



HAL
open science

Modélisation multi-échelles d'un système de stockage thermique de vapeur par Matériau à Changement de Phase (MCP)

Clément Beust

► **To cite this version:**

Clément Beust. Modélisation multi-échelles d'un système de stockage thermique de vapeur par Matériau à Changement de Phase (MCP). Génie des procédés. Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2019. Français. NNT: 2019PAUU3029 . tel-02501319

HAL Id: tel-02501319

<https://theses.hal.science/tel-02501319v1>

Submitted on 6 Mar 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

UNIVERSITE DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR

École doctorale 211 : Sciences Exactes et leurs Applications

Présentée et soutenue le 24 octobre 2019

par **Clément BEUST**

pour obtenir le grade de docteur
de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour

Spécialité : Énergétique

Modélisation multi-échelles d'un système de stockage thermique de vapeur par Matériau à Changement de Phase (MCP)

MEMBRES DU JURY

RAPPORTEURS

- Nolwenn LE PIERRES
- Frédéric KUZNIK

Professeur, Université Savoie Mont Blanc
Professeur, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon

EXAMINATEURS

- Justin CHIU
- Françoise BATAILLE

Assistant Professeur, Royal Institute of Technology (KTH), Suède
Professeur, Université de Perpignan Via Domitia

DIRECTEURS

- Erwin FRANQUET
- Jean-Pierre BÉDÉCARRATS
- Pierre GARCIA
- Jérôme POUVREAU

Maître de Conférences HDR, Univ. Pau et Pays de l'Adour, Directeur de thèse
Professeur, Université de Pau et des Pays de l'Adour, Directeur de thèse
Docteur-Ingénieur, CEA – LITEN, Encadrant
Docteur-Ingénieur, CEA – LITEN, Encadrant



Remerciements

Nous y voilà. La fin des trois années passées en thèse au CEA est arrivée. Au moment d'écrire ces remerciements, je réalise à quel point ces années de thèse ont passé vite. Ces trois années furent à n'en pas douter très enrichissantes sur les plans scientifique et professionnel, mais également sur le plan humain. Les nombreuses personnes que j'ai eu l'occasion de rencontrer et de côtoyer, encadrants comme collègues, ont toutes d'une certaine manière contribué à faire de cette thèse une expérience professionnelle que je n'aurai pas pu espérer être meilleure, et une période inoubliable de ma vie. Ces années ont également été le théâtre de nombreux événements dans ma vie personnelle et dans celle de mes proches, parfois heureux, parfois moins. En fin de compte, c'est le positif que je retiendrai de cette période, et cela grâce aux personnes auxquelles je me dois de rendre hommage à travers ces quelques mots sur lesquels ma thèse se termine.

Je tiens tout d'abord à remercier les personnes ayant encadré et suivi ma thèse, côté CEA et côté LaTEP. Merci à Pierre Garcia, mon encadrant CEA, de m'avoir tout d'abord fait confiance pour mener à bien le travail que représente cette thèse, et pour l'encadrement au quotidien. Ta sympathie et le temps que tu m'as consacré m'ont été précieux, et ton point de vue d'ingénieur m'a permis d'apporter une coloration « pratico-pratique » à mon travail dont je suis fier. Merci à Erwin Franquet et Jean-Pierre Bédécarrats, mes deux co-directeurs de thèse académiques du LaTEP, pour m'avoir également fait confiance d'une part, et pour la qualité de votre encadrement d'autre part. Travailler étroitement ensemble alors que nous nous trouvions à deux bouts opposés de la France n'était pas un pari gagné d'avance. C'est pourquoi je tiens à vous remercier pour le temps que vous m'avez consacré, pour la qualité de vos conseils en simulation, sur les MCP, et aussi sur le plan administratif, et de manière générale pour l'implication dont vous avez fait preuve malgré la distance. Merci à vous trois pour la patience dont vous avez peut-être dû vous armer devant mes mails souvent longs, pour votre sympathie, et pour m'avoir accompagné pendant cette aventure. J'ai beau avoir été « sur-encadré », notre équipe a fonctionné à merveille, et je vous en remercie infiniment.

Merci à Jérôme Pouvreau pour l'intérêt porté à mon travail tout au long de la thèse, pour les précieux conseils pour les différents travaux de simulation, et aussi pour la relecture attentive et approfondie de ce manuscrit. J'ai beaucoup apprécié travailler avec toi. Merci également à Jean-François Fourmigué, pour son point de vue avisé sur les différents aspects de mon travail, et dont l'aide et les conseils ont permis des avancées importantes à plusieurs étapes de la thèse. Merci pour le temps que tu m'as consacré, et pour l'enthousiasme avec lequel tu participais aux réunions, et avec lequel nous discutons science de temps à autres.

Je souhaite remercier également les membres de mon jury de thèse. Merci à Nolwenn Le Pierres et Frédéric Kuznik pour le regard critique et les remarques très pertinentes et enrichissantes soulevées sur mon travail. Merci également à Frédéric Kuznik de m'avoir fait l'honneur de présider le jury, de surcroît au pied levé ! Merci à Françoise Bataille et Justin Chiu d'avoir examiné mon travail, et pour leurs remarques sur les différents aspects de ma thèse.

Merci aux membres du Laboratoire de Stockage Thermique qui m'ont apporté leur aide à différentes occasions. Merci à Fabrice Bentivoglio d'avoir suivi une partie de ma thèse, et pour sa contribution à certaines des réflexions importantes qui ont constitué ce travail. Merci à Sylvie Rougé pour le temps

qu'elle a consacré à me faire partager son expérience sur les aspects diphasiques. Merci également à Monique Sabaté et Eglantine Berthon pour le soutien administratif, et aux autres membres du laboratoire (Arnaud Bruch, Grégory Largiller, Gilles Matringe, Sébastien Vesin) qui ont pu plus ponctuellement m'aider ou s'intéresser à mon travail. Merci enfin à chacun d'entre vous pour votre bonne humeur, qui contribue à faire un laboratoire où il fait bon vivre.

Merci également à Raphaël Couturier pour m'avoir accueilli dans son laboratoire, et pour le soutien apporté régulièrement. Merci à Olivier Lemaire et à Patrice Tochon d'avoir permis la réalisation de cette thèse, respectivement dans le service et dans le département.

Je tiens ensuite à remercier tous les collègues que j'ai pu côtoyer au CEA pendant ces trois ans, et qui ont tous largement contribué à en faire de très bonnes années de ma vie. Merci tout d'abord à Grégoire Bellenot qui m'a accompagné pendant toute la durée de la thèse, en étant arrivé au CEA le même jour que moi ! Nos nombreuses discussions en salle café ou au bureau, tes jeux de mots inimitables, tes blagues sur notre motivation (« Hello *DARKNESS* my old friend... ») ou sur les logiciels de simulation démoniaques qui hantent nos PC, les références et les délires communs (François Pérusse, « Bienvenue, ici c'est le D4 le Survivaure ! », et de nombreux autres)... C'est rien de dire qu'être à tes côtés pendant trois ans a rendu la vie bien plus gaie, et fut également d'un grand soutien moral. Les soirées au Casse-Croûte à Dédé et nos échanges quotidiens de vanes et de jeux de mots vont me manquer.

Merci à toutes les personnes avec qui j'ai passé de bons moments, que ce soit en salle café, le midi, ou des soirées. Merci aux proches collègues des deux premières années, Frédéric Mure-Ravaud, Théo Garcia-Guitton, Marc George, Maxime Gruss et Amine Sabri. Merci au groupe des « précaires » du D8, dont la bonne humeur a été un soutien moral non négligeable pendant la période chargée qu'est la rédaction du manuscrit. Merci à Adrien Abbate d'avoir été un fort sympathique collègue de bureau au D8. Merci à Robin Gautier, Elie Ghanatos et Olga Rouchouze pour les parties de Hanabi du midi. Merci à Fatima-Zahraa « Fati » Bouzidi pour les fous rires et la « téléfati » pendant les parties de cartes, à Louis Piquard pour l'insoumission, et à Floriane Lavorel pour sa bonne humeur inoubliable, et pour sa sagesse et sa patience face à mes piètres talents en matière de jeux de stratégie (« Aie confiance en tes alliés ! »). Merci à Antoine Santamaria d'avoir été un collègue très sympathique, et un stagiaire agréable à encadrer ! Merci à Noé Beaupère, pour sa sympathie les nombreuses fois où nous nous sommes croisés. Bien qu'égaré mystérieusement dans un autre département et un autre bâtiment, tu étais pratiquement comme un membre du labo ! Merci à Anthony Chambon et à Bénédicte Champel qui ont partagé mon bureau au D4, pour leur bonne humeur, et les nombreuses discussions que nous avons pu avoir.

Merci enfin aux nombreuses personnes de passage, et aux personnes du D4-D6-D8 que j'ai pu croiser occasionnellement ou régulièrement, et qui font la vie de labo : Clément Gazon, Gaël Fragne, Gabriel Tang, Rémi Fabre, Raphaël Benzama Onomastico, Benjamin Dormoy, Violette Turon, Chalore Teepakorn, Pierre Coste, Thibaut Esence, Nahia Sassine, Franck Mastrippolito, Laura Guimard, Quentin Blondel, Safoura El Harouat, Jérémy Berindei, Philippe Marty, Quynh Trang Pham, Hai Trieu « Mimo » Pham, Amélie Maise, Jérôme Bentivoglio, Harold Espargilliere, Benjamin Lagorsse, Lucas Champelovier... La liste est longue et je m'excuse par avance auprès de ceux que j'aurais oublié ! Merci à vous tous.

Pour finir, je tiens à remercier ma famille dont le soutien sans faille m'a toujours accompagné. Un grand merci à ma sœur Marjorie Beust, avec qui j'ai partagé un appartement pendant les trois années de la thèse. Vivre à tes côtés a été un réel bonheur, et je pense que nous avons tous les deux beaucoup retiré

de cette période où nous avons vécu et avancé ensemble. Pendant trois ans je t'ai vu mûrir et t'épanouir, et ton soutien m'a pour ma part grandement aidé pour traverser l'étape de ma vie qui se termine avec ce manuscrit.

Une infinité de merci enfin à mes parents, Pascale et Hervé Beust. Si j'ai pu m'orienter vers cette thèse et la mener à bien, c'est en grande partie grâce à votre soutien inconditionnel face aux épreuves que nous avons dû traverser ensemble ces dernières années. Je vous en suis infiniment reconnaissant. Cette thèse comme tout ce que j'ai fait dans ma vie n'aurait aucun sens si vous n'étiez pas là, si nous n'étions pas la formidable famille unie que nous formons. Je vous dédie ce manuscrit de thèse, qui, je l'espère, illustre la leçon la plus importante que vous m'avez apprise : si c'est notre destin, aucun obstacle ne peut nous écarter de la route que nous souhaitons suivre.

MODÉLISATION MULTI-ÉCHELLES D'UN SYSTÈME DE STOCKAGE THERMIQUE DE VAPEUR PAR
MATÉRIAU A CHANGEMENT DE PHASE (MCP)

Clément BEUST - 2019

Table des matières

Remerciements.....	i
Table des matières.....	v
Nomenclature.....	ix
Alphabet latin	ix
Alphabet grec	x
Indices et exposants	xi
Abréviations.....	xii
Chapitre I. Introduction et contexte.....	1
I.1. Le stockage d'énergie thermique	2
I.2. Le stockage de vapeur	4
I.3. Le stockage thermique par MCP	5
I.4. Objectifs et plan de la thèse.....	9
Chapitre II. État de l'art	13
II.1. Les technologies de stockage de vapeur	13
II.1.1. L'accumulateur de vapeur	13
II.1.1.1. Concept de base – L'accumulateur de Ruths	13
II.1.1.2. Intégration et usages dans un système de stockage.....	16
II.1.1.2.1. Fonctionnement avec injection ou extraction d'eau liquide	16
II.1.1.2.2. Production de vapeur surchauffée.....	17
II.1.1.2.3. Variantes pour d'autres applications que le stockage de vapeur	19
II.1.2. Le stockage de vapeur par MCP	20
II.1.2.1. Systèmes tubes-calandre.....	20
II.1.2.1.1. Description du concept	20
II.1.2.1.2. Modules prototypes.....	22
II.1.2.2. Encapsulation du MCP.....	26
II.1.2.3. Matériau composite	27
II.1.2.4. Fluide caloporteur intermédiaire	28
II.1.2.5. Mise en mouvement du MCP.....	29
II.2. Modélisation 2D /3D du changement de phase solide / liquide.....	31
II.2.1. Méthodes à interface raide	33

II.2.1.1.	Méthode à maillage variable	33
II.2.1.2.	Méthodes à grille fixe	36
II.2.2.	Méthodes à interface diffuse	38
II.2.2.1.	Méthodes bi-fluide	38
II.2.2.2.	Méthodes mono-fluide.....	38
II.2.2.2.1.	Modèle fluide – Annulation de la vitesse dans le solide	39
II.2.2.2.2.	Modèle thermique – Changement de phase isotherme ou quasi-isotherme....	42
II.3.	Modélisation 1D des écoulements diphasiques liquide-vapeur en conduite	47
II.3.1.	Modèles homogènes	48
II.3.1.1.	Formulation de base - Modèles à 3 équations.....	48
II.3.1.2.	Variantes.....	51
II.3.2.	Modèles bi-fluide.....	52
II.3.2.1.	Principe, modèles à 6 équations	52
II.3.2.2.	Variantes – Modèles à 4, 5, 7 équations	54
II.3.2.3.	Codes de simulation implémentant des modèles bi-fluide.....	55
II.3.3.	Modèles drift-flux	55
II.3.3.1.	Principe.....	55
II.3.3.2.	Formulation des équations.....	56
II.3.4.	Modèles à frontière mobile.....	57
II.3.4.1.	Principe.....	57
II.3.4.2.	Variantes.....	58
II.4.	Synthèse	60
Chapitre III.	Modélisation 2D / 3D du changement de phase solide / liquide	63
III.1.	Problématique et objectifs	63
III.2.	Le modèle enthalpie-porosité de Voller et ses problématiques	64
III.2.1.	Equations constitutives	64
III.2.2.	Problématique de la constante de zone pâteuse	65
III.2.3.	Problématique de la caractérisation du MCP	68
III.3.	Description des expériences numériques	70
III.3.1.	Description des cas d'étude	70
III.3.1.1.	Cas 1 – Fusion dans une cavité rectangulaire.....	70
III.3.1.2.	Cas 2 – Fusion dans un système de stockage tube-calandre	71
III.3.2.	Modèle numérique.....	73
III.3.2.1.	Cas 1	74

III.3.2.2.	Cas 2	75
III.3.3.	Méthodologie de comparaison des essais numériques avec l'expérience	78
III.4.	Étude croisée de la constante de zone pâteuse et de la plage de température du changement de phase	80
III.4.1.	Différences entre les deux cas d'étude	85
III.4.1.1.	Sensibilité des résultats aux paramètres.....	85
III.4.1.2.	Influence relative des deux paramètres.....	88
III.4.2.	Influence croisée des deux paramètres.....	90
III.4.3.	Choix des valeurs des paramètres	93
III.4.3.1.	Constante de zone pâteuse	93
III.4.3.2.	Intervalle de température	94
III.4.4.	Grandeurs pertinentes pour la validation du modèle	96
III.5.	Influence de la chaleur latente de changement de phase	97
III.6.	Synthèse du chapitre	100
Chapitre IV.	Modélisation multi-échelles	103
IV.1.	Méthodologie de modélisation multi-échelles	103
IV.2.	Description du modèle	108
IV.2.1.	Modèle système	108
IV.2.2.	Calcul de la conductivité équivalente du milieu MCP + ailettes / inserts.....	115
IV.3.	Cas d'application – Module de stockage prototype	118
IV.3.1.	Description du module prototype	118
IV.3.2.	Description des modèles CFD et système du module prototype	123
IV.3.2.1.	Modèle CFD	123
IV.3.2.1.1.	Géométrie et maillage	123
IV.3.2.1.2.	Conditions aux limites et paramètres du modèle.....	125
IV.3.2.2.	Modèle système	130
IV.4.	Résultats d'application au module de stockage prototype	132
IV.4.1.	Étude CFD – Caractérisation des transferts thermiques.....	132
IV.4.1.1.	Méthodologie	132
IV.4.1.2.	Résultats	136
IV.4.2.	Modèle système	145
IV.5.	Synthèse du chapitre	152
Chapitre V.	Comparaison des résultats de modélisation multi-échelles à des résultats expérimentaux.....	153

V.1.	Charge en pression glissante	153
V.1.1.	Validité de la corrélation $Nu = f(Ra)$	154
V.1.2.	Energie accumulée	155
V.1.3.	Front de fusion	161
V.2.	Charge en pression fixe	167
V.2.1.	Validité de la corrélation $Nu = f(Ra)$	168
V.2.2.	Energie accumulée	170
V.2.2.1.	Résultats et hypothèses d'interprétation.....	170
V.2.2.2.	Hypothèse 1 – Avancement local de la fusion	176
V.2.2.3.	Hypothèse 2 – Effets des mouvements de convection naturelle du MCP liquide.....	179
V.2.3.	Front de fusion	185
V.3.	Synthèse du chapitre	188
Chapitre VI.	Conclusion et perspectives	191
VI.1.	Conclusions.....	191
VI.2.	Perspectives.....	195
Annexes		201
Annexe 1 – Corrélations pour le coefficient d'échange intérieur tube utilisées dans le modèle système.....		201
Annexe 2 – Résolution numérique des équations du modèle système		203
Annexe 3 – Placement et nomenclature des thermocouples dans le module de stockage prototype		207
Annexe 4 – Paramètres du modèle système pour les calculs de charge du module prototype.....		213
Annexe 5 – Condition aux limites à la paroi interne du tube pour les calculs CFD de charge du module prototype		215
Références bibliographiques		219

Nomenclature

Alphabet latin

A	facteur dans le terme de pénalisation de la vitesse du modèle enthalpie-porosité de Voller ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$)
A_{mush}	constante de zone pâteuse ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$)
b	constante intervenant dans le terme de pénalisation de la vitesse du modèle enthalpie-porosité de Voller
B	constante intervenant dans les modèles avec viscosité variable (kg.s.m^{-3})
c	périmètre d'une conduite (m)
c_p	capacité thermique massique ($\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$)
C	coefficient de proportionnalité dans une corrélation entre un nombre de Nusselt et un nombre de Rayleigh, ou facteur de proportionnalité intervenant dans l'équation de Carman-Kozeny pour les milieux poreux ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$)
C_0	<i>distribution parameter</i> des modèles drift-flux
D	distance (m)
D_{th}	diffusivité thermique ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$)
e_l	épaisseur de couche avec MCP liquide (m)
E	énergie (J)
f	porosité
F	frottement
g, \vec{g}	accélération de la pesanteur (m.s^{-2})
h	enthalpie massique (J.kg^{-1})
H	enthalpie (J)
j	vitesse moyenne dans un écoulement liquide / vapeur (m.s^{-1})
l_c	longueur caractéristique (m)
L	chaleur latente de changement de phase solide-liquide (J.kg^{-1})
m	masse (kg)
\dot{m}	débit massique (kg.s^{-1})
n	exposant dans une corrélation entre un nombre de Nusselt et un nombre de Rayleigh
\vec{n}	vecteur normal
Nu	nombre de Nusselt
P	pression (Pa)
Pr	nombre de Prandtl
q	densité de flux de chaleur (W.m^{-3})
r	coordonnée cylindrique, position radiale (m)
Δr	pas d'espace (direction radiale) (m)
R	rayon (m)
Ra	nombre de Rayleigh

Re	nombre de Reynolds
S	section de passage (m^2)
S_e	surface d'échange (m^2)
t	temps (s)
Δt	pas de temps (s)
T	température ($^{\circ}C$)
T_{liq}	température de liquidus ($^{\circ}C$)
$T_{ref,b}$	température de référence pour l'approximation de Boussinesq ($^{\circ}C$)
T_{sol}	température de solidus ($^{\circ}C$)
\vec{u}	vecteur unité
\vec{v}	vitesse ($m.s^{-1}$)
$\bar{v}_{gj}, \langle\langle v_{gj} \rangle\rangle$	vitesse de glissement intervenant dans les modèles <i>drift-flux</i> ($m.s^{-1}$)
V	volume (m^3)
x	coordonnée cartésienne, position horizontale (m)
x_m	fraction massique de MCP
x_v	fraction volumique de MCP
x_{vap}	titre massique de vapeur
y	coordonnée cartésienne, position verticale (m)
Y_l	fraction liquide massique
\bar{Y}_l	fraction liquide massique moyenne dans un volume de MCP
z	coordonnée cylindrique, position axiale (m)
z_{niv}	position du niveau d'eau liquide (m)
Δz	pas d'espace (direction axiale) (m)
Z	hauteur (m)

Alphabet grec

α	coefficient d'échange ($W.m^{-2}.K^{-1}$)
α_{pertes}	coefficient de pertes thermiques ($W.K^{-1}$)
β	coefficient de dilatation thermique (K^{-1})
ε	taux de vide
ϕ	densité de flux de chaleur ($W.m^{-2}$)
Φ	flux de chaleur (W)
χ	périmètre mouillé (m)
λ	conductivité thermique ($W.m^{-1}.K^{-1}$)
μ	viscosité dynamique (Pa.s)
ν	viscosité cinématique ($m^2.s^{-1}$)
ρ	masse volumique ($kg.m^{-3}$)
σ	écart-type
τ	tolérance numérique
θ	coordonnée cylindrique, position angulaire ; ou inclinaison d'une conduite par rapport à la verticale ($^{\circ}$)

Indices et exposants

<i>ail</i>	aillettes et inserts
<i>c</i>	chaud
<i>calo</i>	fluide caloporteur
<i>CFD</i>	modèle CFD (Computational Fluid Dynamics)
<i>corr</i>	corrélation
<i>cp</i>	changement de phase
<i>eq</i>	équivalent
<i>ext</i>	frontière extérieure du domaine de calcul
<i>f</i>	froid
<i>fin</i>	état final
<i>fixe</i>	pression fixe
<i>glis</i>	pression glissante
<i>h</i>	milieu homogène
<i>i</i>	maille générique (direction axiale)
<i>in</i>	injection
<i>ini</i>	état initial
<i>int</i>	interface solide-liquide
<i>j</i>	maille générique (direction radiale)
<i>k</i>	numéro d'itération numérique
<i>l</i>	phase liquide
<i>lat</i>	latent
<i>loc</i>	local
<i>m</i>	moyen
<i>MCP</i>	Matériau à Changement de Phase
<i>n</i>	instant temporel générique, ou exposant dans une corrélation entre un nombre de Nusselt et un nombre de Rayleigh
<i>out</i>	sortie
<i>p</i>	paroi
<i>pass</i>	MCP passif
<i>ref</i>	référence
<i>s</i>	phase solide
<i>sat</i>	saturation
<i>sens</i>	sensible
<i>solide</i>	élément solide (épaisseur de tube, ailette, ...)
<i>ss</i>	transition de phase solide-solide
<i>sys</i>	modèle système
<i>t</i>	épaisseur du tube (indice) ; instant temporel générique (exposant)
<i>tint</i>	paroi interne du tube
<i>text</i>	paroi externe du tube
<i>v</i>	phase vapeur

Abréviations

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DSC	<i>Differential Scanning Calorimetry</i>
GDV	Génération Directe de Vapeur
MCP	Matériau à Changement de Phase

Chapitre I. Introduction et contexte

Depuis 1850, la température moyenne de la surface de la Terre a augmenté de 0,6°C environ. Il a été montré que ce réchauffement global était directement lié aux émissions de gaz à effet de serre par les activités humaines : celles-ci augmentent progressivement depuis 1850, et ont aujourd'hui pratiquement doublé depuis 1970. Les scénarios d'évolution du climat futur émis par le GIEC montrent que la température de la Terre va continuer d'augmenter au cours du XXI^{ème} siècle, et que cette augmentation sera déterminée par les émissions de gaz à effet de serre futures. Selon l'amplitude des émissions mondiales dans les décennies à venir, la température pourrait augmenter de 1 à 4°C en moyenne d'ici 2100 [1]. Afin de limiter ce réchauffement fulgurant annoncé, les sociétés humaines devront donc œuvrer à réduire leurs émissions de gaz à effet de serre. Ces émissions étant intrinsèquement liées à l'utilisation des ressources d'énergie fossiles carbonées telles que le charbon et le pétrole, qui sont exploitées partout dans le monde, leur réduction implique de diminuer la consommation de ces ressources.

