps, lorsque le matériau à changement de phase subit une élévation de température de 15°C à 50°C (fusion complète) sur sa paroi gauche. Sur cette figure, représentant le stockage thermique, les courbes issues des simulations numériques ainsi que la courbe expérimentale sont proches les unes des autres. Des disparités sont cependant présentes dans la zone où les deux phases coexistent. Cela peut être justifié par le fait que les arrangements cristallins ne sont pas identiques

après chaque phase de solidification (réorganisation aléatoire). Cependant, les trois phases du transfert sont présentes (solide, solide/liquide, liquide), et la durée de chaque phase est sensiblement identique pour les simulations et l'expérience.

L'effet de la convection n'a qu'une influence relative sur les résultats obtenus, puisque la simulation est réalisée en 1D. Notons toutefois la faible épaisseur de la brique de MCP (25 mm), générant un rapport de forme de 0,12.

Les variations de température et de flux thermique sont aussi déterminées dans le cas du déstockage thermique. La brique de MCP subit une évolution de température de 50°C à 15°C. On constate sur la figure 6 une différence entre les résultats simulés et les résultats expérimentaux, dans la zone de déstockage de chaleur latente. En effet, la simulation numérique ne prend pas en compte l'effet très important de la surfusion. Toutefois, le temps du déstockage ainsi que la quantité de chaleur déstockée sont en moyenne les mêmes dans l'expérience et dans la simulation.

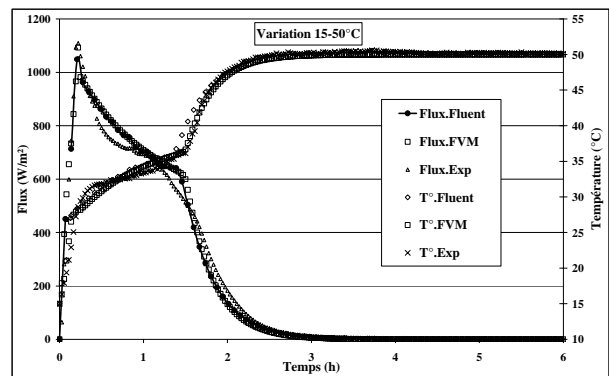


Figure 5 : Variation du flux (gauche) et de la température (droite) d'une brique de MCP initialement à 15°C quand la température de la paroi gauche est soudainement élevée à 50°C

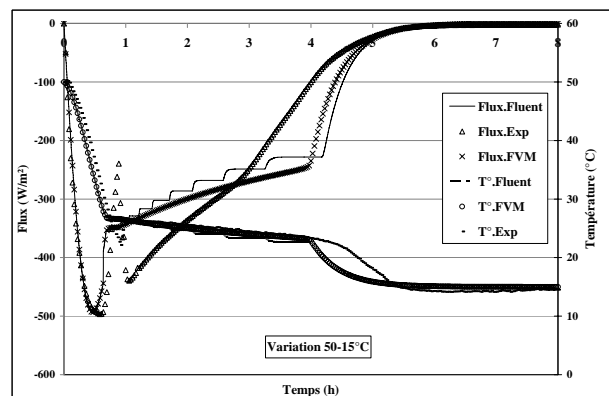


Figure 6 : Variation du flux (gauche) et de la température (droite) d'une brique de MCP pour un déstockage 50°C-15°C

5. CONCLUSION

Dans cet article, un travail numérique a été effectué pour étudier les caractéristiques thermiques du processus de fusion d'un matériau à changement de phase (MCP27) chauffé sur une paroi verticale d'une enceinte rectangulaire.

Une formulation enthalpique est utilisée pour analyser le stockage par chaleur latente du MCP27. La solution est obtenue en employant une méthode de volumes finis afin de comprendre la part de convection naturelle dans la fusion. Une étude de sensibilité préalable du pas de temps, des facteurs de relaxation et du maillage a été envisagée pour tester la non-dépendance de la solution obtenue.

Les prédictions numériques obtenues nous ont confortés dans la formulation et la méthode d'implémentation.

Les temps de stockage et de déstockage d'énergie ont été calculés par deux codes de simulation numérique 1D (FVM et Fluent), ainsi que par la voie expérimentale. Les courbes obtenues sont très proches pour le stockage par chaleur sensible et chaleur latente. Idem dans le cas du déstockage. Toutefois, des différences apparaissent dans le déstockage par chaleur sensible. Ces différences sont dues notamment au fait que les deux simulations ne tiennent pas compte de l'effet de surfusion. La comparaison demeure satisfaisante et cette méthode numérique peut à présent être utilisée pour l'étude de l'introduction de briques de MCP27 dans des murs solaires passifs.