L'une des grandes voies à explorer pour pouvoir réduire les émissions est l'exploitation de sources d'énergie renouvelables émettant moins, voire pas du tout, de gaz à effet de serre, telles que la biomasse ou l'énergie solaire. Une autre grande voie est celle de la réduction de la consommation globale d'énergie de nos sociétés, autrement dit de la sobriété énergétique. La France se fixe d'ambitieux objectifs de progrès dans ces deux domaines dans les années à venir. A travers la loi du 17 août 2015 relative à la transition énergétique pour la croissance verte [2], l'objectif est donné de porter à 32% la part des énergies renouvelables dans la consommation finale brute, et de réduire de 30% la consommation primaire d'énergies fossiles en 2030 par rapport à 2012. Un objectif de réduction de la consommation totale d'énergie de la France toutes sources confondues, de 20% en 2030 puis de 50% en 2050 par rapport à 2012, est également fixé. En termes de réduction des émissions de gaz à effet de serre, ces objectifs visaient à diviser les émissions de la France par 4 d'ici à 2050. En 2017, à travers le Plan Climat, la volonté plus ambitieuse encore d'atteindre la neutralité carbone en 2050 a été exprimée [3].

Le développement de technologies de stockage d'énergie semble indispensable pour atteindre ces objectifs ambitieux. La fonction fondamentale du stockage d'énergie est de déphaser la production de l'énergie de son utilisation, dans le temps, dans l'espace, ou bien les deux à la fois. La possibilité de stocker l'énergie est un levier technologique qui se montre très utile, voire indispensable pour les deux grandes voies de réduction des émissions de gaz à effet de serre évoquées plus haut.

Le développement à grande échelle des énergies renouvelables est indissociable de celui de technologies de stockage. En effet, la production d'énergie à l'aide d'une ressource renouvelable est soumise aux fluctuations naturelles de sa disponibilité dans le temps : ensoleillement, force du vent, ... Ces facteurs naturels ne pouvant être maîtrisés, la production est par essence intermittente et non prévisible. Cette caractéristique rend plus délicate l'intégration sur le réseau électrique des moyens de production à l'aide de sources renouvelables, par rapport aux moyens classiques fonctionnant à l'aide de ressources fossiles, dont la production est prévisible car dépendante de la quantité de combustible fossile (charbon, matière fissile, ...) consommée par unité de temps. En permettant de stocker l'énergie produite pendant les périodes où la ressource est abondante ou la demande faible, et de la restituer

lorsque sa disponibilité diminue ou que la demande est forte, le stockage permet de contrôler la production, ce qui résout le problème posé par l'intermittence des ressources renouvelables [4].

Dans le domaine de la sobriété énergétique, le stockage d'énergie trouve également plusieurs applications. Les technologies de stockage de chaleur font partie des moyens technologiques permettant la récupération et la valorisation de la chaleur fatale industrielle, c'est-à-dire de la chaleur contenue dans les effluents liquides ou gazeux rejetés par un procédé industriel, qui ne sont pas utilisés ou valorisés par ailleurs. Le stockage de cette chaleur permet d'une part de la réutiliser ailleurs dans le procédé, ou bien de la mettre au service d'un autre procédé industriel ; le procédé qui utilise la chaleur fatale diminue alors sa consommation d'énergie primaire. D'autre part, le stockage permet de restituer de manière continue dans le temps de la chaleur rejetée de manière intermittente, ou bien à l'inverse de restituer massivement sur une courte période de temps de la chaleur rejetée de manière continue, accumulée sur une plus grande période. En d'autres termes, le stockage permet d'adapter la puissance rejetée par la source de chaleur fatale aux besoins du procédé client, ce qui permet également des économies d'énergie en limitant la consommation d'énergie primaire nécessaire pour satisfaire les éventuels pics de consommation du procédé. Enfin, il permet également de valoriser la chaleur fatale de manière décalée dans le temps par rapport à son rejet [5]. En France, environ 30% de l'énergie consommée par l'industrie est perdue sous forme de chaleur fatale [6] ; les économies d'énergie qui seraient permises par la valorisation de cette chaleur sont donc importantes. Le stockage d'énergie permet également de gagner en sobriété énergétique dans d'autres secteurs. A titre d'exemple, plusieurs possibilités d'utilisation du stockage de chaleur sont étudiées pour réduire la consommation des bâtiments. Le stockage de froid intégré dans le bâtiment pourrait permettre de réduire la consommation liée aux besoins en refroidissement pendant l'été. Le stockage de chaleur à des échelles plus larges sur des réseaux de chaleur urbains pourrait permettre de réduire la consommation d'énergie primaire du réseau [4].

1.1. Le stockage d'énergie thermique

Les technologies de stockage d'énergie peuvent être classifiées selon la forme sous laquelle l'énergie est stockée : chimique (batteries, ...), mécanique (volants d'inertie, ...), ou encore thermique. Dans cette dernière catégorie, c'est sous forme de chaleur que de l'énergie est stockée : dans un système de stockage de chaleur, de la chaleur est absorbée par un matériau de stockage, ce qui augmente sa température et modifie éventuellement son état physique ou chimique. La chaleur accumulée peut être restituée plus tard en diminuant (resp. en augmentant) de nouveau la température du matériau, ou en lui faisant subir la transformation physique ou chimique inverse. L'usage d'une solution de stockage thermique est indiqué lorsque l'énergie à stocker prend effectivement la forme de chaleur, par exemple lorsqu'elle est portée par un effluent qui va pouvoir être sujet à un échange de chaleur avec le matériau de stockage. Le stockage thermique n'est cependant pas limité à ce type d'usages, son utilisation étant également envisagée pour le stockage massif d'électricité [7]. Les technologies de stockage thermique sont usuellement classifiées en trois grandes catégories [8].

- 1) Dans les systèmes de *stockage par chaleur sensible*, la chaleur est stockée via la capacité thermique du matériau de stockage : celui-ci voit sa température augmenter lorsqu'il reçoit de la chaleur, et diminuer lorsqu'il en relâche. Lorsque sa pression est constante, l'énergie ΔH stockée est proportionnelle à la masse m du matériau, et augmente avec sa capacité thermique massique c_p , et avec la différence de température $T_{fin} - T_{ini}$:

$$\Delta H = m \int_{T_{ini}}^{T_{fin}} c_p dT \quad (1)$$

Dans ce type de systèmes, le matériau de stockage est souvent sous forme solide ou liquide. Les systèmes avec matériau de stockage solide prennent généralement la forme d'un lit de granulés ou bien d'une matrice solide, au milieu de laquelle circule un fluide caloporteur, qui peut être liquide ou gazeux. Dans le premier cas, le fluide contribue également au stockage de chaleur, car sa capacité thermique n'est pas négligeable devant celle du matériau de stockage.

Les systèmes avec matériau liquide peuvent profiter de la stratification thermique qui se met en place au sein du liquide, du fait des différences de masse volumique liées aux différences de température. Pendant la phase de charge, du liquide chaud est injecté par le haut dans le réservoir de stockage, tandis que du liquide froid est extrait par le bas. Du fait de sa masse volumique plus faible, le volume de liquide chaud se maintient au-dessus du volume froid, ce qui limite le mélange des deux volumes : tant que le mélange et les échanges thermiques par conduction entre les deux volumes restent limités, leur température est maintenue constante, quel que soit la quantité de chaleur stockée. La chaleur peut ainsi être restituée à température constante. Ce type de système est appelé *stockage thermocline*.

Certains de ces systèmes ont pour particularité de ne pas recourir à un matériau de stockage pour stocker la chaleur : le fluide caloporteur chaud est stocké directement, sans qu'il transmette la chaleur à stocker à un matériau intermédiaire ; on parle de *stockage direct*. Par opposition, les systèmes recourant à un matériau de stockage dont la seule fonction est d'accumuler de la chaleur sont appelés systèmes de *stockage indirect*. Certains systèmes de stockage thermocline sont indirects, le réservoir contenant alors un matériau de stockage solide poreux, par exemple un lit de roche, qui stocke une partie de la chaleur du fluide caloporteur. D'autres systèmes indirects avec matériau liquide sont constitués de deux réservoirs, contenant respectivement du liquide chaud et froid. Lors des phases de charge et de décharge, le liquide circule dans un échangeur de chaleur, dans lequel un fluide caloporteur transmet de la chaleur au liquide ou récupère la chaleur qu'il relâche [9].

- 2) Dans les systèmes de *stockage par chaleur latente*, le matériau de stockage subit une transition de phase au cours de l'absorption ou du dégagement de chaleur : la chaleur est stockée via la chaleur latente de changement de phase du matériau. Lorsque le système de stockage est indirect, la transition de phase mise en jeu pour le matériau de stockage est généralement une transition solide – liquide ou solide – solide. Les transitions liquide – vapeur sont peu utilisées en dépit de leurs chaleurs latentes de changement de phase élevées, car le passage de l'état liquide à l'état vapeur est souvent associé à une importante augmentation du volume du matériau, ce qui rend ce type de transition plus difficile à mettre en œuvre dans un réservoir. Les transitions solide – liquide sont aujourd'hui les plus utilisées, du fait de leurs valeurs de chaleur latente de changement de

phase globalement plus élevées que les transitions solide – solide [8]. Dans un système de stockage latent indirect, le matériau de stockage est appelé Matériau à Changement de Phase, ou MCP.

Lors du changement de phase, le matériau de stockage reste à température constante ou quasi constante : une quantité d'énergie importante peut ainsi être stockée pour une faible variation de température. Le stockage par chaleur latente permet ainsi d'atteindre d'importantes densités d'énergie stockée par unité de volume.

Pour un matériau changeant de phase sur un intervalle de température $T_{sol} \leq T \leq T_{liq}$, la quantité d'énergie stockée ΔH est la somme d'une contribution latente, égale au produit de la masse m du matériau et de sa chaleur latente L , et d'une contribution sensible sur l'intervalle $T_{sol} \leq T \leq T_{liq}$, qui s'exprime de la même manière que dans l'équation (1) ci-dessus. En notant c_p la capacité thermique sensible du matériau, on a :

$$\Delta H = m \left(L + \int_{T_{sol}}^{T_{liq}} c_p dT \right) \quad (2)$$

- 3) Dans les systèmes de *stockage thermochimique*, le matériau de stockage est sujet à une réaction chimique endothermique ou exothermique. La réaction chimique en jeu doit être renversable. Lors de l'apport de chaleur au système, la réaction se fait dans le sens endothermique : le matériau absorbe de la chaleur pour subir une transformation chimique. Pour restituer la chaleur, les produits ainsi obtenus sont amenés à une température qui permet l'initiation spontanée de la réaction dans le sens exothermique ; la chaleur dégagée est récupérée, et le matériau de stockage revient à son état chimique initial. La quantité d'énergie stockée par unité de masse est proportionnelle à la différence entre l'enthalpie des produits et des réactifs de la réaction en jeu.

La maturité de ce type de systèmes de stockage est moins avancée à l'heure actuelle. Si le(s) matériau(x) réactif(s) est (sont) solide(s) ou liquide(s), des densités volumiques de stockage élevées peuvent être atteintes du fait de son (leur) faible volume. D'autre part, l'énergie peut en théorie être stockée pendant une durée très importante, car les produits obtenus à l'issue de la réaction dans le sens de la charge peuvent être séparés. Tant que ceux-ci restent stables, ils peuvent être stockés indéfiniment, et être remis en contact quand on le souhaite pour initier la réaction dans le sens de la décharge.

1.2. Le stockage de vapeur

Parmi les fluides caloporteurs utilisés fréquemment dans l'industrie, la vapeur figure parmi les plus répandus, aussi bien pour la production d'énergie que dans d'autres types de procédés industriels. La vapeur présente en effet l'avantage de pouvoir transporter une grande quantité de chaleur par unité de masse, car elle la transporte en grande partie sous forme de chaleur latente, de par sa transition de phase liquide – vapeur. Par ailleurs, les coefficients de transfert thermique d'un fluide caloporteur diphasique avec une paroi étant élevés, cette transition de phase permet d'avoir des échanges de chaleur efficaces au sein du procédé [10].

Le stockage de vapeur est traditionnellement effectué en accumulant la vapeur dans des réservoirs sous pression, dans lesquels un volume d'eau liquide à saturation est en équilibre avec un volume de vapeur saturée. Cette technologie de stockage de vapeur ayant été inventée dans les années 1910, son usage dans l'industrie a été assez répandu pendant le XX^{ème} siècle. La fonction du stockage de vapeur est souvent d'adapter au cours du temps le débit de vapeur fourni à un procédé qui en consomme. Par

exemple, dans l'industrie alimentaire, les procédés de stérilisation ont besoin d'une très importante quantité de vapeur sur une courte période de temps [11]. Un moyen d'assurer cette fourniture de vapeur est de dimensionner la chaudière qui produit la vapeur de manière à ce qu'elle puisse fournir sans problème le débit de vapeur maximal désiré lors des périodes de forte demande. Cette solution contraint la chaudière à fonctionner en sous-régime le reste du temps, ce qui augmente sa consommation d'énergie, voire peut l'amener à dysfonctionner. En utilisant des accumulateurs de vapeur, la chaudière peut être dimensionnée de manière à avoir un point nominal de fonctionnement moins élevé en débit ; la vapeur produite en excès pendant les périodes de creux de la demande est stockée, puis est restituée à partir des accumulateurs lorsque la demande est forte. La chaudière peut ainsi fonctionner au point nominal en toutes circonstances. Parmi les autres secteurs industriels dans lesquels le stockage de vapeur permet de gérer l'écart entre production et demande de vapeur, on peut citer la papeterie [12], et certains procédés de séchage [13].

Lorsqu'un procédé rejette de la chaleur fatale sous forme d'effluents de vapeur, le stockage peut être utilisé pour récupérer cette vapeur et la valoriser par ailleurs. Dans le secteur de la métallurgie, les fours dans lesquels la fonte est transformée en acier rejettent de la vapeur ; celle-ci peut être récupérée par des accumulateurs, pour être utilisée à d'autres étapes du procédé qui consomment de la vapeur, ou bien revendue à d'autres industriels [14], [15]. D'après une étude menée par l'ADEME, 14% du gisement de chaleur fatale valorisable en région Île-de-France se trouve sous forme de vapeur [16] ; il existe ainsi un potentiel pour le développement futur du stockage de vapeur pour la valorisation de chaleur fatale.

Dans le domaine de la production d'énergie renouvelable, le stockage par MCP suscite de l'intérêt pour les centrales solaires thermiques à Génération Directe de Vapeur (GDV). Dans une centrale solaire de ce type, le rayonnement solaire est concentré à l'aide de miroirs sur des tubes dans lesquels circule de l'eau, ce qui permet de l'amener à l'état de vapeur. La vapeur ainsi produite peut aller actionner une turbine pour produire de l'électricité. Comme expliqué au début de ce chapitre, l'intégration d'une solution de stockage thermique est indispensable dans une centrale solaire thermique, afin de gérer l'intermittence de la ressource solaire [17]. Le système de stockage doit être adapté au fluide caloporteur utilisé par la centrale, qui est chauffé à l'aide des rayons solaires concentrés ; pour les centrales GDV, ce fluide caloporteur est de l'eau. Par rapport à l'huile thermique utilisée classiquement comme fluide caloporteur dans les centrales solaires thermiques, la vapeur permet de dépasser la température limite de 400°C au-delà de laquelle les huiles thermiques se dégradent. En outre, la vapeur produite par le champ solaire peut aller directement alimenter la turbine, ce qui simplifie le fonctionnement de la centrale par rapport aux centrales classiques avec huile (dans lesquelles des échangeurs de chaleur sont utilisés pour produire de la vapeur à l'aide de l'huile chauffée), et réduit les coûts de construction et de maintenance [18]. Les centrales solaires GDV sont ainsi un sujet de recherche actif.

1.3. Le stockage thermique par MCP

Comme expliqué en section 1.1, l'une des caractéristiques fondamentales des systèmes de stockage latent est leur capacité à stocker de la chaleur à température constante ou quasi constante. Cela leur permet d'atteindre d'importantes densités volumiques de stockage : l'usage d'un système de stockage latent est donc intéressant pour les applications où la densité de stockage est un critère important. Cette propriété rend également leur usage intéressant pour les fluides caloporteurs comme l'eau, sujets à une transition de phase liquide – vapeur, autrement dit pour l'application au stockage de vapeur.

Un fluide caloporteur qui change de phase se maintient à température constante ou quasi constante pendant l'échange. Le fait de le mettre en regard d'un matériau de stockage latent, qui reste également à température quasi constante, permet de minimiser sa différence de température entre charge et décharge. En effet, si un matériau de stockage sensible est utilisé, la température de saturation de la vapeur doit être supérieure à la température maximale atteinte par le matériau sensible en charge, et inférieure à la température minimale du matériau sensible en décharge : la différence de température de la vapeur entre charge et décharge est ainsi très grande, comme illustré Figure 1-(a). En utilisant un MCP comme matériau de stockage, les températures de saturation de la vapeur en charge et en décharge sont respectivement de quelques °C supérieure et inférieure à la température de changement de phase du MCP, ce qui minimise grandement cette différence de température.

La Figure 1-(b) représente la température du fluide caloporteur liquide – vapeur et du matériau de stockage lors du cycle charge-décharge dans un système de stockage constitué de trois modules disposés en série : un module latent pour l'évaporation ou la condensation de la vapeur, et deux modules sensibles disposés de part et d'autre du module latent, pour le réchauffement ou le refroidissement sensible de l'eau lorsqu'elle est sous forme d'eau liquide ou de vapeur monophasique. Cette figure permet d'observer visuellement la forte diminution de la différence de température entre charge et décharge que permet l'usage d'un module de stockage latent par rapport à un système de stockage entièrement sensible. Ce schéma montre également que, de manière générale, la relation enthalpie – température du matériau de stockage (liée à la capacité thermique pour un matériau sensible, et à la chaleur latente pour un MCP) doit suivre autant que possible celle du fluide caloporteur, afin de limiter cette différence de température. Pour un matériau donné, le choix du débit du fluide caloporteur permet d'assurer cette adéquation, afin d'ajuster son profil de température le long de la conduite de l'échangeur s'il est monophasique, ou bien la longueur de tube sur laquelle s'effectue son changement de phase liquide – vapeur s'il est diphasique.

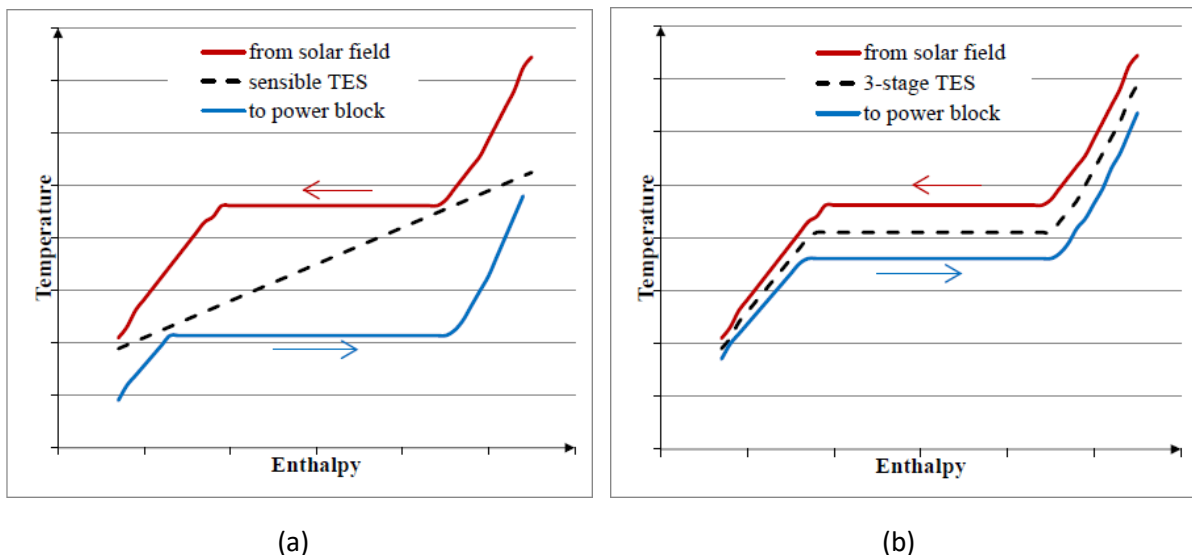


Figure 1 : Diagramme température-enthalpie d'un cycle charge-décharge lorsque le fluide caloporteur est de la vapeur [19]
 Rouge : fluide caloporteur en charge – Bleu : fluide caloporteur en décharge – Noir pointillé : matériau de stockage
 (a) : Matériau sensible uniquement – (b) : Système tri-étagé avec deux modules sensible et un module latent

De nombreux matériaux utilisables en tant que MCP présentent l'inconvénient d'avoir une faible conductivité thermique. Pour le stockage à haute température ($> 200^{\circ}\text{C}$), la plupart des matériaux envisageables sont des sels inorganiques, dont la conductivité est inférieure à $1 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. Cette faible conductivité limite la puissance de la charge ou de la décharge de chaleur. Le défi principal des systèmes de stockage de chaleur par MCP est ainsi d'assurer un échange thermique suffisant entre le fluide caloporteur et le MCP. La technique la plus couramment utilisée consiste à disposer des ailettes faites d'un matériau conducteur (typiquement de l'acier ou du graphite) autour des tubes dans lequel circule le fluide caloporteur ; ces ailettes conduisent la chaleur dans le volume de MCP. Pour un système où le fluide caloporteur circule dans des tubes, les ailettes sont généralement de forme circulaire ou longitudinale [20], et des formes plus complexes peuvent également être envisagées [21].

Le volume de MCP est ainsi parcouru d'un ensemble de tubes et d'ailettes à la forme et à l'arrangement pouvant être complexe. Le rôle des ailettes étant d'améliorer l'échange thermique entre le fluide caloporteur et le MCP, la modélisation d'un module de stockage par MCP requiert de pouvoir quantifier cette amélioration de l'échange thermique ; en d'autres termes, il faut pouvoir prédire la conduction de la chaleur dans le MCP par les ailettes. Au sein du MCP lui-même, plusieurs phénomènes physiques influent sur le transfert de chaleur. Une partie du volume de MCP est occupé par du MCP solide, et une autre partie par du MCP liquide ; un front de fusion ou solidification sépare les volumes solide et liquide. La chaleur se transmet par conduction au sein de ces deux sous-volumes. Au sein du MCP liquide, les différences de température peuvent générer des mouvements de convection naturelle, dus à la variation de la masse volumique du liquide avec la température. Selon la géométrie du système et des ailettes, et leur orientation par rapport à la gravité, ces mouvements de convection naturelle peuvent améliorer le transfert de chaleur par rapport à un transfert conductif pur. C'est en particulier le cas dans les systèmes de grande taille, dans lesquels l'espace occupé par le MCP est suffisant pour permettre le développement d'importants mouvements liquides.

Au CEA Grenoble, l'important impact des mouvements du liquide sur les transferts de chaleur a été mis en évidence sur un module de stockage de taille prototype, dédié au stockage de vapeur [22]. Le MCP utilisé est du nitrate de sodium (NaNO_3) ; le module en contient 6350 kg. Des ailettes circulaires et des inserts conducteurs sont disposés dans le volume de MCP, ayant tous deux pour rôle d'améliorer le transfert thermique. La résistance thermique entre le fluide caloporteur et le MCP a été mesurée expérimentalement en fonction du volume de MCP fondu, et tracée Figure 2. Sur cette figure, les courbes en traits pleins représentent les mesures expérimentales, et la courbe rouge en pointillé a été obtenue à l'aide d'un modèle de simulation du module, qui fait l'hypothèse d'un transfert uniquement conductif dans le MCP. A partir d'un taux de fusion de 30% environ, la résistance thermique prédite par la simulation se maintient proche de la valeur atteinte pour 30%, alors qu'elle diminue expérimentalement : le transfert de chaleur mesuré est plus important que la prédiction du modèle. L'écart relatif entre simulation et expérience est de l'ordre de 30 à 40%. Cela montre qu'une contribution majeure au transfert de chaleur n'est pas prise en compte par le modèle. Dans ce module, les inserts conducteurs ont une géométrie longitudinale, qui permet le développement d'importantes boucles de convection naturelle dans le MCP liquide. Ainsi, il a été supposé que l'important transfert de chaleur constaté était à imputer à ces mouvements de convection.

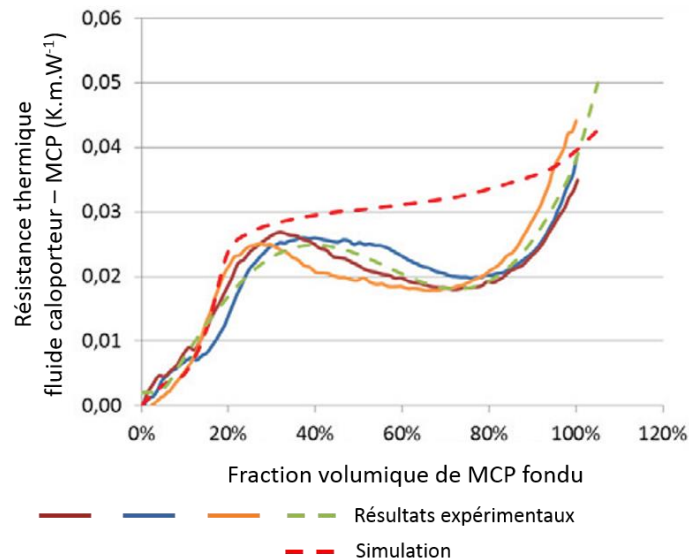


Figure 2 : Résistance thermique entre le fluide caloporteur et le MCP en fonction du volume de MCP fondu, pour un module de stockage par MCP prototype construit au CEA Grenoble [22]

Pour le dimensionnement d'un module de stockage par MCP de taille prototype ou industrielle, il apparaît ainsi nécessaire de prédire à la fois la contribution au transfert de chaleur des ailettes et des éventuels inserts conducteurs, et celle de la convection naturelle du MCP liquide. Dans le contexte du pré-dimensionnement d'un module qui n'a pas encore été construit, on ne dispose pas de données expérimentales auxquelles se référer ; la prédiction de ces effets doit donc passer par des corrélations analytiques ou empiriques, ou bien par la simulation. Pour des ailettes et des inserts à la géométrie complexe, la simulation 2D ou 3D à maille fine des mouvements du liquide et des transferts de chaleur dans les ailettes et inserts apparaît indispensable pour prédire les transferts de chaleur. Le recours à la mécanique des fluides numérique (ou CFD, de l'anglais Computational Fluid Dynamics) pour simuler les problèmes de changement de phase solide – liquide pose plusieurs défis. Un modèle de simulation doit en effet tenir compte de l'absence de mouvements dans la phase solide du MCP, alors que la phase liquide est en écoulement. La présence d'un front de changement de phase, qui sépare les domaines de l'espace occupés par les phases solide et liquide, doit être gérée par le modèle. Enfin, l'incertitude sur les valeurs des propriétés physiques du MCP peut avoir un impact non négligeable sur les résultats de simulation.

Par ailleurs, la nécessité de recourir à des modèles numériques à maille fine pose un problème quant aux ressources informatiques nécessaires pour le calcul transitoire d'une charge ou d'une décharge de chaleur, qui peut durer plusieurs heures. Selon la puissance de calcul dont on dispose, un calcul CFD transitoire sur une telle durée peut prendre plusieurs jours à plusieurs semaines. Ces temps de calcul sont beaucoup trop élevés pour les besoins du dimensionnement, au cours duquel plusieurs dizaines de points de conception peuvent être amenés à être examinés. Le nombre de mailles d'un modèle de simulation doit être relativement faible pour que le calcul transitoire d'une charge ou d'une décharge puisse s'effectuer en un temps raisonnable.

I.4. Objectifs et plan de la thèse

Le stockage de vapeur par MCP est appelé à se développer dans les années qui viennent, au vu des efforts de recherche effectués ces dernières années sur les centrales solaires GDV, ainsi que du potentiel de développement du stockage de vapeur pour la valorisation de chaleur fatale et l'efficacité énergétique dans l'industrie. La technologie de stockage tube-calandre, qui est la technologie de stockage de chaleur par MCP la plus avancée à l'heure actuelle, en est au stade du prototype. A l'heure actuelle, quelques modules de stockage de chaleur par MCP de taille prototype pour le stockage de vapeur ont été construits dans le monde, principalement pour l'application des centrales solaires GDV. Les développements futurs vont amener de nouveaux besoins pour ce qui est de la prédiction des performances de ce type de modules de stockage, d'une part pour les besoins du dimensionnement des modules, et d'autre part pour pouvoir intégrer un modèle d'un stockage de vapeur dans un modèle système plus large d'une centrale solaire GDV ou d'un procédé industriel. Ces deux applications nécessiteront de disposer de modèles à la fois précis, fiables et rapides d'un stockage de vapeur. Or, comme l'ont montré les travaux expérimentaux et numériques précédemment effectués du CEA Grenoble sur un module de stockage prototype [22], la géométrie complexe des ailettes et inserts, et les mouvements de convection naturelle du MCP liquide ont un impact important sur les transferts de chaleur. Prédire de manière fiable les performances d'un module ne semble donc pas être envisageable en dehors d'un modèle CFD à maille fine, bien trop coûteux en ressources de calcul pour le dimensionnement ou la prédiction rapide des performances.

Afin de réduire les temps de calcul sans faire d'hypothèses simplificatrices restrictives, une possibilité est de recourir à une approche de modélisation multi-échelles. L'idée serait d'utiliser un modèle de dimensionnement à maille grossière et à la formulation simple (conduction thermique pure, géométrie simple, ...), dans lequel seraient intégrées des informations lui permettant de tenir compte des effets des ailettes et inserts et des échanges convectifs dans le MCP liquide sur les transferts de chaleur, sans simuler directement ces effets. Dans la littérature, de nombreuses études présentent ou utilisent des modèles à grande maille d'un module de stockage par MCP, qui extraient ces informations de données expérimentales ou de résultats provenant d'autres simulations à maille plus fine. Dans ces modèles, les mouvements du MCP liquide ne sont pas simulés ; le transfert thermique dans le MCP est représenté comme étant purement conductif [21]–[31]. Les effets des ailettes et des inserts et les transferts convectifs dans le liquide sont alors pris en compte en augmentant artificiellement la conductivité thermique du MCP dans le modèle. Un certain nombre d'études utilisent cette technique pour tenir compte uniquement de l'amélioration des transferts de chaleur par les ailettes et les inserts ; les transferts convectifs sont alors négligés [21], [22], [30], [31]. Parmi les études qui ne la négligent pas, la plupart calent la conductivité du MCP sur des données expérimentales [23], [24], [26] ; d'autres se basent sur des résultats provenant d'autres études [25], [29], ou plus rarement sur des résultats de calcul CFD à maille fine [28]. L'augmentation de la conductivité du MCP permet de retrouver par simulation le flux de chaleur échangé avec le fluide caloporteur au cours du temps.

Dans le présent travail de thèse, il est proposé de recourir à un modèle CFD de la fusion ou de la solidification du MCP, simulant à la fois les mouvements du MCP liquide et le changement de phase solide – liquide, pour extraire des informations sur les transferts de chaleur au sein du module. Les transferts thermiques et leur évolution au cours du temps sont a priori dépendants de la géométrie des ailettes et inserts, et de l'amplitude des gradients de température dans le MCP liquide, qui est fonction des conditions de la charge ou de la décharge effectuée (température de l'eau liquide / la vapeur). Ainsi, pour l'étude d'un système avec une géométrie et un MCP donnés, l'approche proposée

consiste à effectuer un faible nombre de calculs CFD judicieusement choisis sur cette géométrie, qui permettront d'extraire des informations sur les transferts de chaleur qui soient valables quelles que soient les conditions de la charge ou de la décharge simulée. L'objectif est qu'une fois ces calculs CFD effectués, le modèle de dimensionnement puisse prédire les transferts thermiques en étant robuste aux conditions aux limites du module (pression, température et débit du fluide caloporteur), sans avoir besoin d'effectuer de calcul CFD supplémentaire ni de modifier les paramètres du modèle.

Dans la littérature, peu d'études mettent en lien un modèle de dimensionnement d'un système de stockage par MCP avec un modèle à maille plus fine. Johnson et al. [21] mettent en place une approche de modélisation multi-échelle similaire à celle du présent travail, mais leur modèle à maille fine ne représente pas les mouvements du MCP liquide : l'approche multi-échelles sert uniquement à représenter les effets des ailettes et inserts dans le modèle de dimensionnement. Mostafavi Tehrani et al. [28] présentent une approche multi-échelles tenant compte de la convection du liquide, pour le cas d'un tube sans ailettes ni inserts (tube nu). Ces auteurs se fondent sur un total de 27 calculs CFD, en faisant varier les dimensions géométriques du système et les propriétés physiques du MCP, pour établir un modèle de dimensionnement qui est robuste à la fois aux conditions aux limites, à la géométrie et au MCP. Bien que la géométrie du tube nu n'ait pas d'intérêt industriel, et que le nombre de calculs CFD effectués soit important, leur étude montre qu'il est possible de construire un modèle de dimensionnement d'un module de stockage qui tienne compte des transferts convectifs dans le MCP liquide, en réduisant des résultats de calcul CFD.

Le déploiement d'une telle approche de modélisation multi-échelles demande d'une part de maîtriser la simulation CFD du changement de phase solide – liquide. D'autre part, un modèle de dimensionnement d'un module de stockage doit être mis en place, ainsi qu'une méthodologie permettant d'extraire des calculs CFD des informations sur les transferts de chaleur transitoire pendant une charge ou une décharge, qui soient utilisables par le modèle système. Pour le présent travail de thèse, la méthodologie multi-échelles a été mise en place sur le cas de la charge de vapeur uniquement, qui met en jeu la fusion du MCP, et la condensation du fluide caloporteur eau liquide / vapeur. Le travail de thèse est ainsi structuré en deux parties, l'une portant sur la simulation de la fusion d'un MCP par CFD, et l'autre sur le modèle de dimensionnement, et la méthodologie permettant de faire le lien entre les deux échelles de simulation.

Le chapitre II de ce manuscrit présente une synthèse bibliographique sur les technologies de stockage de vapeur, la modélisation par CFD des phénomènes de fusion et de solidification, et la simulation 1D des écoulements diphasiques liquide – vapeur dans une conduite. L'étude sur la technologie permet de situer l'intérêt de la technologie étudiée (tubes-calandre) par rapport aux technologies de stockage de vapeur concurrentes. La revue des modèles numériques permet de choisir d'une part un modèle de fusion pour le volet de modélisation CFD, et d'autre part un modèle d'écoulement diphasique qui est utilisé par la suite dans le modèle de dimensionnement.

Dans le chapitre III, le modèle CFD sélectionné est utilisé pour simuler la fusion de MCP dans deux systèmes ayant des caractéristiques différentes, à savoir un cas académique de fusion dans une cavité rectangulaire, et la fusion d'une paraffine dans un système de stockage de chaleur par MCP de taille laboratoire. L'objectif de l'étude est d'étudier la sensibilité des résultats de simulation à plusieurs paramètres du modèle de changement de phase. A l'issue de cette étude, des recommandations sont dégagées sur la marche à suivre pour déterminer les valeurs optimales de ces paramètres, pour l'étude

d'une géométrie donnée ; ces recommandations sont appliquées pour les calculs CFD menés par la suite dans le cadre du modèle multi-échelles.

Le chapitre IV présente le modèle de dimensionnement d'un module de stockage et l'approche de modélisation multi-échelles mise en place. L'approche est testée sur le cas d'un module de stockage de vapeur par MCP de taille prototype, construit au CEA Grenoble. La simulation CFD de la fusion du MCP autour des tubes à ailettes de ce module permet de déterminer une corrélation sur les transferts de chaleur, utilisée dans le modèle de dimensionnement. Les résultats de ce modèle sont comparés à ceux du modèle CFD, afin de s'assurer que la méthode permet bien au modèle de dimensionnement de retrouver les transferts de chaleur transitoires prédits par le modèle CFD, tout en permettant un gain de temps de calcul.

Enfin, dans le chapitre V, le modèle de dimensionnement obtenu à l'issue du chapitre précédent est utilisé pour simuler des essais de charge effectués sur le module prototype, afin de valider l'approche de modélisation sur des résultats expérimentaux. Les évolutions dans le temps des flux de chaleur global et local le long des tubes de fluide caloporteur sont comparées, pour deux essais de charge présentant des caractéristiques différentes. L'écart entre expérience et simulation est quantifié pour ces deux essais. L'analyse de ces résultats permet d'identifier les aspects du transfert de chaleur que le modèle prédit bien ou moins bien, et de dégager des pistes d'amélioration future de la méthodologie de modélisation multi-échelles.

Chapitre II. État de l'art

Ce chapitre présente un état de l'art des technologies de stockage de vapeur et des modèles et méthodes existants pour la modélisation numérique de ces systèmes. La première section s'intéresse aux différentes technologies existantes pour le stockage de vapeur, qu'elles soient matures et éprouvées ou bien au stade du laboratoire ou du prototype, comme c'est le cas des systèmes tubes-calandre par MCP qui font l'objet des travaux de cette thèse. La revue bibliographique permet de mettre en lumière les avantages que présente cette technologie de stockage de vapeur par rapport aux autres, appuyant l'intérêt d'en développer un modèle de dimensionnement et de prédiction des performances. Les deux sections suivantes dressent une revue des modèles et des techniques existants pour la modélisation multi-échelles d'un système de stockage de vapeur tubes-calandre par MCP. La seconde section porte sur les modèles pour la simulation 3D des phénomènes de fusion et de solidification d'un MCP, tenant compte des mouvements de convection naturelle qui ont lieu dans le MCP fondu du fait des gradients de température. Ce type de simulation constitue une échelle de modélisation fine du système de stockage. La troisième section s'intéresse à la modélisation 1D des écoulements diphasiques liquide / vapeur dans une conduite ; le modèle de dimensionnement (échelle système) mis en place dans le cadre de la thèse fait appel à un modèle de ce type, afin de lui permettre de simuler l'écoulement du fluide caloporteur eau liquide / vapeur dans les tubes d'un module de stockage. Ces deux revues bibliographiques permettent de faire le choix d'une approche de modélisation pour chacune des deux échelles.

II.1. Les technologies de stockage de vapeur

Les différentes technologies de stockage de vapeur peuvent être réparties en deux grandes catégories. La première est constituée par la technologie de l'accumulateur de vapeur et par ses variantes. Cette technologie, inventée dans les années 1910, est aujourd'hui à un haut niveau de maturité ; elle est utilisée depuis plusieurs décennies et est considérée dans l'industrie comme une référence pour le stockage de vapeur. La seconde catégorie comprend toutes les technologies fondées sur l'utilisation de MCP. Celles-ci ont un niveau de maturité moins élevé, la plupart étant au stade de l'idée théorique ou du laboratoire ; quelques modules de stockage prototypes et démonstrateurs existent pour la technologie à tubes et calandre. Les technologies de la famille du stockage de vapeur par MCP se positionnent ainsi comme des concurrentes innovantes de la technologie de l'accumulateur. Cette section présente d'une part le concept de base de l'accumulateur de vapeur, et les différents systèmes de stockage mis en place dans l'industrie sur la base de cette technologie, et d'autre part les différents concepts de stockage de vapeur par MCP ayant fait l'objet de travaux de recherche, théoriques comme expérimentaux à travers de tests en laboratoire ou sur des modules de stockage de taille prototype.

II.1.1. L'accumulateur de vapeur

II.1.1.1. Concept de base – L'accumulateur de Ruths

Du fait de la faible masse volumique de la vapeur, la stocker directement dans des réservoirs sous pression n'est pas envisageable pour la plupart des applications industrielles. Le concept de base de l'accumulateur de vapeur est ainsi de stocker la vapeur sous pression en équilibre thermodynamique avec un volume d'eau liquide : la masse volumique bien plus élevée de l'eau liquide permet un volume de réservoir bien moins important que si l'eau était stockée uniquement sous forme gazeuse. La

chaleur latente de condensation de la vapeur, combinée à l'importante capacité thermique de l'eau liquide, bien plus élevée que celle de la vapeur, contribuent à la capacité de stockage [32].

Un accumulateur au repos contient un volume d'eau liquide surplombé par un volume de vapeur saturée (Figure 3). Les deux phases sont sous pression, à une température proche de la température de saturation de l'eau pour la pression en vigueur dans l'accumulateur.

Selon le mode de fonctionnement le plus classique, la charge s'effectue en injectant de la vapeur dans la phase liquide, via un injecteur dédié immergé dans l'eau liquide [33]. La vapeur injectée se condense au contact du liquide ; la chaleur latente qu'elle libère augmente la température du volume d'eau liquide. Cela a pour effet d'augmenter la pression de saturation : un nouvel équilibre thermodynamique se crée dans le réservoir, caractérisé par une pression et une température plus élevées.

La décharge s'effectue en faisant diminuer la pression du système, via une vanne située sur la conduite de sortie. De l'eau liquide va s'évaporer, produisant de la vapeur qui pourra être évacuée et récupérée. La pression de la vapeur obtenue diminue au cours de la décharge, à mesure que l'équilibre thermodynamique dans l'accumulateur se déplace de la pression haute atteinte en fin de charge vers la pression plus basse en sortie ; on parle de décharge en pression glissante.

Lorsqu'un accumulateur de vapeur est utilisé sous cette forme et avec ce mode de fonctionnement, on parle d'accumulateur de Ruths [32], [33], du nom de son inventeur J. Ruths qui a breveté ce système sous cette forme en 1913.

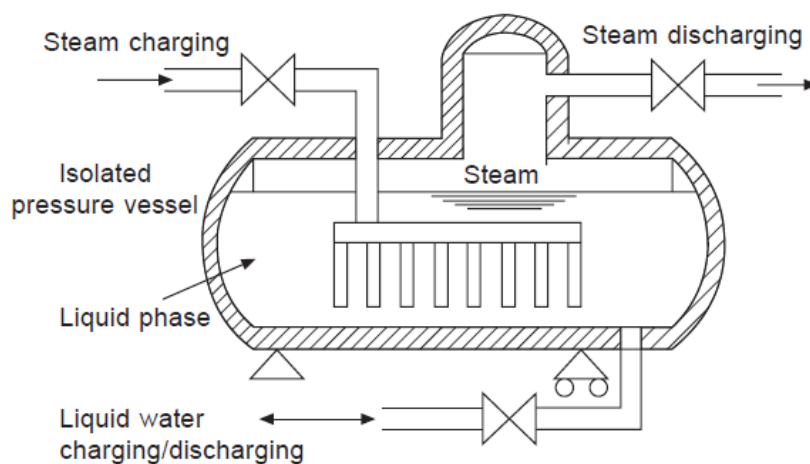


Figure 3 : Schéma d'un accumulateur de Ruths [32]

La quantité de vapeur produite lors d'une décharge, et par voie de conséquence la densité énergétique de stockage de l'accumulateur, dépendent de manière importante de la chute de pression entre le début et la fin de la décharge : plus celle-ci est élevée, plus une quantité élevée d'eau liquide va pouvoir s'évaporer. Pour donner un ordre de grandeur, si l'on considère l'exemple d'un accumulateur chargé à 100 bar et déchargé à une pression de 55 bar, le modèle simple d'accumulateur de Ruths donné par Steinmann et Eck [32] prédit une production de 90 kg de vapeur pour 1m³ de volume d'eau liquide dans l'accumulateur. En termes de densité de stockage d'énergie, cela correspond à environ 36 kWh déchargés pour 1m³ d'eau liquide. D'après Steinmann et Eck, les accumulateurs de Ruths ont une densité de stockage allant généralement de 20 à 30 kWh.m⁻³ (rapporté au volume total de l'accumulateur).

L'accumulateur de Ruths est considéré comme une référence dans l'industrie pour le stockage de vapeur. De nombreux procédés industriels faisant intervenir de la vapeur utilisent des accumulateurs pour déphaser la production et l'utilisation de la vapeur, ou bien pour récupérer et valoriser de la vapeur rejetée par le procédé, normalement perdue. Parmi les applications industrielles utilisant des accumulateurs, on trouve la stérilisation d'aliments [11], des procédés de séchage [13], la métallurgie [14], la papeterie [12], ainsi que les centrales thermiques « classiques » exploitant des ressources fossiles [32]. Des accumulateurs sont utilisés aujourd'hui dans certaines centrales solaires thermiques GDV pour la production d'énergie, à savoir PS-10 et PS-20 (Séville, Espagne ; Figure 4-(a)) [34], [35], et Khi Solar One (Upington, Afrique du Sud ; Figure 4-(b)) [36]. Les accumulateurs de PS-10 atteignent en fin de charge une pression de 40 bar pour une température de 250°C (conditions nominales de la turbine à vapeur). On trouve également des accumulateurs dans des centrales solaires GDV dont la fonction est de fournir de la vapeur à un procédé industriel ; on peut citer l'exemple des procédés de dessalement d'eau de mer [37] ou bien d'un procédé pour l'industrie pharmaceutique présenté par Berger et al. [38].



Figure 4 : (a) : Les 4 accumulateurs de Ruths de la centrale solaire PS-10 (Séville, Espagne) [35]
(b) : Les 19 accumulateurs de Ruths de la centrale Khi Solar One (Upington, Afrique du Sud) [39]

Cette technologie de stockage de vapeur a l'avantage d'être relativement simple techniquement ; elle ne fait pas intervenir de fluide caloporteur ni d'échangeurs de chaleur intermédiaires. Elle présente également l'intérêt notable de permettre des temps de réaction rapides lors de la décharge. Cela fait de l'accumulateur un bon candidat si l'objectif du stockage est de compenser une variation transitoire rapide du débit de vapeur dans le procédé dans lequel il se trouve (on parle de stockage tampon). Dans le cas d'une centrale solaire thermique, de telles variations peuvent être liées à des fluctuations d'ensoleillement de courte durée [34]. En contrepartie, le fait qu'un accumulateur produise de la vapeur dont la pression décroît au cours de la décharge est un inconvénient majeur. En effet, cela n'est pas idéal pour certaines applications (notamment les centrales solaires thermiques GDV) : si la vapeur est utilisée au sein d'un cycle thermodynamique, l'efficacité du cycle décroît lorsque la pression de la vapeur diminue [32], [34]. Par ailleurs, la vapeur produite en décharge est nécessairement saturée ; si le procédé consommateur de vapeur a besoin de vapeur surchauffée, une solution pour surchauffer la vapeur extraite de l'accumulateur doit être installée (des exemples de telles solutions sont donnés dans la section II.1.1.2.2).