REMERCIEMENTS

Les auteurs remercient le programme ANR-PREBAT qui a participé au financement de cette étude et Artois Comm ainsi que la région Nord Pas de Calais pour avoir financé la thèse de doctorat de Zohir Younsi.

Le cinquième auteur remercie le Natural Sciences and Engineering Research Council du Canada (NSERC) pour son soutien (« Discovery grant »).

RÉFÉRENCES

- [1] **YAGI V.V., BUDHI D.**, *PCM thermal storage in buildings : A state of art*, Renewable and Sustainable Energy Reviews, 11(6):1146-1166, (2007)
- [2] **ZHANG, Y., ZHOU, G., LIN, K., ZHANG, Q., DI, H.**, *Application of latent heat thermal energy storage in buildings: State-of-the-art and outlook*, Building and Environment, Vol.42, No. 6, 2197-2209, (2007).
- [3] **SHARMA, A., TYAGI, V.V., CHEN, C.R., BUDDHI, V.**, *Review on thermal energy storage with phase change materials and applications*, Renewable and Sustainable Energy Reviews, In Press, Corrected Proof, Available online 17 December (2007)
- [4] **FARID M.M., KHUDHAIR A.M., RAZACK S.A.K., AL-HALLAJ S.**, *A review on phase change energy storage: materials and applications*, Energy Conversion and Management, Vol. 45, No. 9-10, 1597-1615, (2004).
- [5] **ZALEWSKI L., LASSUE S., DUTHOIT B. and BUTEZ M.**, *Study of solar walls validating a simulation model*, Building and Environment, Vol. 37, No.1, 109-121, (2002).
- [6] **YOUNSI, Z., JOULIN, A., ZALEWSKI, L., LASSUE, S., ROUSSE, D.**, *Phase change material: Experimental Measurements of Thermophysical properties*, Proc. ICTEA, (2009).
- [7] **YOUNSI, Z., JOULIN, A., ZALEWSKI, L., LASSUE, S., ROUSSE, D.**, *Thermophysical characterization of phase change materials with heat flux sensors*, Proceedings of Eurotherm, The Netherlands, (2008).
- [8] **CRISTOPIA**, www.cristopia.com
- [9] **ISWANATH R., JALURIA Y.**, *A Comparison of Different Solution Methodologies for Melting and Solidification Problems in Enclosures*, Num. Heat Transfer Part B, Vol. 24, 77-105, (1993).
- [10] **PATANKAR, S.V.**, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Taylor & Francis, (1980).
- [11] **VOLLER V.R., CROSS M., MARKATOS N.C.**, *An enthalpy method for convection/diffusion phase change*, I.J. Num. Meth. In Eng, Vol 24, 271-284, (1987).
- [12] **DE GROH III, H.C. and LINDSTROM, T.**, 1994. *Interface Shape and Convection during Solidification and Melting of Succinonitrile*. NASA TM 106487, June (1994).
- [13] **KOWALEWSKI T.A. and REBOW M.**, *An experimental benchmark for freezing water in the cubic cavity*, Adv. in Computational Heat Transfer, CHT-97, Begell House, New York, (1997).
- [14] **LACROIX M. and VOLLER V.R.**, *Finite Difference Solutions of Solidification Phase Change Problems: Transformed Versus Fixed Grids*, Num. Heat Transfer Part B, Vol. 17, 25-41, (1990).
- [15] **GAU C. and VISKANTA R.**, *Melting and Solidification of a Pure Metal on a Vertical Wall*, J. Heat Transfer – Transactions of the ASME, Vol. 108, 174-181, (1986).
- [16] **GONG Z-X.**, *Time-Dependent Melting and Freezing Heat Transfer in Multiple Phase Change Materials*, Ph.D. thesis, Department of Chemical Engineering, McGill University, Canada, (1996).
- [17] **YOUNSI, Z.**, *Étude expérimentale et numérique du comportement thermique de matériaux à changement de phase. Intégration dans un composant solaire passif pour l'habitat*, Ph.D. thesis, Université d'Artois, (2008).