Les accumulateurs présentent également l'inconvénient de ne pas être compétitifs économiquement

lorsqu'il s'agit d'installer une importante capacité de stockage [40]. Pour l'application des centrales solaires thermiques, Gonzalez-Roubaud et al. [41] montrent qu'une centrale utilisant du sel fondu comme fluide caloporteur, avec un système de stockage sensible adapté, est plus compétitive qu'une centrale GDV avec des accumulateurs de vapeur, pour une même capacité de stockage. Prieto et al. [42] comparent les performances et les coûts économiques de trois systèmes de stockage différents pour les centrales GDV, utilisant des accumulateurs de vapeur ou bien un système de stockage de vapeur par MCP. Ils montrent qu'une solution avec accumulateurs (seuls ou accompagnés d'un système de stockage sensible) est intéressante lorsque la capacité de stockage installée est inférieure à 3 heures. Pour une capacité plus importante, remplacer les accumulateurs par un système de stockage par MCP augmente la production annuelle de 15%, tout en réduisant de 12% environ le coût total de la centrale. Les auteurs expliquent ce résultat par le fait que le débit de charge des accumulateurs est limité, du fait de contraintes liées à leur intégration dans la centrale. Par ailleurs, un système de stockage par MCP présente l'avantage de permettre une production de vapeur en décharge à des conditions plus proches du fonctionnement nominal de la turbine.

Du fait de ces contraintes techniques et économiques, les capacités de stockage installées sur les centrales GDV actuellement en fonctionnement dans le monde sont relativement faibles. Les quatre accumulateurs de la centrale PS-10 (Figure 4-(a)) ont une capacité totale de 20 MWh, et permettent à la centrale de fonctionner sans ensoleillement pendant 50 minutes à 50% de la capacité nominale de la turbine [35]. La centrale Khi Solar One a une autonomie de 2 heures, permise par 19 accumulateurs (Figure 4-(b)). Sa production nominale étant de 50 MW [39], on peut estimer la capacité de stockage à 100 MWh minimum. A titre de comparaison, d'autres centrales solaires thermiques ayant un système de stockage sensible à base de sels fondus ont une capacité de stockage pouvant dépasser 1000 MWh [43]–[45]. Cela leur permet de produire de l'électricité quelle que soit l'heure de la journée, le stockage seul permettant d'assurer une production pendant la nuit. Le manque de compétitivité économique des accumulateurs de vapeur pour les grandes capacités de stockage est probablement à imputer au coût économique individuel d'un accumulateur. Celui-ci est probablement élevé, du fait des importantes contraintes mécaniques dues à la pression de plusieurs dizaines de bars sous laquelle est stockée la vapeur : une grande épaisseur de paroi est nécessaire. Cette même raison rendrait difficile également la construction d'accumulateurs de grande taille.

II.1.1.2. Intégration et usages dans un système de stockage

Sous sa forme la plus basique, dite de Ruths, un accumulateur est utilisé en charge pour stocker de la vapeur saturée ou surchauffée, et en décharge pour fournir de la vapeur saturée dont la pression décroît au cours de la décharge. Certains procédés ont besoin de vapeur à pression constante au cours du temps ou bien de vapeur surchauffée. Pour de tels procédés, il est tout de même possible d'utiliser des accumulateurs comme solution de stockage de vapeur ; les inconvénients de l'accumulateur de Ruths peuvent être palliés en travaillant sur l'intégration de l'accumulateur (ou des accumulateurs) de vapeur dans le procédé global.

II.1.1.2.1. Fonctionnement avec injection ou extraction d'eau liquide

Steinmann et Eck [32], et Tamme et al. [46] présentent un mode de fonctionnement permettant d'obtenir de la vapeur à pression constante au cours de la décharge. L'idée est de décharger en prélevant non pas de la vapeur mais de l'eau liquide saturée dans le volume d'eau liquide de l'accumulateur. Cette eau liquide sous pression est évaporée à l'extérieur de l'accumulateur, en diminuant sa pression. Dans ce mode de fonctionnement, de l'eau liquide froide est injectée dans l'accumulateur pendant la décharge, afin de maintenir constante la quantité d'eau liquide. Le mélange

de cette eau liquide avec le liquide plus chaud situé près de la surface libre doit être limité, afin de ne pas diminuer la température de saturation de l'eau, et donc sa pression. Dans un autre contexte que celui du stockage de vapeur, la possibilité de décharger l'accumulateur en prélevant de l'eau chaude permet également d'utiliser l'accumulateur comme un dispositif de stockage ou de génération d'eau chaude. Beckmann et Gilli [47], qui présentent ce mode de fonctionnement, indiquent que la charge peut alors s'effectuer en injectant de l'eau chaude, de la vapeur ou bien les deux à la fois.

Un autre mode de fonctionnement, qui implique également l'extraction ou l'injection d'eau liquide dans l'accumulateur, permet d'utiliser l'accumulateur à la fois comme un module de stockage de vapeur et un dispositif de séparation des phases [32], [48]. Ce mode de fonctionnement est adapté à certaines centrales solaires GDV dans lesquelles le champ solaire produit un mélange d'eau liquide et de vapeur. L'accumulateur et la turbine sont disposés en série : le mélange eau / vapeur provenant du champ solaire passe en toutes circonstances par l'accumulateur avant de rejoindre la turbine (Figure 5). Lors de l'injection dans l'accumulateur, l'eau liquide reste à l'intérieur, tandis que la phase vapeur sort et part alimenter la turbine. En parallèle, de l'eau liquide est prélevée dans le bas de l'accumulateur ; elle repart alimenter le champ solaire. La pression dans l'accumulateur reste constante au cours de la charge. La décharge de vapeur s'effectue ici en diminuant la pression, comme pour un accumulateur de Ruths classique. Cette utilisation de l'accumulateur permet d'assurer une fourniture de vapeur saturée à la turbine en combinant les fonctions de stockage et de séparation des phases liquide et vapeur : on réduit ainsi le coût du système.

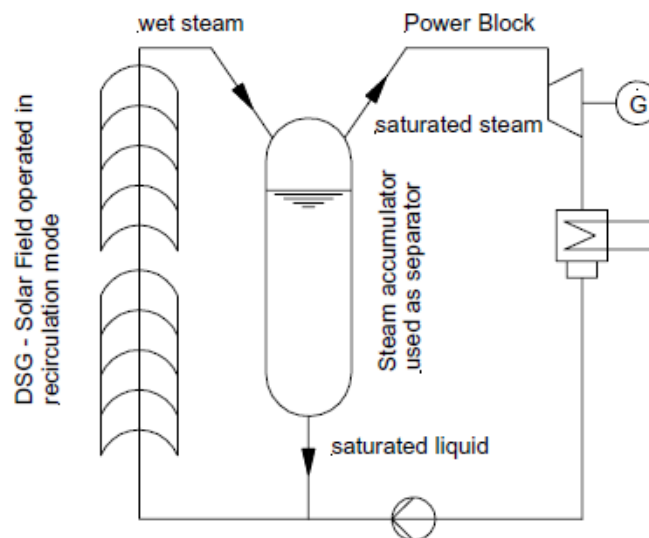


Figure 5 : Schéma d'une centrale solaire GDV avec recirculation dans le champ solaire et les accumulateurs de vapeur [32]

II.1.1.2.2. Production de vapeur surchauffée

Pour les applications nécessitant de la vapeur surchauffée, plusieurs solutions existent. L'une d'entre elles consiste à surchauffer la vapeur saturée produite par l'accumulateur à l'aide d'un dispositif extérieur, par exemple un autre module de stockage thermique dédié à cette fonction. Il s'agit de la solution adoptée par Alsolen 450, un prototype de centrale solaire GDV construite par le CEA à Cadarache (Bouches-du-Rhône, France) [19]. Un accumulateur y est utilisé à la fois comme module de stockage thermique et comme séparateur de phases ; la vapeur saturée qu'il produit lors des phases de décharge est envoyée dans un module de stockage sensible haute température, à base de briques en terre cuite, pour y être surchauffée.

Beckmann et Gilli [47] présentent une variante d'accumulateur permettant de produire directement de la vapeur surchauffée, utilisée entre les années 1930 et 1970 pour propulser des locomotives à vapeur dites « sans carburant », fonctionnant sans brûler de charbon ou de pétrole. Ce type d'accumulateur est chargé à une pression supérieure à la pression nécessaire pour le fonctionnement de la locomotive. Lors de la décharge, une vanne (2) permet de réduire la pression et la température de la vapeur saturée extraite ((1) sur la Figure 6), afin de l'amener à la pression de travail de la locomotive. Les tubes dans lesquels circule la vapeur retournent ensuite à l'intérieur de l'accumulateur (3) ; c'est la vapeur de l'accumulateur, à plus haute pression et température, qui surchauffe la vapeur introduite en se condensant sur les parois des tubes.

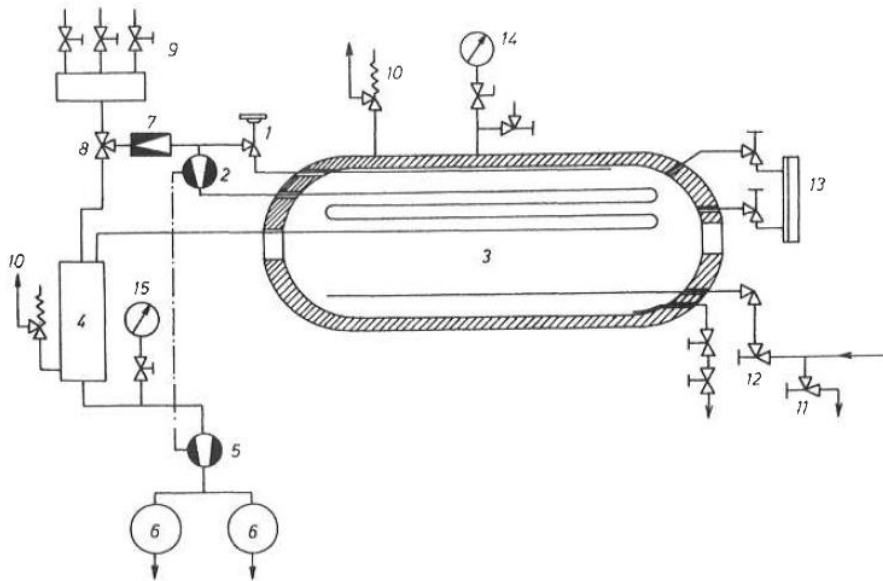


Figure 6 : Schéma de l'accumulateur produisant de la vapeur surchauffée, utilisé pour la locomotive "sans carburant" [47]

Plus récemment, un système dans le même esprit a fait l'objet d'un brevet [49] déposé en 2010 par la société espagnole Abengoa Solar (acteur du secteur solaire qui exploite plusieurs centrales dans le monde). Ce système utilise deux accumulateurs de Ruths, chargés à deux niveaux de pression différents. En décharge, la vapeur issue des deux accumulateurs est dirigée vers un échangeur de chaleur, où la vapeur à plus haute pression (4') sur la Figure 7) surchauffe la vapeur à plus basse pression (flux (4)). La vapeur surchauffée ainsi obtenue (5) peut aller directement alimenter le procédé consommateur de vapeur (une turbine dans le cas d'une centrale solaire thermique, application pour laquelle les auteurs ont développé ce concept). Prieto et al. [42] étudient la possibilité d'utiliser dans une centrale solaire GDV un système de stockage composé de deux groupes d'accumulateurs, pour produire de la vapeur surchauffée selon ce principe.

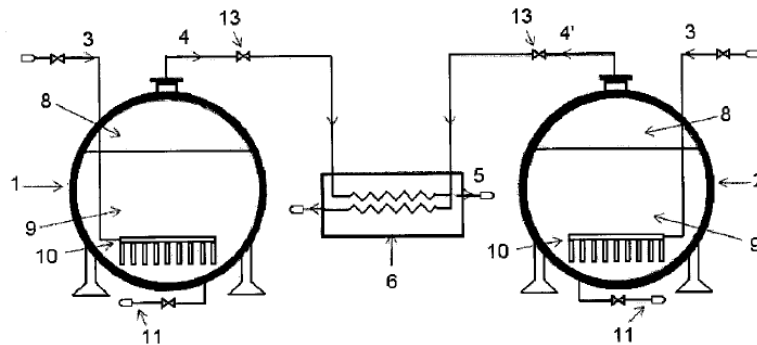


Figure 7 : Schéma du système de stockage à deux accumulateurs breveté par Abengoa Solar [49]

II.1.1.2.3. Variantes pour d'autres applications que le stockage de vapeur

Des accumulateurs de vapeur aux caractéristiques particulières sont utilisés dans le secteur militaire, au sein de systèmes de catapultage présents sur les porte-avions [47], [50]. Ces systèmes permettent aux avions militaires d'acquérir une vitesse suffisante pour décoller depuis la piste d'un porte-avions, trop courte pour que l'avion décolle à l'aide de ses moteurs seuls. De la vapeur à haute pression est utilisée pour propulser à haute vitesse une pièce métallique reliée à l'avion ; cette vapeur est fournie par un accumulateur.

De tels accumulateurs ont pour particularité d'avoir un cycle de charge et de décharge de très courte durée. Il est en effet nécessaire d'expulser une grande quantité de vapeur sur un temps très court afin de permettre à un avion de plusieurs tonnes de décoller. Beckmann et Gilli [47] donnent un ordre de grandeur de 2,5 s pour la décharge de vapeur et indiquent en outre qu'un décollage consomme environ 850 kg de vapeur. Du fait de la grande rapidité des charges et décharges, celles-ci se font hors équilibre thermodynamique [47], [51]. Une autre particularité de ce type d'accumulateurs est que la quantité d'eau liquide peut y être plus basse que dans un accumulateur classique ; dans certains cas, un accumulateur aéronautique peut ne contenir que de la vapeur en début de décharge [47]. Cela est dû au fait que la fonction de ces accumulateurs est moins de stocker de l'énergie que de permettre une libération d'une grande quantité de vapeur en un temps très court ; dans un accumulateur classique, plus focalisé sur la capacité de stockage, le volume d'eau liquide y contribue au premier ordre. Sun et al. [51] indiquent que, lors de la conception d'accumulateurs pour catapultes, le choix du niveau liquide résulte d'un compromis entre la capacité de stockage (et donc de fourniture) de vapeur et le temps de cycle charge / décharge.

Dans certains procédés industriels, des accumulateurs peuvent être utilisés pour stocker de la chaleur non liée à un effluent de vapeur. On intègre alors un échangeur de chaleur dans l'accumulateur, dans lequel circule un fluide caloporteur intermédiaire qui transmet (en charge) ou récupère (en décharge) de la chaleur de l'eau liquide contenue dans l'accumulateur [47]. Le stockage devient alors indirect, l'eau (liquide et vapeur) contenue dans l'accumulateur étant utilisée uniquement comme milieu de stockage de chaleur, et non directement dans le procédé. Steinmann et Eck [32] indiquent qu'il est envisageable d'utiliser des accumulateurs dont la charge de chaleur est effectuée de manière indirecte, dans les procédés solaires où le fluide caloporteur n'est pas de l'eau, par exemple dans les centrales solaires thermiques qui utilisent de l'huile comme fluide caloporteur. En intégrant un échangeur dans le volume d'eau liquide, l'huile chaude provenant du champ solaire peut venir transmettre sa chaleur à l'eau de l'accumulateur. La décharge peut ensuite s'effectuer de manière classique en extrayant de la vapeur, pour alimenter la turbine (Figure 8).

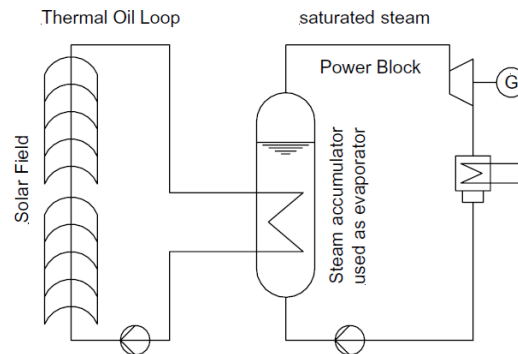


Figure 8 : Schéma d'une centrale solaire avec accumulateur de vapeur utilisé comme module de stockage indirect [32]

II.1.2. Le stockage de vapeur par MCP

L'usage de MCP pour le stockage de vapeur présente plusieurs intérêts. Premièrement, l'idée de stocker l'énergie thermique de la vapeur dans un matériau de stockage thermique (stockage indirect) permet de lever le principal verrou posé par la technologie de l'accumulateur de vapeur, à savoir la capacité de stockage, comme évoqué dans la section précédente. En effet, un MCP peut stocker de la chaleur sans avoir besoin d'être maintenu sous pression, ce qui permet de diminuer l'épaisseur des parois de la calandre du système de stockage par rapport à un accumulateur. Deuxièmement, comme expliqué en introduction, la capacité des MCP à stocker de la chaleur à température constante ou quasi constante est idéale pour les performances d'un système de stockage de vapeur, la vapeur étant également à température constante au cours de son passage dans le module de stockage. En décharge, la vapeur régénérée par un module de stockage par MCP est à une pression et une température inférieures à celles de la vapeur fournie au module en charge ; l'usage d'un matériau de stockage latent permet de limiter cette perte de pression et de température entre charge et décharge.

La plupart des matériaux utilisables en tant que MCP ont pour inconvénient d'avoir une faible conductivité thermique. Pour l'application du solaire thermique, la plupart des matériaux candidats ont une conductivité inférieure à $0,5 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$; cela représente une sérieuse limitation sur la puissance thermique du stockage. Les gradients thermiques au sein du MCP peuvent donner lieu à des mouvements de convection naturelle au sein de la phase liquide du MCP, qui peuvent contribuer à l'échange thermique. Cet effet est cependant peu présent lors de la phase de décharge, du fait de la formation d'une couche de MCP solide sur la surface d'échange, qui s'épaissit à mesure que la décharge progresse. Cette couche solide limite les mouvements de convection naturelle dans le MCP liquide.

Le principal défi pour un système de stockage de chaleur par MCP est ainsi d'assurer un échange thermique suffisant entre le fluide caloporteur (eau / vapeur pour le stockage de vapeur) et le MCP, malgré la faible conductivité du MCP ; la plupart des technologies existantes (sur le papier, en laboratoire ou à l'échelle prototype) ont été imaginées dans ce but. Les différentes technologies envisagées pour le stockage de vapeur sont présentées dans cette section.

II.1.2.1. Systèmes tubes-calandre

II.1.2.1.1. Description du concept

Dans un système de stockage dit tubes-calandre, le MCP est placé dans une calandre traversée par des tubes (schéma Figure 9). Le fluide caloporteur, ici la vapeur, circule dans les tubes et échange de la chaleur avec le MCP à travers la paroi des tubes. Ce système est comparable à un échangeur de chaleur à tubes et calandre classique ; la particularité étant ici que le MCP est fixe dans la calandre,

contrairement à un échangeur classique où les deux fluides échangeant leur chaleur sont en mouvement. Afin d'intensifier l'échange thermique, des ailettes sont quasi systématiquement disposées sur la surface extérieure des tubes au contact du MCP. Le rôle des ailettes est de conduire la chaleur vers le MCP se trouvant dans des zones éloignées des tubes qui mettraient du temps à fondre ou à se solidifier si le tube était nu [20]. Des inserts ou des mousses métalliques sont également parfois disposés dans le MCP, afin d'intensifier le transfert de chaleur en son sein.

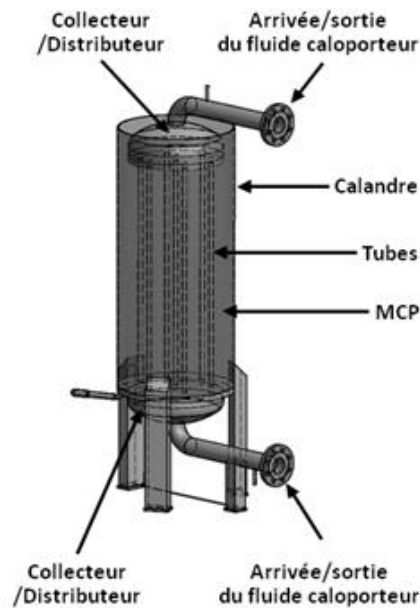


Figure 9 : Dessin d'un système de stockage de chaleur par MCP de type tubes-calandre [52]

Les dimensions des ailettes et inserts et leur disposition dans la calandre influent fortement sur la puissance de l'échange thermique. En effet, le temps nécessaire à la fusion d'un élément de volume de MCP est lié à la distance qui sépare cet élément de volume des différentes parties métalliques (tubes et ailettes); cette distance doit dans l'idéal être la plus faible possible. La géométrie et la disposition des ailettes et inserts doivent ainsi être conçues de manière à ce que l'ensemble du MCP présent dans la calandre soit situé suffisamment proche des parties conductrices pour pouvoir fondre ou se solidifier en un temps voulu. L'étude menée par Bayón et al. [53] illustre bien l'importance de l'occupation du MCP par les ailettes et inserts conducteurs. Ces auteurs ont étudié expérimentalement un module de stockage de vapeur par MCP avec ailettes en graphite, dont une partie du volume du MCP n'est ni traversé par les tubes, ni à portée des ailettes. Ils montrent qu'en décharge, la puissance échangée de leur module est limitée par la présence du volume de MCP loin des ailettes, qui fond moins vite que le MCP situé plus proche des tubes et des ailettes. Il est également difficile de récupérer en décharge la chaleur que ce volume a accumulée pendant la charge : ainsi, ce volume ne contribue quasiment pas au stockage de chaleur, ce qui diminue la densité de stockage du module.

Le matériau dont sont constitués les ailettes et inserts doit avoir une conductivité thermique élevée afin de conduire efficacement la chaleur dans la masse de MCP. Dans la littérature, les deux matériaux d'ailettes les plus couramment cités pour le stockage de vapeur sont le graphite et l'aluminium, dont les conductivités respectives sont de l'ordre de $150 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et $200 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Par ailleurs, le matériau devra être choisi afin de supporter les sollicitations thermo-mécaniques auxquelles il sera soumis lors du fonctionnement du module de stockage. Le choix peut également être orienté par la tenue du matériau à la corrosion au niveau de température auquel le MCP va être amené en fonctionnement.

Ainsi, l'aluminium ne convient pas pour les trop hautes températures car celles-ci le rendent vulnérable à la corrosion [54]. Le graphite, de son côté, est un matériau assez fragile, des ailettes en graphite pouvant s'avérer fragiles.

En termes de densité de stockage, les modules tubes-calandre prototypes construits au CEA Grenoble pour le stockage de vapeur (présentés en section II.1.2.1.2 ci-dessous) permettent en décharge de fournir une énergie d'environ 40 à 50 kWh.m⁻³ (rapporté au volume total du module) pour la génération de vapeur. Ces performances montrent qu'il est possible d'atteindre avec cette technologie des densités de stockage environ 1,25 à 2 fois plus élevées que celles des accumulateurs de vapeur.

II.1.2.1.2. Modules prototypes

Le stockage tubes-calandre est à l'heure actuelle la technologie de stockage de vapeur par MCP la plus largement étudiée et la plus mature. Elle est actuellement au stade du démonstrateur, quelques modules prototypes ayant aujourd'hui été construits et testés dans le monde.

Bayón et al. [53] présente un module horizontal d'un peu plus de 4 m de long, dans lequel passe un faisceau de 5 tubes qui serpentent entre l'avant et l'arrière du module (schéma Figure 10). Des ailettes en graphite sont disposées sur une partie de la longueur du module, au milieu du MCP, au contact des tubes. Le MCP choisi est un mélange eutectique de nitrate de potassium (KNO₃, 54% en masse) et de nitrate de sodium (NaNO₃, 46% en masse) ; sa température de fusion est de 220°C environ. La vapeur fournie en entrée en charge est à 235°C environ et est surchauffée de quelques degrés Celsius, tandis que l'eau liquide saturée fournie pour la décharge est à 195°C environ ; les niveaux de pression correspondants sont de 27 et 14 bar respectivement. Ce module a été installé et testé au Plataforma Solar de Almería (Espagne) par l'organisation de recherche technologique espagnole CIEMAT.

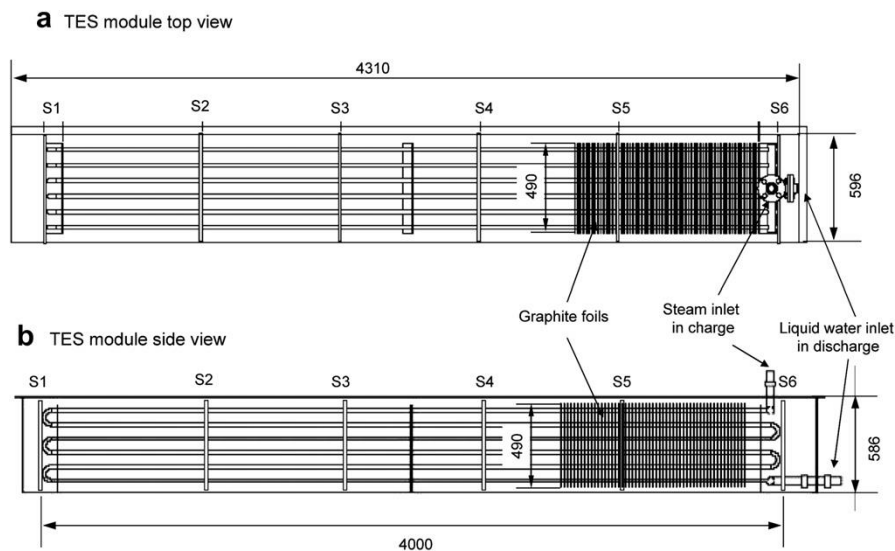


Figure 10 : Schéma du module tube-calandre horizontal construit par le CIEMAT [53]

Laing et al. [40], [52] décrivent un prototype qui a été construit et testé à Carboneras (Espagne) par l'organisation de recherche allemande DLR. Il s'agit d'un module vertical de 7 m de haut pour 1,5 m de côté en moyenne, dans lequel se trouve un faisceau de 152 tubes de 6 m de long, sertis d'ailettes radiales en aluminium (cf. Figure 11). Le MCP utilisé ici est du nitrate de sodium NaNO₃ pur ; le point de fusion est de 306°C. Lors des tests de charge et de décharge présentés dans [52], la température de la vapeur fournie pour la charge est de 320°C environ, et celle de l'eau liquide fournie pour la décharge

est de 295°C environ. Les essais présentés ont été effectués avec une stratégie de conduite dite en *pression glissante* : la pression de la vapeur fournie pour la charge augmente au cours du temps, et celle de la vapeur régénérée en décharge diminue au cours du temps. Cette variation de pression est associée à une variation de la température de saturation du fluide caloporteur : la différence de température entre le fluide caloporteur et le MCP augmente donc avec le temps en charge, et diminue en décharge. Ainsi, ce mode de fonctionnement permet de compenser l'augmentation de la résistance thermique entre le tube et le MCP, que l'on constate au cours d'un essai à mesure que le front de fusion dans le MCP s'éloigne des tubes. La pression du fluide caloporteur eau liquide / vapeur varie de 70 à 115 bar environ en charge, et de 97 à 78 bar en décharge.

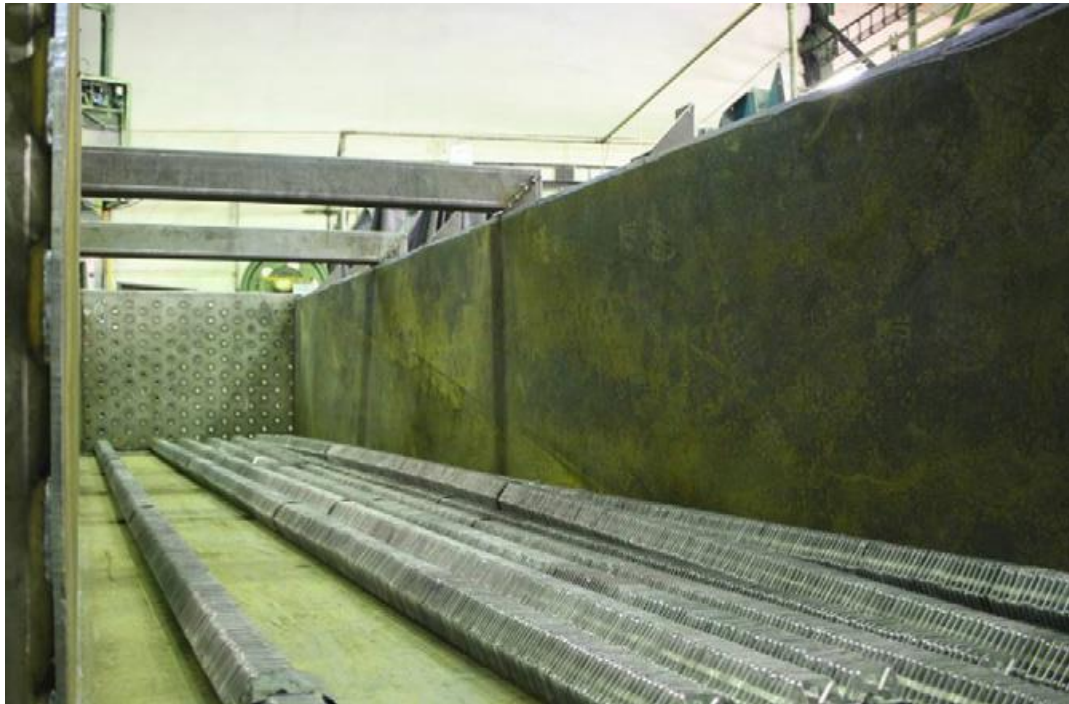


Figure 11 : Le module MCP construit par DLR à Carboneras (Espagne), avant son installation. Sur le sol se trouvent quelques-uns des tubes ailetés [40]

Le module de Laing et al. est intégré au sein d'un système de stockage composé de deux modules de stockage prototypes distincts, le second d'entre eux étant un module de stockage sensible utilisant du béton comme matériau de stockage. La construction de ces deux modules prototypes permet aux auteurs de tester leur fonctionnement au sein d'un type de système de stockage étudié dans la littérature pour le stockage de vapeur, constitué d'un module latent et deux modules sensibles. Dans ce type de système tri-étagé, les températures des matériaux de stockage des deux modules sensibles sont respectivement supérieure et inférieure au point de fusion du MCP du module latent. Les trois modules sont disposés en série.

Lors de la charge de chaleur, la vapeur en entrée du système de stockage est surchauffée ; le module sensible haute température a pour rôle de l'amener à saturation. La vapeur saturée part ensuite dans le module latent, où elle est condensée. Le liquide saturé obtenu passe enfin dans le module sensible basse température, où il est sous-refroidi. Lors de la décharge, le fluide caloporteur parcourt le chemin inverse dans le système. Initialement sous forme d'eau liquide sous-refroidie, il est amené à saturation dans le module sensible basse température, puis évaporé dans le module latent, enfin le module

sensible haute température surchauffe la vapeur obtenue. Il est envisagé d'utiliser les systèmes tri-étagés dans les centrales solaires thermiques GDV, le fluide caloporteur utilisé pour ce type de centrales solaires étant de l'eau que le rayonnement solaire concentré amène à l'état de vapeur surchauffée. Le schéma de principe d'un système tri-étagé intégré dans une centrale GDV est représenté Figure 12.

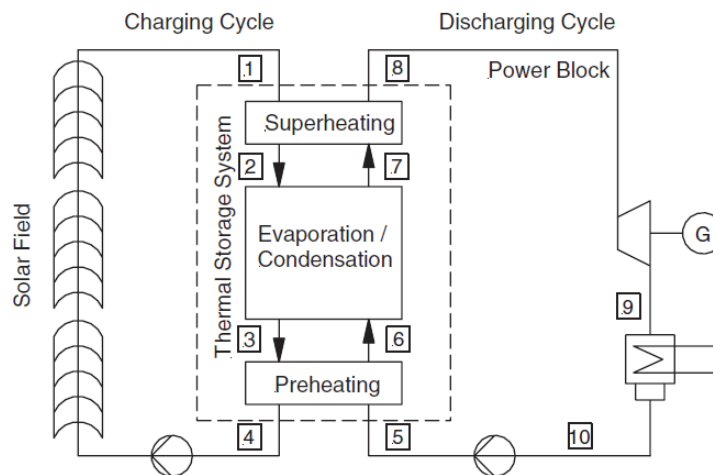


Figure 12 : Schéma de principe d'un système de stockage de vapeur tri-étagé [46]

Certaines études envisagent également l'usage de systèmes à 4 étages [55], ou bien à 1 ou 2 étages [56] pour les centrales solaires GDV ; dans ce second cas, le module latent a alors un fonctionnement et un dimensionnement différent, car il doit assurer à la fois la condensation ou l'ébullition du fluide caloporteur, et l'échange de chaleur sensible avec la vapeur et l'eau liquide monophasiques. Pour d'autres applications que le stockage de vapeur, dans lesquelles le fluide caloporteur est monophasique, des concepts faisant intervenir plusieurs modules de stockage latent disposés en série, avec des MCP dont les points de fusion sont étagés sur une certaine gamme de température, ont été imaginés [17], [57], [58]. Il est également possible de disposer plusieurs modules identiques en parallèle, ce qui permet d'augmenter la capacité de stockage totale, en s'affranchissant des éventuels verrous technologiques inhérents à la construction de modules de très grande taille [16]. En outre, en charge, cela permet de garantir en toutes circonstances dans chaque module un débit de fluide caloporteur proche de leur point de fonctionnement nominal : le nombre de modules en fonctionnement peut en effet être adapté au débit de fluide caloporteur à traiter [17]. En décharge, la quantité de chaleur déchargée peut de la même manière être modulée en fonction des besoins du procédé (débit de vapeur constant ou bien besoin ponctuel important).

Deux modules prototypes ont été construits par le CEA à Grenoble, utilisant également du nitrate de sodium pur comme MCP. Le premier d'entre eux est décrit par Garcia et al. [22] ; il contient 6300 kg de NaNO_3 , au milieu duquel passe un faisceau de 61 tubes. Ceux-ci sont serties d'ailettes circulaires en aluminium et des inserts extrudés en aluminium sont disposés autour des tubes (cf. Figure 13-(a)). Le rayon des ailettes étant faible devant la distance séparant deux tubes, les inserts permettent de conduire la chaleur au-delà de la zone de MCP occupée par les ailettes. La géométrie des inserts a été optimisée afin de ne laisser aucune zone dans le volume de MCP qui soit trop éloignée des parties métalliques, comme expliqué précédemment. Le second module contient un faisceau de 19 tubes pour un peu moins de 2000 kg de NaNO_3 . Les tubes sont munis d'ailettes en acier soudées aux tubes et

disposées selon un motif hélicoïdal ; on parle d'*ailettes segmentées* (cf. Figure 13-(b)). Le modèle multi-échelles d'un stockage de vapeur présenté dans le chapitre IV de ce manuscrit a été testé et validé sur des résultats expérimentaux issus de ce second module.

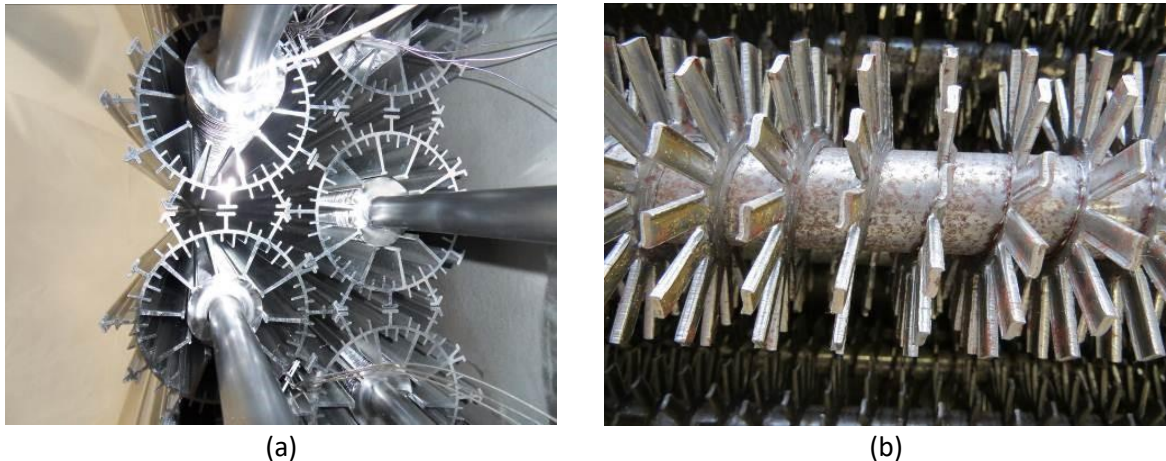


Figure 13 : Photographies des tubes à ailettes et inserts des deux modules tubes-calandre prototypes construits par le CEA à Grenoble

(a) : Tubes à ailettes radiales et inserts du premier module prototype
(b) : Tubes à ailettes segmentées du second module prototype

La centrale solaire de démonstration Alsolen 450 (précédemment évoquée en section II.1.1.2.2), située sur le centre CEA de Cadarache, utilise une version à une échelle supérieure (pré-industrielle) du module avec ailettes radiales et inserts en aluminium construit à Grenoble. Ce module est intégré dans un système comprenant deux autres modules de stockage, respectivement pour le stockage de l'énergie sensible de l'eau sous-refroidie et de la vapeur surchauffée. Garcia et al. [19] présentent des simulations à l'échelle système du système de stockage de la centrale Alsolen 450 ; le module latent y est simulé avec un fonctionnement en pression glissante. La température de la vapeur stockée en charge atteint un maximum d'environ 320°C, tandis que la température de l'eau liquide entrant dans le stockage en décharge atteint un minimum de 290°C environ. Ces niveaux de température se trouvent être tout à fait similaires à ceux décrits par Laing et al. [52] pour le fonctionnement de leur module, l'application envisagée (les centrales solaires GDV), le MCP choisi et la stratégie de conduite étant les mêmes.

Johnson et al. [59], [60] présentent un module installé au sein d'une centrale de cogénération située en Allemagne, dans la région de Sarre, qui produit de la vapeur en brûlant du gaz d'origine minière. La quantité de vapeur produite peut diminuer selon la quantité de méthane présente dans les gaz que l'on brûle ; la fonction du stockage est de compléter la production de vapeur lorsque cela arrive, afin de la maintenir constante. Le MCP utilisé est également du NaNO_3 ; le module en contient environ 32 tonnes. De la vapeur surchauffée est fournie au module en charge, à une température de 350°C et une pression de 25 bar ; la température de saturation de l'eau à cette pression est de 224°C. Au cours de la charge, la vapeur ne se condense pas mais baisse en température uniquement, sans atteindre sa température de saturation : la vapeur surchauffée sortant du module en charge est réutilisée dans le procédé. En décharge, de l'eau liquide à une température de 103°C est fournie : dans le module, elle est successivement amenée à saturation, évaporée, et surchauffée jusqu'à 350°C une fois sous forme vapeur. Ce module est à ce jour le seul module de stockage de vapeur par MCP construit pour une application autre que les centrales solaires thermiques.

Enfin, Willwerth et al. [61] présentent un autre module prototype installé au Plataforma Solar de Almería (Espagne), opérant à une pression plus faible. La vapeur saturée fournie pour la charge a une température maximale de 170°C ; en décharge, l'eau liquide sous-refroidie que l'on fournit au module a une température de 130°C. Le MCP utilisé est un mélange de sels dont le nom commercial est HITEC® ; sa transition de phase s'effectue autour de 140°C. Les auteurs utilisent ce module pour tester la faisabilité d'un stockage de vapeur par MCP pour une centrale solaire GDV de test installée à l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Tunis (Tunisie), générant de la vapeur à une pression plus faible (12,5 bar) que les centrales GDV industrielles.

II.1.2.2. Encapsulation du MCP

Une autre solution pour intensifier les échanges thermiques entre la vapeur et le MCP est d'encapsuler ce dernier, c'est-à-dire de le conditionner sous la forme de multiples conteneurs (capsules) remplis de MCP, qui sont mis au contact du fluide caloporteur. L'échange de chaleur se fait à travers la paroi des conteneurs. L'intérêt est d'augmenter la surface d'échange et de réduire la distance caractéristique du transport de la chaleur au sein du MCP.

Le principal concept de stockage de vapeur faisant intervenir des capsules de MCP a été imaginé pour améliorer un accumulateur de vapeur, afin de produire de la vapeur à pression quasi constante en décharge (problématique présentée en section II.1.1.1). L'idée est de plonger des capsules de MCP dans le volume d'eau liquide d'un accumulateur. Le MCP accumule de la chaleur et fond lors de la phase de charge. En décharge, le MCP se solidifie progressivement, en maintenant sa température autour de son point de fusion : les variations de température à l'intérieur de l'accumulateur sont ainsi limitées. Cela permet d'extraire de la vapeur saturée à température et pression relativement constantes ; la pression de la vapeur est égale en moyenne à la pression de vapeur saturante de l'eau pour la température de fusion du MCP [32], [33], [46], [62]. Steinmann et Tamme [62] présentent des capsules cylindriques de 0,5m de longueur et de 15-25mm de diamètre, ayant été fabriquées pour des tests de ce concept en laboratoire (Figure 14).

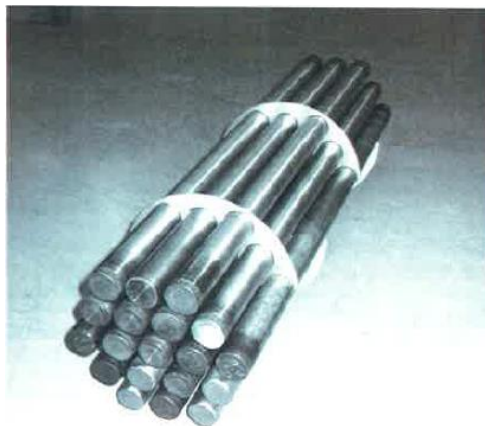


Figure 14 : Capsules cylindriques de MCP à placer dans un accumulateur [62]

Guédez et al. [63] présentent une modélisation d'un autre concept prenant la forme d'un réservoir sous pression dans lequel se trouve un lit de capsules de MCP sphériques. Le fluide caloporteur eau liquide / vapeur circule au milieu des capsules, se condensant à leur contact lors de la phase de charge, et s'évaporant lors de la phase de décharge. L'utilisation d'un lit de capsules sphériques est un concept

assez souvent étudié dans le domaine du stockage de chaleur par MCP [54], mais l'application au stockage de vapeur est rarement envisagée. Weislogel et Chung [64] ont étudié expérimentalement en laboratoire un réservoir de 23 cm de côté contenant des sphères remplies de paraffine, exploité à une pression proche de la pression atmosphérique. L'étude de Guédez et al. est la seule recensée qui envisage l'application du concept de lit de capsules de MCP au stockage de vapeur à haute température et haute pression.

L'un des principaux défis techniques posés par l'encapsulation du MCP provient de l'expansion volumique de celui-ci lors de sa fusion. Il convient de s'assurer que cette expansion n'exerce pas sur la capsule de trop importantes contraintes mécaniques qui pourraient la faire rompre. Deux solutions sont en théorie possibles pour limiter ces contraintes : utiliser des capsules flexibles pouvant s'agrandir lorsque le MCP fond ou bien introduire un volume de gaz dans les capsules afin de laisser au MCP la place de se dilater. Par ailleurs, les MCP utilisés pour les hautes températures rencontrées dans les centrales solaires GDV (sels) étant corrosifs, les capsules doivent également avoir une épaisseur minimale afin de tenir à la corrosion sur une durée suffisante.

II.1.2.3. Matériau composite

Les solutions se fondant sur des matériaux composites partent de l'idée d'améliorer l'échange thermique en jouant sur les propriétés du matériau de stockage, plutôt que sur les conditions de l'échange comme le font les deux solutions présentées précédemment. On utilise ici comme matériau de stockage un composite constitué de MCP et d'un autre matériau conduisant mieux la chaleur. Le matériau composite aura une conductivité thermique plus élevée que le MCP seul. Pour le stockage de vapeur, le graphite est le matériau conducteur le plus couramment adopté. Un composite MCP-graphite peut être fabriqué en dispersant des particules de graphite dans du MCP liquide, en comprimant ensemble les deux composants réduits en poudre [65]–[67] (cf. Figure 15), ou bien en infiltrant de la mousse de graphite avec du MCP, en immergeant à chaud un échantillon de mousse dans du MCP liquide [66].

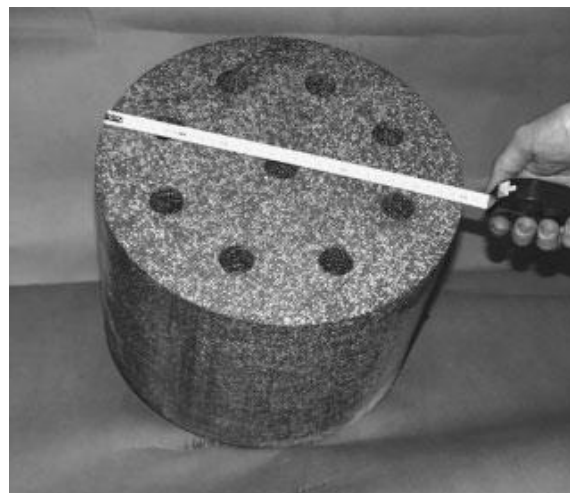


Figure 15 : Bloc de composite MCP / graphite obtenu par compression. Les trous sont aménagés pour faire passer les tubes de vapeur. [62]

La conductivité du matériau composite augmente avec le taux de graphite. D'après Steinmann et Tamme [62], qui présentent le cas des composites constitués de graphite et d'un mélange eutectique de nitrate de sodium (NaNO_3) et de nitrate de potassium (KNO_3), la conductivité est 6 fois plus élevée

que celle du MCP $\text{NaNO}_3\text{-KNO}_3$ seul pour un taux de graphite de 10% en masse, et 40 fois plus élevée pour un taux de 30%. En contrepartie, l'inclusion de graphite dans le MCP diminue la chaleur latente par unité de volume, et donc la densité énergétique du stockage ; en effet, le MCP n'occupe qu'une portion du volume du matériau de stockage. En outre, la conductivité est influencée par la méthode d'élaboration du composite [66]. Enfin, les propriétés du composite peuvent se voir altérées au cours des cycles de fusion et de solidification. Pour du MCP infiltré dans de la mousse de graphite, du MCP peut s'échapper de la matrice de graphite pendant un cycle. Pour un matériau élaboré par compression, selon la température à laquelle la compression est effectuée, la microstructure peut changer après cyclage, affectant négativement la conductivité du composite [67].

II.1.2.4. Fluide caloporteur intermédiaire

Certaines technologies font appel à un second fluide caloporteur qui va servir d'intermédiaire pour le transfert de chaleur entre la vapeur et le MCP. L'idée repose sur le principe du caloduc : le fluide caloporteur intermédiaire va subir un changement de phase liquide / vapeur au cours du transfert de chaleur, qui permet de le mettre en mouvement naturellement. Sous sa forme liquide, le fluide intermédiaire va s'évaporer au contact de la vapeur à condenser en charge, ou bien du MCP chaud en décharge). La diminution de sa masse volumique qui en résulte lui permet de se mouvoir spontanément vers la source froide (le MCP froid en charge, l'eau liquide à évaporer en décharge), où il va céder sa chaleur et se condenser. Il va ensuite revenir vers la source chaude en s'écoulant par gravité ou par capillarité. Le fluide caloporteur intermédiaire doit être choisi de telle sorte que son point d'ébullition soit proche du point de fusion du MCP et de la température de saturation de la vapeur à la pression à laquelle elle se trouve.

Un concept de module de stockage de vapeur fondé sur ce principe est présenté par Adinberg et al. [68] (cf. Figure 16). Il consiste en un réservoir contenant un bloc de MCP en son centre et deux échangeurs de chaleur situés respectivement au-dessus et en-dessous de ce bloc. L'échangeur situé en-dessous est immergé dans le fluide caloporteur intermédiaire, sous sa forme liquide. On fait circuler de la vapeur dans l'échangeur du bas en charge. Celle-ci fait s'évaporer le liquide, qui va aller transmettre sa chaleur au MCP, au milieu duquel des canaux sont aménagés afin de faire circuler le fluide caloporteur sous forme vapeur. La vapeur se condense, avant de retourner dans le volume de liquide situé dans le bas du module. En décharge, la chaleur du MCP fait s'évaporer le fluide caloporteur intermédiaire ; la vapeur transmet sa chaleur à l'eau liquide circulant dans l'échangeur du haut du module, afin de produire de la vapeur.

Le fluide caloporteur intermédiaire adopté par les auteurs pour leur étude numérique est un fluide caloporteur haute température commercial, qui s'évapore sous une pression de 8 à 10 bar dans la gamme de température considérée. Les auteurs envisagent d'appliquer ce concept pour les centrales solaires thermiques, pour produire directement de la vapeur surchauffée : en décharge, on fournirait de l'eau liquide saturée en entrée du système, et l'échange de chaleur se ferait à la fois en chaleur latente (évaporation de l'eau liquide) et sensible (surchauffe de la vapeur).

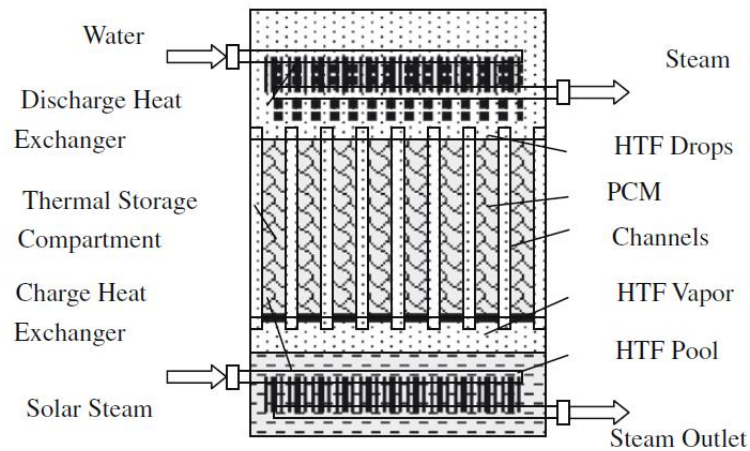


Figure 16 : Schéma du concept de module de stockage avec fluide caloporteur intermédiaire présenté par Adinberg et al. [68]

II.1.2.5. Mise en mouvement du MCP

La dernière classe de concepts de stockage par MCP est fondée sur l'idée de faire se déplacer le MCP au cours de l'échange avec le fluide caloporteur eau liquide / vapeur (stockage actif). Le principal intérêt est que cela permet d'augmenter le coefficient d'échange avec le fluide caloporteur : en effet, si le MCP se comporte comme un fluide que l'on peut pomper, l'échange de chaleur peut se faire par convection forcée, du côté du MCP comme du fluide caloporteur. C'est en décharge que le gain de performances est le plus important car on s'affranchit de l'effet d'augmentation progressive de la résistance thermique entre fluide caloporteur et MCP au cours de la décharge, caractéristique des systèmes passifs. En effet, un système actif empêche la formation d'une couche de MCP solide sur la surface d'échange. Un autre avantage des systèmes actifs est qu'ils permettent le découplage de la capacité de stockage et de la puissance de l'échange thermique, car l'échange de chaleur se fait dans un échangeur distinct. Le réservoir de stockage du MCP et l'échangeur sont ainsi deux modules séparés pouvant être conçus indépendamment ; ce n'est pas le cas dans un système passif, l'échange de chaleur se faisant directement dans le réservoir contenant le MCP.

De nombreux concepts de stockage par MCP impliquant un MCP non statique ont été proposés. Pour le stockage de vapeur, deux contributions principales sont à relever. La première est un système à double vis proposé par Zipf et al. [69]–[71]. Il consiste en une calandre rectangulaire remplie de MCP, dans laquelle se situent deux vis creuses, conçues pour que leurs filetages respectifs soient intriqués l'un dans l'autre (cf. Figure 17). La vapeur circule à l'intérieur des vis (corps et filetage), et à l'intérieur de la paroi de la calandre, creuse elle aussi. La géométrie des vis est pensée pour que, lors de la décharge, leur mouvement racle le MCP solide formé sur la surface d'échange. Le solide est pulvérisé en petits granulés, et acheminé par les vis vers la sortie de l'échangeur. Les auteurs ont testés ce système en laboratoire avec de la vapeur d'une pression maximale de 27,8 bar. Afin d'améliorer la tenue mécanique pour les plus hautes pressions, une variante incluant un fluide caloporteur intermédiaire dans le filetage a également été proposée par les mêmes auteurs [71]. Reprenant le concept décrit dans la section précédente, ce fluide transmettrait la chaleur entre la vapeur et le MCP en connaissant une transition de phase liquide-vapeur.

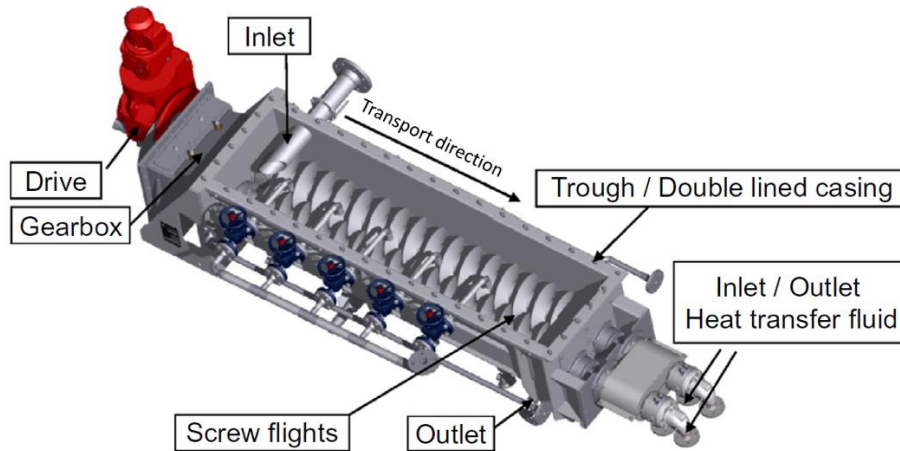


Figure 17 : Echangeur à double vis de Zipf et al. [69]

La seconde contribution est celle de Pointner et al. [72]–[74] qui proposent de faire circuler des conteneurs de MCP devant un échangeur de chaleur. Dans leur système, le MCP se trouve dans des conteneurs parallélépipédiques qui défilent sur une plaque chauffée par de la vapeur ou refroidie par de l'eau liquide, afin que le MCP échange sa chaleur avec celle-ci (schéma Figure 18-(a)). En décharge, une couche de MCP solide se forme dans le fond des conteneurs ; la solidification progresse à mesure que les conteneurs avancent sur la plaque (cf. Figure 18-(b)). Comme les conteneurs dans lesquels le MCP est majoritairement ou totalement solide sont remplacés par des conteneurs de liquide, la puissance de l'échange thermique ne décroît pas au fil du temps. Si la vitesse de transport des conteneurs de MCP est maintenue constante, ce système peut atteindre un fonctionnement en régime permanent, l'épaisseur de solide des conteneurs se trouvant sur la plaque étant constante en moyenne. Un autre avantage de ce système est que la puissance de l'échange peut être réglée en jouant sur la vitesse de déplacement des conteneurs : plus les conteneurs circulent vite, plus la puissance échangée est importante. Une vitesse maximale ne doit cependant pas être dépassée, afin de maximiser l'utilisation de la chaleur latente du MCP : en effet, au-delà d'une certaine vitesse, tout le MCP d'un conteneur n'a pas le temps de changer de phase lors du passage sur la surface de l'échangeur. [74]

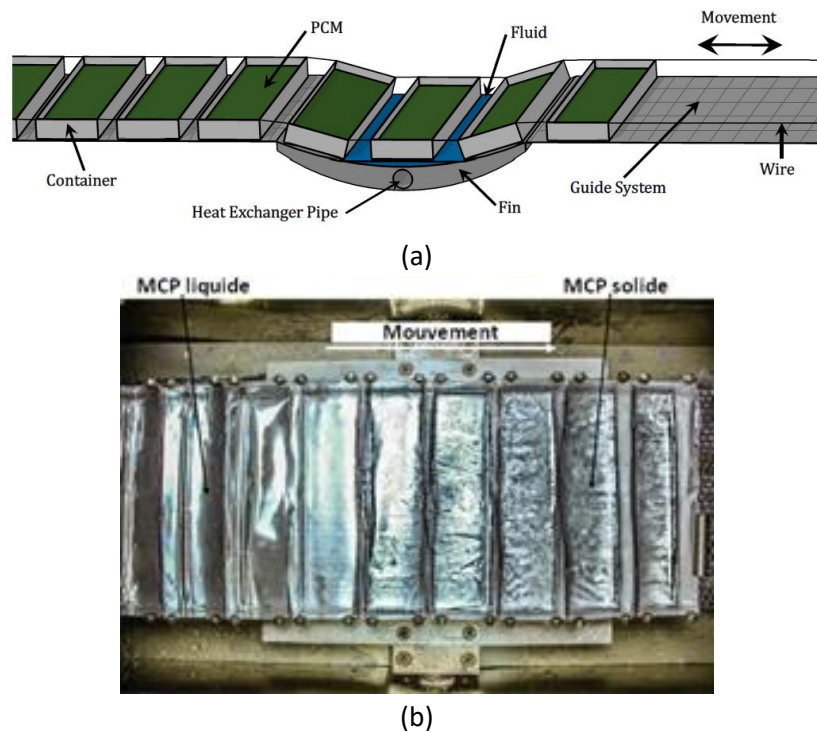


Figure 18 : (a) : Schéma du concept avec conteneurs de MCP en mouvement proposé par Pointner et al. [73]
(b) : Photographie du dispositif expérimental testé en laboratoire par les auteurs (vu du dessus) [74]

II.2. Modélisation 2D /3D du changement de phase solide / liquide

La section précédente a permis de situer la technologie du stockage de vapeur par MCP de type tubes-calandre, étudiée au cours de cette thèse, dans le paysage des différentes technologies existantes et étudiées sur le papier pour le stockage de vapeur. Cette seconde section s'intéresse aux méthodes existantes pour la simulation fine en 2D ou en 3D des problèmes de fusion et de solidification. La revue effectuée permet de choisir une méthode pour l'axe de modélisation fine du présent travail de modélisation multi-échelles.

Les problèmes mathématiques de changement de phase solide / liquide font partie de la catégorie des *problèmes à frontière mobile*. La simulation 2D / 3D fine des phénomènes de fusion et de solidification présente plusieurs défis qui peuvent être liés aux spécificités de ce type de problèmes ou bien aux différents phénomènes physiques en jeu dans le changement de phase, qui nécessitent une modélisation physique et numérique adéquate.

La grande spécificité des problèmes de changement de phase réside dans l'interface qui sépare les phases solide et liquide, dont la position et la forme évoluent au cours du temps. L'évolution de l'interface est régie par les champs de température, de vitesse et de concentration des différentes espèces chimiques présentes (dans le cas où l'on considère les phénomènes de diffusion et de transport d'espèces dans un mélange de plusieurs composants) ; or, ces champs sont eux-mêmes dépendants de la position de l'interface. Mathématiquement, l'interface est vue comme une condition aux limites au niveau de laquelle de l'énergie est absorbée (dans le cas d'une fusion) ou libérée (dans le cas d'une solidification). Il s'agit d'une hypersurface du domaine, c'est-à-dire une courbe en 2D ou une surface en 3D. Le problème inclut donc une condition aux limites mobile dont la position est une

inconnue (d'où le nom de problème à frontière mobile). L'absorption ou la libération de chaleur au niveau de l'interface peut être traduite par une relation dite *condition de Stefan*, qui découle d'un bilan thermique en un point de l'interface. Pour un problème purement conductif, et un changement de phase que l'on suppose s'effectuer à température fixe, cette condition peut s'exprimer de la manière suivante :

$$\lambda_s \vec{\nabla} T_s \cdot \vec{n} - \lambda_l \vec{\nabla} T_l \cdot \vec{n} = \rho L \vec{v}_{int} \cdot \vec{n} \quad (3)$$

Cette relation est valable en tout point de l'interface et régit l'évolution de sa forme et de sa position dans le temps. \vec{v}_{int} désigne la vitesse d'avancée de l'interface et \vec{n} le vecteur normal à l'interface au point considéré. Plusieurs méthodes numériques pour le traitement des problèmes solide / liquide utilisent la condition de Stefan pour déterminer l'évolution de l'interface.

Une seconde spécificité provient de la différence de comportement entre les phases solide et liquide. La phase liquide est un fluide qui est sujet à des mouvements de convection, tandis que la phase solide n'est animée d'aucun mouvement interne. Lors de la fusion d'un domaine solide, des mouvements vont ainsi pouvoir apparaître dans le matériau fondu, généralement sous l'effet des forces de flottabilité induites par les gradients de température au sein du liquide (convection naturelle). Dans le cas d'une solidification, les mouvements du liquide vont se réduire à mesure que celui-ci redevient solide. La prise en compte des comportements différents des deux phases est un défi, aussi bien pour la modélisation mathématique de ce type de problèmes que pour leur traitement numérique. Par ailleurs, dans certaines situations, des blocs de solides individuels, en fusion ou en formation, peuvent se déplacer au milieu de la phase liquide sous l'effet des forces de flottabilité, ou bien être transportés par l'écoulement du liquide. La prise en compte de ce type de phénomènes nécessite l'utilisation de modèles spécifiques qui ne seront pas exposés ici, les différents cas d'étude abordés dans la suite de ce manuscrit ne faisant pas intervenir de mouvements de blocs solides.

Enfin, une autre difficulté réside dans le caractère isotherme ou quasi-isotherme de la transition de phase solide / liquide. Lors de son changement de phase, un MCP va absorber ou libérer une importante quantité de chaleur sur un intervalle de température réduit, voire en restant à température fixe s'il s'agit d'un corps pur ou d'un mélange eutectique. Mathématiquement, dans le cas d'un changement de phase à température fixe, la relation reliant l'enthalpie du MCP à sa température connaît une discontinuité au niveau de cette température ; dans le cas d'un changement de phase sur un intervalle de température, la dérivée de cette relation connaît un pic au niveau de cet intervalle. Un modèle spécifique doit être employé pour traiter cette spécificité du problème.

De nombreuses approches existent dans la littérature pour la modélisation numérique du changement de phase solide / liquide. Deux grandes classes de méthodes sont usuellement distinguées.

- Les *méthodes à interface raide* ont pour idée commune de suivre explicitement la position de l'interface au cours du temps. Le front de fusion y est généralement considéré comme étant infiniment fin. On peut distinguer deux sous-classes de méthodes, selon la technique utilisée pour suivre l'interface :
 - Dans les *méthodes à maillage variable*, le maillage du domaine de calcul est modifié au cours du temps afin de suivre l'évolution de l'interface. À mesure que celle-ci se déplace et change de forme, les nœuds du maillage vont se déplacer, ou bien la structure du maillage peut se voir modifiée.

- Dans les *méthodes à grille fixe*, le maillage n'est pas modifié au cours du calcul. L'interface est suivie en introduisant un second maillage spécifique qui se déforme (*méthodes de suivi d'interface*), ou bien à l'aide d'une fonction « marqueur » advectée par l'écoulement, qui permet de reconstruire la position de l'interface (*méthodes de capture d'interface*).
- Les *méthodes à interface diffuse* intègrent les spécificités du problème de changement de phase (exposées ci-dessus) dans les équations modélisant le MCP, sans intégrer la donnée de la position exacte de l'interface. Celle-ci est déduite des résultats du calcul, a posteriori. L'interface est ici considérée comme une zone diffuse, c'est-à-dire que la transition solide / liquide peut s'effectuer de manière progressive sur plusieurs mailles. Deux sous-classes sont ici aussi à distinguer :
 - Les *méthodes mono-fluide* ou *homogènes* représentent l'ensemble du solide et du liquide comme un unique fluide équivalent homogène, que l'on décrit de manière classique par un jeu d'équations dérivant des équations de Navier-Stokes. Les propriétés physiques de ce fluide équivalent sont choisies afin de prendre en compte la chaleur latente liée au changement de phase, et afin de représenter correctement le comportement de chacune des phases ; il s'agit aussi de bien reproduire le comportement de la fine couche dite *zone pâteuse*, située à l'interface entre les deux phases, dans laquelle solide et liquide cohabitent.
 - Les *méthodes bi-fluide* ou *hors d'équilibre* considèrent un jeu d'équations physiques distinct pour la phase solide et la phase liquide. Les équations comprennent des termes décrivant les transferts entre les deux phases aux interfaces solide / liquide (masse, énergie, quantité de mouvement).

Une revue des méthodes existantes pour ces différentes classes est effectuée dans cette section. Cette revue ne présente pas les méthodes permettant de tenir compte de l'expansion ou de la contraction volumique du MCP lors de son changement de phase. En effet, pour le travail de modélisation mené dans la thèse, il a été choisi de ne pas tenir compte de ce changement de volume, car les méthodes permettant d'en tenir compte ajoutent de la complexité aux modèles, et sont donc plus consommatrices en ressources de calcul que les méthodes n'en tenant pas compte.

II.2.1. Méthodes à interface raide

II.2.1.1. Méthode à maillage variable

Les méthodes à maillage variable reposent sur l'idée de faire évoluer le maillage au cours du temps. Cette idée part du constat que la finesse nécessaire dans l'idéal pour le maillage est plus importante aux environs de l'interface. En effet, l'interface est en règle générale une zone d'épaisseur très faible voire quasi nulle, dans laquelle certaines grandeurs physiques connaissent d'importants gradients (la vitesse notamment). L'objectif est ainsi de maintenir un niveau de raffinement important autour de l'interface, et un maillage plus grossier dans les domaines solide et liquide. On peut distinguer deux grandes catégories de méthodes à maillage variable, selon le type de modifications apportées au maillage.

Les *h-methods* ajustent le niveau de raffinement local du maillage en subdivisant ou en fusionnant les cellules entre elles [75], [76]. A chaque pas de temps du calcul, une cellule du maillage peut être subdivisée en plusieurs cellules (raffinement), ou fusionner avec les cellules voisines (dé-raffinement), selon la valeur locale des gradients des grandeurs d'intérêt du problème (flux de chaleur...). On calcule dans la pratique pour chaque cellule un critère numérique basé sur ces gradients, dont la valeur détermine si la cellule concernée doit être subdivisée, fusionnée avec ses voisines ou bien non

modifiée. La Figure 19 illustre le type de maillage que l'on peut obtenir avec ce type de technique. Mettre en place une *h-method* nécessite un certain travail sur la gestion informatique du maillage, des mailles apparaissant ou disparaissant au cours du temps. En outre, l'algorithme de raffinement dynamique doit faire en sorte d'aboutir à des niveaux de raffinement proches entre cellules voisines, de manière à garantir l'intégrité topologique du maillage. Ces points de vigilance n'empêchent cependant pas le développement de programmes à l'architecture robuste implémentant ce type de méthodes.

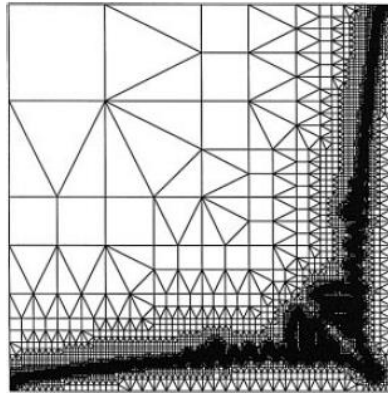


Figure 19 : Exemple de maillage obtenu avec une *h-method*, pour l'étude de la croissance dendritique d'un cristal (coin du cristal en bas à droite) [75]

Les *r-methods* font se déformer le maillage au cours du calcul afin de s'adapter aux déplacements de l'interface. Le nombre de cellules et la topologie du maillage restent fixes pendant le calcul : la finesse nécessaire autour de l'interface est assurée en déplaçant les nœuds du maillage, de manière à maintenir une concentration de nœuds dans la région où l'interface se situe. Plusieurs méthodes existent pour la déformation dynamique d'un maillage. Une première consiste à découper le maillage en deux zones distinctes, l'une pour la phase solide, l'autre pour la phase liquide, et à fixer l'interface sur la ligne d'arêtes marquant la frontière entre ces deux zones. Le maillage est déformé de sorte que cette ligne soit toujours superposée avec l'interface [77], [78]. On applique alors un jeu séparé d'équations physiques aux domaines solide et liquide et l'évolution de la forme et de la position de l'interface est déterminée à l'aide de la condition de Stefan (présentée dans l'introduction de la section II.2). Un inconvénient de cette technique est qu'il semble difficile de l'utiliser pour simuler les situations où l'interface peut apparaître ou disparaître dynamiquement, par exemple lorsque le MCP est initialement entièrement solide ou liquide et qu'une phase de chauffe ou de refroidissement sensible précède le début du changement de phase, ou dans le cas de coalescence et disparition d'interfaces. En effet, l'interface étant liée à un jeu d'arêtes précis du maillage, elle doit toujours être présente dans le domaine.

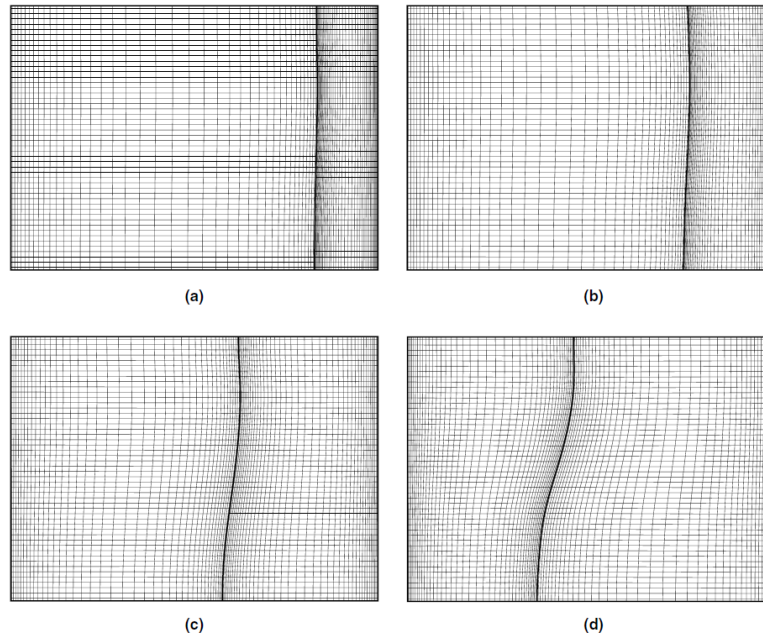


Figure 20 : Déformation du maillage au cours du temps ((a) \rightarrow (b) \rightarrow (c) \rightarrow (d)) avec une *r*-method dans laquelle l'interface est fixée sur une ligne d'arêtes du maillage [78]

Une seconde technique de déformation, qui permet d'écartier cette difficulté, consiste à déformer les cellules du maillage à chaque pas de temps afin d'avoir un maillage fin à l'interface et lâche ailleurs ; les nœuds de la région de l'interface ne sont alors pas nécessairement les mêmes au cours du calcul [79]–[81]. Un algorithme dédié détermine à chaque pas de temps la position des nœuds ; il se base pour cela sur un critère numérique basé sur les gradients des grandeurs d'intérêt du problème en chaque point de l'espace, dans un esprit similaire à celui des *h*-methods. Cette seconde méthode a été appliquée par [79]–[81] à des problèmes dans lesquels les mouvements de la phase liquide étaient négligés (conduction thermique pure), à des géométries 1D [79], [80] et 2D [81].

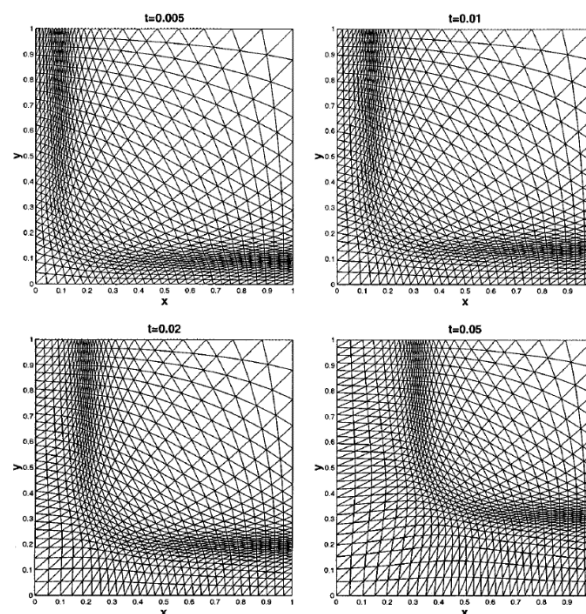


Figure 21 : Déformation du maillage au cours du temps avec une *r*-method sans ligne d'arêtes associée à l'interface [81]

II.2.1.2. Méthodes à grille fixe

On regroupe dans la classe des méthodes à grille fixe l'ensemble des méthodes qui suivent explicitement l'interface en utilisant une technique autre que la modification du maillage. Comme expliqué plus haut, une classification en deux sous-classes distinctes est ici à établir, selon la technique de suivi employée, qui est très différente pour les deux sous-classes.

Les *méthodes de suivi d'interface* introduisent une seconde grille de résolution dédiée au suivi de l'interface, et présente en parallèle de la grille principale sur laquelle sont résolues les équations de la physique [82]–[84]. Cette seconde grille est composée d'un certain nombre de points appelés marqueurs, qui fournissent une description discrétisée de l'interface. Les marqueurs sont déplacés au cours du temps dans le domaine de calcul (délimité par la grille principale), à mesure des mouvements de l'interface. Les deux grilles sont totalement indépendantes l'une de l'autre, les marqueurs ne coïncidant pas forcément avec les nœuds ou les cellules de la grille principale. Selon la méthode, les marqueurs peuvent se déplacer de manière complètement libre dans le domaine de calcul [82], ou bien être définis en fonction de la grille principale ; dans l'exemple fourni par [83], [84], les marqueurs se situent sur des arêtes de la grille principale. Un algorithme dédié fait se déplacer les marqueurs à chaque pas de temps, en se basant sur les grandeurs physiques du problème, calculées sur la grille principale. L'enjeu de la méthode est de représenter correctement l'interface et son déplacement, et de faire en sorte que les informations nécessaires (position de l'interface notamment) soient correctement transmises d'une grille à l'autre. Les méthodes de suivi d'interface ont pour avantage de permettre de décrire la position de l'interface avec une grande précision, sa position étant explicitement suivie par les marqueurs ; cette précision se constate même lorsque le maillage est assez peu raffiné. En contrepartie, ces méthodes sont plus complexes à mettre en œuvre sur le plan informatique, et se montrent consommatrices de ressources de calcul ; les temps de calcul sont souvent plus élevés que pour d'autres types de méthodes [85].

Les *méthodes de capture d'interface* localisent l'interface à l'aide d'une fonction marqueur, introduite comme étant une nouvelle grandeur du problème, calculée dans chaque cellule du maillage à l'instar des autres grandeurs physiques. L'évolution de cette fonction dans le temps et dans l'espace est régie par des équations dédiées, que l'on résout en même temps que les équations de la physique qui constituent le reste des équations constitutives du problème. La fonction marqueur doit être définie de manière à ce que la valeur qu'elle adopte en chaque point du domaine de calcul permette de situer l'interface, et les domaines occupés par les phases solide et liquide. L'écriture des équations régissant l'évolution de la fonction marqueur est un point crucial de ces méthodes, celle-ci devant assurer une description correcte de l'interface. Par rapport aux méthodes de suivi d'interface, les méthodes de capture d'interface sont plus simples à mettre en œuvre. En effet, elles reposent sur la modification des équations de la mécanique des fluides et l'ajout de nouvelles équations au problème. Elles peuvent ainsi être intégrées facilement à un solveur de mécanique des fluides standard. Les différentes méthodes de capture d'interface se distinguent par la fonction marqueur choisie et les techniques de calcul de cette fonction.

- Les méthodes *level-set* utilisent une fonction marqueur dont la valeur locale est égale à la distance à l'interface : la fonction vaut 0 sur l'interface, et prend des valeurs d'autant plus grandes que l'on s'en éloigne [86]–[89]. Ces méthodes considèrent une interface infiniment fine. En notant D la fonction marqueur, son évolution est régie par l'équation d'advection suivante :

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \vec{v}_{int} \cdot \vec{\nabla} D = 0 \quad (4)$$

où \vec{v}_{int} est une vitesse de déplacement locale de l'interface, déterminée à partir de la condition de Stefan. Les cellules traversées par l'interface étant identifiables par les valeurs prises par D , les équations de la physique peuvent être résolues de manière classique dans les cellules situées loin de l'interface, et un traitement numérique spécial tenant compte des effets du changement de phase est appliquée dans les cellules où l'interface se situe.

- Plusieurs méthodes de capture d'interface sont fondées sur l'approche Volume of Fluid, qui est un modèle classiquement utilisé pour simuler les écoulements conjoints de plusieurs fluides non miscibles (par exemple les cas d'écoulements à surface libre), et qui permet de simuler l'évolution de l'interface entre ces fluides. La fonction marqueur vaut alors 0 dans la phase solide, 1 dans la phase liquide, et prend des valeurs entre 0 et 1 dans les cellules traversées par l'interface, qui est là aussi considérée comme infiniment fine. Cette fonction marqueur est régie par une équation d'advection similaire à (4), et des schémas de résolution numérique spécifiques sont utilisés afin de limiter la diffusion de l'interface sur plusieurs mailles. López et al. [90] présentent une méthode basée sur l'approche Volume of Fluid, pour des problèmes conductifs purs (pas de mouvements de la phase liquide). Leur méthode est relativement similaire aux méthodes *level-set*, la gestion des cellules traversées par l'interface faisant également intervenir une distance du centre de la cellule à l'interface. Karagadde et al. [91] présentent une méthode plus évoluée, qui permet de tenir compte des mouvements liquides et de simuler le déplacement de noyaux solides en formation dans la phase liquide en écoulement.
- Les méthodes de *champ de phase* [86], [92] sont issues de théories décrivant les transitions de phase solide / liquide d'un point de vue fondamental. Ces méthodes-ci considèrent que l'interface a une épaisseur non nulle, ce qui les rend plus naturellement adaptées que les méthodes précédentes aux MCP changeant de phase sur un intervalle de température. La fonction marqueur vaut ici 1 dans l'une des phases, -1 dans l'autre phase, et prend des valeurs entre -1 et 1 dans l'épaisseur de l'interface. L'équation régissant la fonction marqueur fait intervenir une fonction potentiel, qui est minimale pour $p = \pm 1$; plusieurs choix sont possibles pour cette fonction [92].

II.2.2. Méthodes à interface diffuse

II.2.2.1. Méthodes bi-fluide

Les méthodes bi-fluide [93]–[95] modélisent le MCP à l'aide d'un jeu d'équations physiques distinct (masse, quantité de mouvement, énergie, concentration des espèces dans le cas où le MCP n'est pas un corps pur) pour chacune des deux phases solide et liquide. Ces équations ont la forme des équations de Navier-Stokes classiques, auxquelles s'ajoutent des termes décrivant les transferts de masse, de quantité de mouvement, d'énergie et d'espèces entre les deux phases. S'agissant de méthodes à interface diffuse, ces méthodes ne se préoccupent pas dans leur construction de localiser précisément l'interface. Sa position est déduite des champs de fraction massique des deux phases, qui font partie des inconnues du problème.

Les équations physiques des deux phases sont des équations macroscopiques obtenues via une technique de moyenne : on intègre les équations de Navier-Stokes classiques (exactes localement, dans chacune des phases) sur un volume représentatif. Ce volume est de petite taille par rapport au domaine de calcul, mais de grande taille par rapport aux dimensions caractéristiques du problème à l'échelle microscopique, telles que la taille des dendrites dans une zone pâteuse, ou bien des cristaux solides. Les inconnues du problème physique (c'est-à-dire avant la discrétisation du problème pour sa résolution numérique) sont ainsi des valeurs moyennes résultant d'une intégration sur un volume représentatif centré autour du point du domaine de calcul considéré. Les termes de transfert entre phases présents dans les équations rendent compte des phénomènes ayant lieu à l'échelle microscopique, à l'interface entre les phases : forces mécaniques au niveau de l'interface, transferts de masse par diffusion et convection, effets liés au changement de phase, etc. Ces termes de transfert peuvent également faire intervenir des termes représentant la fluctuation des différentes grandeurs du problème par rapport à leur valeur moyenne sur les volumes représentatifs. Un récapitulatif de l'ensemble des équations et relations, macroscopiques et microscopiques, à considérer dans le problème peut être trouvé dans [93].

La description correcte des interactions entre phases est un point crucial, mais délicat, de ce type de méthodes. En effet, les phénomènes se produisant à l'interface sont fortement liés à des facteurs microscopiques, tels que la forme de l'interface ou la structure des deux phases en présence, qui peuvent être difficiles à représenter simplement et avec précision [93]. À titre d'exemple, les forces mécaniques exercées par une phase sur l'autre requièrent une modélisation différente pour le cas où la phase liquide s'écoule dans une matrice poreuse de solide, ou pour le cas de granulés solides autour desquels la phase liquide s'écoule. Du côté de l'équation de l'énergie, les transferts thermiques à l'interface sont influencés par les mouvements de la phase liquide, qui sont eux-mêmes fortement dépendants de nombreux facteurs : la microstructure du solide, la forme et la vitesse des interfaces, les transferts locaux de chaleur et de matière... Les formulations des termes d'interactions entre phases impliquent ainsi un grand nombre d'hypothèses et peuvent faire intervenir des relations empiriques.

II.2.2.2. Méthodes mono-fluide

Les méthodes mono-fluide représentent le MCP comme un unique fluide équivalent, que l'on décrit à l'aide d'un unique jeu d'équations de Navier-Stokes (continuité, quantité de mouvement, énergie, espèces), à la manière d'un fluide monophasique classique. Ces méthodes peuvent ainsi être intégrées sans difficultés dans un code CFD classique ; de nombreux codes CFD commerciaux implémentent une méthode mono-fluide pour permettre la simulation des problèmes de changement de phase solide / liquide. De plus, ces méthodes sont applicables aussi bien aux changements de phase ayant lieu à

température fixe que sur une plage de température, et les résultats obtenus sont généralement bons ; elles sont ainsi très utilisées.

Le jeu d'équations unique du problème décrit aussi bien la phase liquide que la phase solide, ainsi que la zone située à l'interface entre les deux phases, dans laquelle solide et liquide sont tous deux présents. Dans la suite de ce chapitre et dans les chapitres suivants, cette zone est appelée *zone pâteuse*. A noter que cette dénomination est spécifique au contexte de la modélisation numérique du changement de phase solide-liquide, et ne présume pas de l'aspect réel de la zone située à l'interface entre les phases solide et liquide du MCP. Pour un MCP réel, cette zone n'a pas forcément un aspect pâteux ; son aspect dépend de la composition du MCP (corps pur, eutectique, mélange...).

Les deux principaux défis des méthodes mono-fluides sont de tenir compte des deux principales spécificités des problèmes de changement de phase solide-liquide, évoqués en introduction de la section II.2, à savoir l'absence de mouvements dans la phase solide et l'absorption ou la libération de chaleur de manière isotherme ou quasi-isotherme au niveau de l'interface. Dans la construction du modèle, le traitement de ces deux aspects peut être découplé. En effet, l'annulation de la vitesse dans la phase solide implique un travail qui ne concerne que les aspects fluidiques du problème (la vitesse et l'équation de quantité de mouvement), qui n'a pas d'impact sur les aspects énergétiques. Le choix des techniques pour annuler la vitesse dans le solide et pour représenter le caractère isotherme ou quasi-isotherme du changement de phase peuvent donc se faire indépendamment l'une de l'autre. Dans la suite de cette section, les différentes techniques pour traiter ces deux spécificités du problème seront ainsi présentées séparément.

II.2.2.2.1. *Modèle fluide – Annulation de la vitesse dans le solide*

Décrire un domaine constitué d'une phase solide et d'une phase liquide par un unique jeu d'équations valable en tout point nécessite de faire en sorte que les mouvements fluides soient permis dans la phase liquide et annulés dans la phase solide. Il faut ainsi adapter les équations physiques décrivant le mouvement (masse et quantité de mouvement) ou bien le solveur, afin que la vitesse calculée dans la phase solide soit nulle. Trois méthodes existent pour annuler la vitesse dans le solide.

La première, dite *méthode switch-off*, est peut-être la plus simple dans son concept : après le calcul du champ de vitesse par le solveur à chaque pas de temps, on impose simplement la vitesse comme étant nulle dans chaque cellule du maillage occupée par la phase solide. Les cellules situées au niveau de l'interface pouvant contenir à la fois du solide ou du liquide, il faut définir dans quelles cellules effectuer cette annulation de la vitesse. Ma et Zhang [96] proposent d'annuler la vitesse pour les nœuds où la température T est inférieure à la température de changement de phase T_{cp} . Voller et al. [97] proposent d'utiliser la part de l'enthalpie locale liée à la chaleur latente : si on note $h_{lat,loc}$ cette enthalpie latente locale et L la chaleur latente du MCP, on a $h_{lat,loc} = 0$ dans la phase solide, $h_{lat,loc} = L$ dans la phase liquide, et $0 < h_{lat,loc} < L$ dans la zone pâteuse. En se donnant une certaine valeur limite $h_{lat,loc,0}$, on annule la vitesse dans les cellules dans lesquelles $h_{lat,loc} \leq h_{lat,loc,0}$.

Ces méthodes présentent l'inconvénient de générer une discontinuité de la vitesse dans le domaine : la vitesse passe brutalement à une valeur nulle au niveau du front de fusion. Cela peut causer des instabilités numériques voire faire diverger le calcul [96]. Afin de pallier ce problème, des versions modifiées dites *ramped switch-off* permettent d'annuler la vitesse de manière progressive. Ma et Zhang [96] introduisent une plage de température $[T_{cp} - \Delta T ; T_{cp} + \Delta T]$ autour de la température de

changement de phase, sur laquelle la vitesse se voit réduite de manière continue : étant à sa valeur « naturelle » à $T = T_{cp} + \Delta T$, elle décroît progressivement pour être finalement complètement annulée à $T = T_{cp} - \Delta T$.

La seconde méthode, dite de *viscosité variable*, consiste à augmenter artificiellement, dans la zone pâteuse et dans la phase solide, la viscosité du fluide équivalent par lequel le mélange solide / liquide est modélisé. Si l'on donne à la viscosité des valeurs suffisamment grandes, la vitesse va s'annuler progressivement dans la zone pâteuse et devenir négligeable dans la phase solide. Cette méthode a été introduite par Gartling [98], qui propose de faire de la viscosité une fonction de la température, de sorte que celle-ci soit égale à la viscosité du MCP en phase liquide lorsque la température est suffisamment élevée et qu'elle prenne une valeur très grande lorsqu'elle est suffisamment faible (dans la phase solide). Voller et al. [97] proposent là aussi une approche basée sur l'enthalpie latente locale h_{lat} dans chaque cellule. En prenant une constante arbitraire B de valeur élevée, ces auteurs proposent la formule suivante pour la viscosité dynamique μ :

$$\mu = \mu_l + B(L - h_{lat,loc}) \quad (5)$$

où μ_l est la viscosité dynamique de la phase liquide du MCP. L'approche de Voller et al. a pour avantage d'être plus appropriée pour les cas où la transition de phase s'effectue à une température fixe. En effet, si la viscosité est prise dépendante de la température, un changement de phase à température fixe correspondrait à une fonction $\mu = f(T)$ discontinue au niveau de cette température, ce qui n'est pas idéal pour la résolution numérique du problème. Pour permettre à la fonction $\mu = f(T)$ d'être continue, la transition de $\mu = \mu_l$ dans le liquide vers une valeur très grande dans le solide devrait ainsi être effectuée sur un intervalle de température. L'approche fondée sur l'enthalpie latente locale permet à la température d'être égale à la température de changement de phase dans les mailles où s'effectue la transition entre les deux valeurs extrêmes (liquide et « solide ») de la viscosité, tout en permettant une transition progressive de la valeur de μ des mailles de liquide vers les mailles de solide, ce qui permet au problème d'être résolu numériquement.

La troisième méthode est parfois appelée *méthode du terme source de Darcy*, et a été introduite par Voller et Prakash [99]. L'idée ici est d'ajouter un terme puits à l'équation de quantité de mouvement qui va prendre des grandes valeurs dans la zone pâteuse et dans la phase solide. De la même manière qu'en augmentant la viscosité, on contraint ainsi la vitesse à être fortement réduite dans la zone pâteuse et à être quasi nulle dans le solide. Le terme puits est proportionnel à la vitesse. L'équation de quantité de mouvement s'écrit ainsi de cette manière :

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right) = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu \nabla \vec{v}) + \rho \beta (T - T_{ref}) \vec{g} + A \vec{v} \quad (6)$$

Le facteur A doit être choisi de manière à être nul dans la phase liquide et augmenter progressivement dans la zone pâteuse pour finalement devenir très grand dans la phase solide. De cette manière, le terme puits $-A \vec{v}$ disparaît dans la phase liquide, laissant les mouvements fluides s'effectuer normalement. Les mouvements sont freinés progressivement dans la zone pâteuse, pour devenir négligeables lorsque le MCP est totalement solide. Pour que cela se fasse correctement, la valeur que prend A dans la phase solide doit être suffisamment grande.

A priori, A peut prendre la forme de n'importe quelle fonction croissante de la phase liquide vers la phase solide, du moment que les valeurs prises dans chacune des phases sont adéquates. Voller et Prakash proposent de choisir la forme de A à partir de considérations physiques sur la zone pâteuse. Dans un certain nombre de situations couramment étudiées, notamment celles que l'on rencontre dans un système de stockage thermique tubes-calandre, le MCP en fusion ou en solidification prend la forme d'un bloc chauffé ou refroidi à l'une de ses frontières. Un front de changement de phase se propage alors dans le MCP, séparant les domaines occupés par le solide et le liquide. A l'échelle microscopique, des dendrites de solide sont présentes au niveau du front de fusion, entre lesquelles la phase liquide peut s'écouler (Figure 22). L'idée de Voller et Prakash est ainsi de considérer la zone pâteuse comme un milieu poreux, et ainsi d'appliquer à l'écoulement de liquide dans la zone pâteuse des résultats issus de l'étude des milieux poreux. Les auteurs invoquent l'équation de Carman-Kozeny, qui relie le gradient de pression dans un milieu poreux à la porosité f :

$$\vec{\nabla}P = -C \frac{(1-f)^2}{f^3} \vec{v} \quad (7)$$

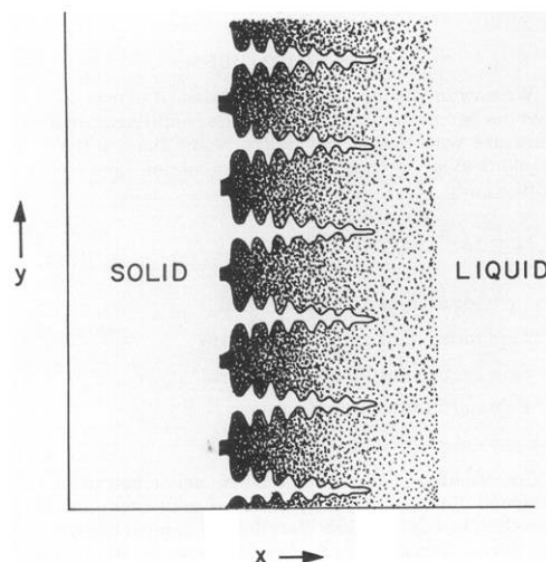


Figure 22 : Illustration schématique de la structure poreuse d'une zone pâteuse, dans le cas où un front de changement de phase se propage dans le MCP [100]

Le facteur C est une constante qui rend compte de la morphologie du milieu poreux. Partant de cette équation, on assimile localement dans la zone pâteuse la fraction liquide locale Y_l à une porosité, et on fait en sorte que l'équation de quantité de mouvement devienne similaire à l'équation de Carman-Kozeny dans la zone pâteuse, à mesure que l'on se rapproche de la phase solide. On peut alors adopter la forme suivante pour le facteur A du terme puits :

$$A = -A_{mush} \frac{(1-Y_l)^2}{Y_l^3 + b} \quad (8)$$

Y_l est une fraction liquide massique, définie comme étant le ratio de l'enthalpie latente locale $h_{lat,loc}$ sur la chaleur latente de changement de phase du MCP :

$$Y_l = \frac{h_{lat,loc}}{L} \quad (9)$$

Y_l est usuellement exprimé à l'aide de la température ; dans le cas d'un changement de phase sur un intervalle de température, Y_l est le plus souvent supposé évoluer linéairement de 0 à 1 avec la température, entre les températures de solidus et de liquidus (cf. équation (15), p. 44).

Le terme b est une constante numérique prenant une valeur faible, usuellement prise égale à $b = 10^{-3}$, introduite afin d'éviter la division par 0 lorsque $Y_l = 0$ (phase solide). La constante de proportionnalité, notée A_{mush} , est appelée *constante de zone pâteuse* (ou parfois *constante de mushy zone*, anglicisme d'après le terme « *mushy zone constant* »). Sa valeur doit être grande afin d'annuler la vitesse dans le solide ; dans la littérature, les valeurs adoptées vont de 10^3 à 10^{11} kg.m⁻³.s⁻¹. Selon le cas d'étude, la valeur de A_{mush} peut avoir une influence importante sur les résultats du calcul. Les effets de la constante de zone pâteuse sur les résultats de simulation constituent l'un des objets d'étude du chapitre III de ce manuscrit.

La méthode du terme source de Darcy est la technique de réduction de la vitesse dans le solide la plus utilisée, du fait de sa facilité d'implémentation des méthodes mono-fluides dans les codes communs de mécanique des fluides ; cette approche a fait ses preuves depuis son introduction dans les années 1980. Le logiciel de CFD ANSYS Fluent®, très utilisé dans le monde aussi bien dans les milieux académiques qu'industriels, implémente cette méthode. Pour les travaux effectués dans cette thèse, c'est cette méthode de réduction de la vitesse dans le solide qui est employée.

II.2.2.2.2. Modèle thermique – Changement de phase isotherme ou quasi-isotherme

Sur le plan énergétique, le modèle doit prendre en compte la chaleur latente de changement de phase, qui correspond à une absorption (lors d'une fusion) ou une libération d'énergie (lors d'une solidification) de manière isotherme ou quasi-isotherme au niveau de l'interface. Ce phénomène peut être pris en compte en adaptant les propriétés physiques du fluide équivalent qui modélise le mélange solide / liquide, ou bien en formulant l'équation de l'énergie de manière à faire apparaître explicitement la contribution de chaleur latente à l'évolution de l'enthalpie ou de la température dans le MCP. On peut répertorier quatre grandes approches pour gérer cet aspect du changement de phase.

La première approche est celle de la *formulation enthalpique*, qui consiste à formuler l'équation de l'énergie avec l'enthalpie massique h du fluide homogène équivalent :

$$\rho \left(\frac{\partial h}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} h \right) = \vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla} T) \quad (10)$$

La chaleur latente est directement prise en compte dans la définition de la relation entre l'enthalpie et la température. Pour un corps pur, changeant de phase à température fixe T_{cp} , cette relation prend la forme suivante [101] :

$$h(T) = \begin{cases} h_{ref} + c_{p,s}(T - T_{ref}) & \text{pour } T < T_{cp} \\ h_{ref} + c_{p,s}(T_{cp} - T_{ref}) + L + c_{p,l}(T - T_{cp}) & \text{pour } T \geq T_{cp} \end{cases} \quad (11)$$

où T_{ref} est une température de référence choisie arbitrairement, et $h_{ref} = h(T_{ref})$. Pour un matériau non pur, changeant de phase sur une plage de température $T_{sol} < T < T_{liq}$, la relation dépend du type de mélange (solution binaire, solution solide, etc.), et peut être complexe. On utilise parfois des relations approximant la réalité par une fonction simple ; à titre d'exemple, on peut utiliser la relation linéaire suivante (avec laquelle les capacités thermiques sensibles $c_{p,s}$ et $c_{p,l}$ des phases solide et liquide sont supposées constantes) [102] :

$$h(T) = \begin{cases} h_{ref} + c_{p,s}(T - T_{ref}) & \text{pour } T < T_{sol} \\ h_{ref} + c_{p,s}(T_{sol} - T_{ref}) + \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} L & \text{pour } T_{sol} \leq T \leq T_{liq} \\ h_{ref} + c_{p,s}(T_{sol} - T_{ref}) + L + c_{p,l}(T - T_{liq}) & \text{pour } T > T_{liq} \end{cases} \quad (12)$$

Des exemples d'études effectuées avec cette approche peuvent être trouvées dans [103]–[107]. Si cette formulation donne généralement de bons résultats, il est connu qu'elle peut dans certaines conditions générer des solutions non physiques ayant une forme « en plateaux ». Selon la finesse du maillage et le nombre de Stefan du problème [101], le front de fusion peut progresser de manière discontinue dans le domaine [108], ou bien le champ de température en un point peut avoir une évolution en escalier au cours du temps [102]. Afin de pallier à ce problème, il est possible d'utiliser des formulations tenant compte de la fraction de MCP fondu dans chaque cellule [108], ou bien des algorithmes de résolution dédiés [102].

Avec la seconde approche, dite *méthode du terme source*, l'enthalpie massique h est définie comme étant la somme de deux contributions : une part d'enthalpie sensible h_{sens} , liée au refroidissement (resp. chauffage) du MCP en-dessous (resp. au-dessus) de son point de fusion, et une part h_{lat} liée à la chaleur latente. L'idée est d'isoler la contribution latente dans l'équation de l'énergie ; les termes transitoire et convectif sont écrits avec l'enthalpie sensible h_{sens} , et les termes d'enthalpie latente prennent la forme d'un terme puits :

$$\rho \left(\frac{\partial h_{sens}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} h_{sens} \right) = \vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla} T) - \rho \left(\frac{\partial h_{lat}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} h_{lat} \right) \quad (13)$$

On écrit $h_{sens} = \int_{T_{ref}}^T c_p(T) dT$, et $h_{lat} = Y_l L$, avec Y_l la fraction liquide massique. En supposant constante la capacité thermique c_p , l'équation de l'énergie s'écrit ainsi :

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} T \right) = \vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla} T) - \rho L \left(\frac{\partial Y_l}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} Y_l \right) \quad (14)$$

Cette formulation fait intervenir des dérivées spatiales et temporelles de la fraction liquide Y_l ; il faut donc expliciter cette grandeur et de nombreuses possibilités existent. L'expression la plus simple pour Y_l est une évolution linéaire avec T entre les températures de solidus et de liquidus [99] :

$$Y_l(T) = \begin{cases} 0 & \text{pour } T < T_{sol} \\ \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} & \text{pour } T_{sol} \leq T \leq T_{liq} \\ 1 & \text{pour } T > T_{liq} \end{cases} \quad (15)$$

D'autres auteurs tels que [109] proposent une relation sous la forme d'une fonction sigmoïde, qui ne présente pas de rupture de pente à $T = T_{sol}$ et $T = T_{liq}$, mais ne repose sur aucune justification théorique. Dans le cas particulier des mélanges binaires, il existe des expressions fondées sur l'étude de la solidification dendritique, qui prennent en compte les effets liés à la redistribution de l'un des composants du mélange dans les phases liquide et solide lors du changement de phase (voir [110] pour plus de détails).

Cette formulation de l'équation de l'énergie est la plus utilisée à l'heure actuelle ; elle est implémentée dans le code ANSYS Fluent®. C'est cette formulation qui est utilisée pour les travaux menés dans cette thèse. Lorsqu'elle est utilisée avec la méthode du terme source de Darcy pour le traitement de l'équation de quantité de mouvement, on parle de *méthode enthalpie-porosité*.

La méthode du terme source permet naturellement d'éviter les comportements « en plateaux » que l'on peut observer avec la formulation enthalpique, tout en donnant elle aussi de bons résultats. La principale difficulté associée à cette méthode se trouve sur le plan numérique, l'explicitation de la fraction liquide imposant un traitement particulier de l'équation de l'énergie. Le manuel d'aide d'ANSYS Fluent® [111] indique que la température est déterminée en itérant entre l'équation de l'énergie (14) et l'équation reliant la fraction liquide et la température (15). Par ailleurs, le cas où le changement de phase se fait à température fixe (corps pur) amène des difficultés numériques supplémentaires, la fonction $Y_l(T)$ étant alors discontinue. Il faut employer dans ce cas-ci un schéma de résolution différent du cas où le changement de phase est étalé en température (sous-entendu dans l'expression de Y_l donnée plus haut) [112].

La troisième approche, dite de *capacité thermique équivalente*, consiste à prendre en compte la chaleur latente à travers la capacité thermique c_p du fluide équivalent qui modélise le MCP. Celle-ci est prise variable selon la température, et on lui attribue des valeurs nettement plus élevées lorsque le changement de phase est en cours, c'est-à-dire lorsque la température est proche de celle du changement de phase ou de l'intervalle de température du changement de phase. La capacité thermique c_p représente alors à la fois la contribution de la chaleur sensible et de la chaleur latente à l'enthalpie du MCP : les valeurs que c_p adopte lorsque le changement de phase est en cours doivent être choisies de telle sorte que l'on retrouve bien la chaleur latente de changement de phase dans l'enthalpie massique du MCP, définie par $h(T) = \int_{T_{ref}}^T c_p(T) dT$. Avec cette approche, on écrit l'équation de l'énergie sous la même forme que l'équation de la chaleur classique : tous les termes sont exprimés avec la température, afin de faire apparaître la capacité thermique.

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} T \right) = \vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla} T) \quad (16)$$

La capacité thermique équivalente c_p doit être évaluée correctement en chaque point du domaine, à chaque instant de calcul. Deux méthodes d'évaluation existent. La méthode de *capacité thermique apparente* consiste à représenter c_p comme une fonction de la température $c_p = f(T)$, et à adopter une expression de cette fonction présentant un pic dans la région du changement de phase. La manière la plus simple de le faire consiste à ajouter un terme de chaleur latente à la capacité thermique sensible. Pour un changement de phase étalé en température, on adopte typiquement une expression de c_p de la forme suivante [113]:

$$c_p(T) = \begin{cases} c_{p,sens,s} & \text{pour } T < T_{sol} \\ \frac{\int_{T_{sol}}^{T_{liq}} c_{p,sens}(T) dT + L(T)}{T_{liq} - T_{sol}} & \text{pour } T_{sol} \leq T \leq T_{liq} \\ c_{p,sens,l} & \text{pour } T > T_{liq} \end{cases} \quad (17)$$

où $c_{p,sens}$ désigne la capacité thermique sensible du MCP, et où le terme $L(T)$ désigne la contribution de la chaleur latente à la capacité équivalente. D'autres expressions sont envisageables [114], [115]. Pour un changement de phase à température fixe, il est nécessaire avec cette méthode d'étaler la transition de phase sur un intervalle de température $\Delta T = T_{liq} - T_{sol}$; en effet, la capacité thermique équivalente est en théorie une fonction de Dirac au niveau de la température de changement de phase, ce qui empêcherait toute résolution numérique du fait de la discontinuité que cela impliquerait sur l'enthalpie massique du MCP. Sur l'intervalle $T_{sol} < T < T_{liq}$, on a alors [116] :

$$c_p = \frac{L}{(T_{liq} - T_{sol})} + \frac{c_{p,sens,s} + c_{p,sens,l}}{2} \quad (18)$$

N'importe quelle fonction continue pouvant en théorie être adoptée pour la relation $c_p = f(T)$, il est également possible de déterminer sa forme en se basant sur des mesures calorimétriques effectuées sur le MCP [117]. En effet, la calorimétrie différentielle à balayage (ou DSC de l'anglais *Differential Scanning Calorimetry*), qui est utilisée usuellement pour déterminer la chaleur latente et l'intervalle de température de changement de phase d'un MCP, permet de mesurer l'absorption ou le dégagement de chaleur du MCP en fonction de sa température pendant la fusion ou la solidification. Bien que ces mesures soient entachées de nombreuses imprécisions (évoquées plus en détail dans le chapitre suivant de ce manuscrit, section III.2.3, p 68), elles peuvent être traduites dans une fonction $c_p = f(T)$.

La méthode de capacité thermique apparente a pour avantages d'être simple sur le principe, et facile d'implémentation dans un code de mécanique des fluides ou de transfert de chaleur standard. Cependant, il est possible qu'elle ne prenne pas toujours bien en compte la chaleur latente dans toutes les cellules du maillage. En effet, si dans une cellule donnée, la température passe d'une température $T_n > T_{liq}$ à $T_{n+1} < T_{sol}$ (ou bien de $T_n < T_{sol}$ à $T_{n+1} > T_{liq}$) sur un pas de temps, la chaleur latente sera ignorée (le pic de c_p correspondant à la chaleur latente ayant été « sauté »). En outre, il a été constaté que l'estimation de la température pouvait se montrer imprécise avec cette méthode [113], [118]. Par ailleurs, du fait de l'introduction nécessaire d'un intervalle de température pour le changement de phase, cette méthode est naturellement moins adaptée aux changements de phase à température fixe.

L'autre méthode d'évaluation du c_p , dite de *capacité thermique effective*, s'appuie sur les champs d'enthalpie massique h et de température T dans le domaine de calcul. A chaque instant de calcul, on détermine une valeur de capacité thermique pour chaque cellule du maillage à l'aide des valeurs de l'enthalpie et de la température dans la cellule à l'instant en cours, ainsi que celles à l'instant précédent ou dans les cellules voisines. De nombreuses expressions existent pour la capacité effective ; on peut

citer les 4 exemples suivants [119]–[122].

- Exemple 1 :

$$c_p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\vec{\nabla}h \cdot \vec{e}_i}{\vec{\nabla}T \cdot \vec{e}_i} \quad (19)$$

où N est la dimension du problème ($N=2$ en 2D, $N=3$ en 3D), et les \vec{e}_i sont les vecteurs élémentaires des directions de l'espace ;

- Exemple 2 :

$$c_p = \frac{\vec{\nabla}h \cdot \vec{\nabla}T}{\vec{\nabla}T \cdot \vec{\nabla}T} \quad (20)$$

- Exemple 3 :

$$c_p = \frac{h^n - h^{n-1}}{T^n - T^{n-1}} \quad (21)$$

où φ^n représente la valeur de la grandeur φ à l'instant temporel n ;

- Exemple 4 :

$$c_p = \sqrt{\frac{\vec{\nabla}h \cdot \vec{\nabla}h}{\vec{\nabla}T \cdot \vec{\nabla}T}} \quad (22)$$

La précision des résultats est améliorée par rapport à la méthode de capacité apparente. L'implémentation est en contrepartie plus difficile et le coût numérique plus élevé du fait des calculs de gradients et de dérivées temporelles en chaque nœud du maillage, notamment lorsque les gradients deviennent importants. [113]

Une dernière approche pour les aspects thermiques du problème, dite *formulation enthalpique totale*, consiste à formuler tous les termes de l'équation de l'énergie en fonction de l'enthalpie massique h du MCP, de manière à faire disparaître la température. Il s'agit essentiellement d'exprimer le terme diffusif (loi de Fourier) selon l'enthalpie massique, en faisant attention à ce que la chaleur latente soit bien prise en compte dans l'équation obtenue.

Plusieurs écritures équivalentes de l'équation de l'énergie sont proposées par différents auteurs pour cette formulation. On peut citer par exemple celle de [123] :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} h) = \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \vec{\nabla} h \right) - \frac{\partial \rho L Y_l}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} L Y_l) \quad (23)$$

D'autres exemples peuvent être trouvés dans [124]–[126].

Cette formulation est très peu utilisée ; peu de données sont ainsi disponibles sur ses avantages et ses inconvénients. Cao et al. [124] ont testé cette méthode sur un cas de solidification 3D ; les résultats obtenus sont tout à fait corrects, étant en très bon accord avec d'autres résultats de la littérature sur le même problème.

II.3. Modélisation 1D des écoulements diphasiques liquide-vapeur en conduite

Après s'être intéressé à la modélisation thermo-fluidique 3D de la fusion et de la solidification des MCP dans la section précédente, une revue des techniques de modélisation d'un écoulement de vapeur dans une conduite est effectuée dans cette section. Lors de la charge d'un système de stockage de vapeur tubes-calandre par MCP, la vapeur à stocker circule dans les tubes à ailettes disposés dans la calandre de MCP, et se condense au cours de son écoulement en cédant de la chaleur au MCP. Lors de la décharge du stockage, l'eau liquide injectée dans les tubes s'évapore en récupérant de la chaleur du MCP qui se solidifie, pour régénérer de la vapeur. Afin de prédire les échanges de chaleur dans le système, il est nécessaire de modéliser à la fois les échanges de chaleur du côté du MCP en fusion ou en solidification à l'extérieur des tubes, et du côté de l'écoulement de vapeur en condensation ou d'eau liquide en évaporation à l'intérieur des tubes.

L'étude des écoulements en ébullition ou en condensation est un sujet d'importance dans le secteur de l'énergie. En effet, de nombreux systèmes de production d'énergie, à partir de sources conventionnelles comme renouvelables, font intervenir l'écoulement d'un fluide caloporteur diphasique (le plus souvent de l'eau), dont on exploite la chaleur latente de changement de phase liquide / vapeur. Ce fluide étant amené à circuler dans des conduites, il est souvent approprié de modéliser son écoulement de manière unidimensionnelle.

De nombreux phénomènes physiques interviennent dans un écoulement diphasique en condensation ou en ébullition. Selon la vitesse de l'écoulement et l'amplitude du flux de chaleur échangé avec la paroi de la conduite, les phases liquide et vapeur en présence peuvent circuler à des vitesses très différentes, et être à des températures différentes (déséquilibre thermique), voire même à des pressions différentes (déséquilibre mécanique). Selon les différences de vitesse et de température entre les deux phases, il peut être nécessaire de modéliser les effets d'influence d'une phase sur l'autre, qui peuvent être complexes : transferts de chaleur entre phases liquide et vapeur, effets de cisaillement lié aux différences de vitesse, effets liés au changement de phase... Par ailleurs, les frottements et les transferts de chaleur avec la paroi sont gouvernés par la structure de l'écoulement : il est ainsi nécessaire de modéliser les coefficients de perte de charge et d'échange thermique avec la paroi à l'aide d'une corrélation adaptée à l'écoulement en présence, généralement déterminée expérimentalement.

Dans le secteur de l'énergie nucléaire, la modélisation des écoulements liquide-vapeur est un sujet de recherche actif : dans un réacteur nucléaire à eau pressurisée, on rencontre des écoulements diphasiques avec des vitesses et des flux de chaleur à la paroi importants, ce qui amène à des déséquilibres thermiques et mécaniques non négligeables entre liquide et vapeur qu'il convient de modéliser avec précision. [127] Pour des applications mettant en jeu des vitesses et des flux de chaleur plus faibles, comme celle des systèmes de stockage de vapeur tubes-calandre par MCP, les déséquilibres moins importants entre liquide et vapeur permettent l'utilisation de modèles plus

simples, dans leur formulation et dans le nombre de phénomènes à modéliser. Il existe de nombreuses approches de modélisation, dont la complexité peut être très variable selon les hypothèses effectuées et les phénomènes physiques pris en compte.

Cette section présente les principales approches existantes pour la modélisation 1D des écoulements diphasiques en conduite. Les approches fondées sur une discrétisation 1D de la conduite sont d'abord présentées, en allant des modèles les plus simples (*modèles homogènes*) vers les plus complexes (*modèles bi-fluide*). La dernière section s'attarde sur les modèles à frontière mobile, qui ne sont pas des modèles 1D à proprement parler, mais qui sont utilisés au même titre que les modèles précédents pour simuler les écoulements diphasiques en conduite, permettant de réduire de manière significative le temps de calcul tout en conservant la capacité de prédire certaines caractéristiques 1D de l'écoulement.

II.3.1. Modèles homogènes

II.3.1.1. Formulation de base - Modèles à 3 équations

Les *modèles homogènes*, ou *modèles de mélange* (*mixture flow model* en anglais), constituent l'approche la plus simple pour la modélisation 1D des écoulements diphasiques. Elle consiste à représenter le mélange diphasique liquide / vapeur comme un fluide homogène, que l'on va décrire à l'aide de grandeurs moyennées sur les deux phases, et représenter par un jeu d'équations de la mécanique des fluides classiques (conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie). Le modèle suppose que les phases liquide et vapeur sont en équilibre thermique et mécanique, c'est-à-dire que leur température et leur pression respective à une abscisse donnée de la conduite sont égales. De même, les deux phases sont vues comme circulant à la même vitesse (absence de glissement).

La modélisation étant unidimensionnelle, les équations constitutives sont écrites en moyennant les équations de Navier-Stokes sur la section de passage de la conduite où circule l'écoulement. Les différentes grandeurs intervenant dans le problème sont ainsi des valeurs moyennes sur cette section. Ce processus de moyenne permet d'adopter comme inconnue du problème le débit massique au lieu de la vitesse. De même, l'inconnue représentant l'énergie du fluide peut être sa température, son enthalpie massique ou bien encore son énergie interne. La troisième inconnue du problème est systématiquement la pression P . La formulation des équations du problème varie selon les choix effectués pour les inconnues et les hypothèses effectuées. A titre d'exemple, Bestion et Morel [128] donnent la formulation ci-dessous, en adoptant le débit massique \dot{m} et l'enthalpie massique h comme inconnues, et en négligeant la diffusion axiale de la température, ainsi que les variations d'énergie cinétique et d'énergie potentielle :

$$S \frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial \dot{m}}{\partial z} = 0 \quad (24)$$

$$\frac{\partial \dot{m}}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{\dot{m}^2}{S \rho_m} \right)}{\partial z} = -S \frac{\partial P}{\partial z} - S \rho_m g - F \quad (25)$$

$$S \rho_m \frac{\partial h}{\partial t} + \dot{m} \frac{\partial h}{\partial z} = S \frac{\partial P}{\partial t} + c \varphi \quad (26)$$

S est ici la section de passage de la conduite et c son périmètre. Dans l'équation de quantité de mouvement (25), g est la composante de la gravité suivant la direction de l'écoulement. Un autre exemple de formulation peut être trouvé dans Cundapí et al. [129] ; ces auteurs adoptent la vitesse et l'énergie interne comme inconnues, et tiennent compte des variations d'énergie cinétique et d'énergie potentielle.

La masse volumique moyenne du mélange, notée ρ_m dans les équations (24) à (26), s'exprime de la manière suivante [130] :

$$\rho_m = \varepsilon\rho_v + (1 - \varepsilon)\rho_l \quad (27)$$

où ρ_l et ρ_v sont les masses volumiques des phases liquide et vapeur, et ε est le *taux de vide*, défini localement comme la fraction de la section de passage occupée par la phase vapeur. Cette grandeur peut se voir comme une fraction volumique de la vapeur.

La fermeture du problème requiert l'introduction d'expressions pour le frottement F et le transfert de chaleur φ avec la paroi, et pour le taux de vide. Ces grandeurs sont fonction du régime d'écoulement diphasique en vigueur, c'est-à-dire de la répartition dans la conduite des phases liquide et vapeur, et de leur vitesse relative. Elles sont souvent exprimées à l'aide de corrélations issues de l'expérience, valables pour un régime d'écoulement et des conditions données. Les régimes d'écoulement pouvant se développer dépendent de nombreux facteurs : écoulement en condensation ou en ébullition, inclinaison de la conduite (écoulement horizontal, vertical ou incliné), sens de l'écoulement, dimensions de la conduite, propriétés du fluide, débit, ... [130], [131] Le régime présent en chaque abscisse de la conduite peut évoluer le long de l'écoulement, à mesure que la condensation ou l'ébullition progresse, comme illustré sur la Figure 23 et la Figure 24 pour le cas des écoulements en ébullition [130]. De nombreux modèles utilisent une carte de régimes d'écoulement pour déterminer le régime d'écoulement en présence en chaque point de la conduite ; il s'agit d'une carte bidimensionnelle qui indique le régime en présence en fonction d'un certain nombre de paramètres locaux, tels que la vitesse relative des deux phases, le titre de vapeur, etc. Un exemple de carte de régimes d'écoulement, établie pour un fluide frigorigène (R22) dans une conduite horizontale, est montré Figure 25.

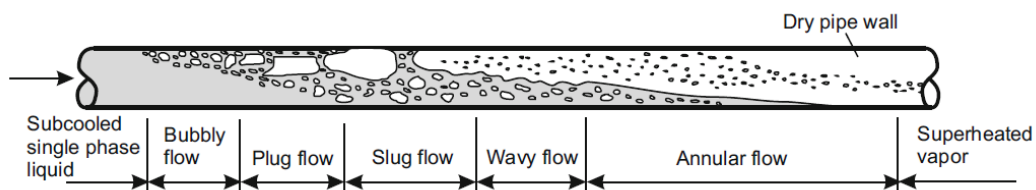


Figure 23 : Régimes d'écoulement rencontrés le long d'un écoulement en ébullition dans une conduite horizontale [130]

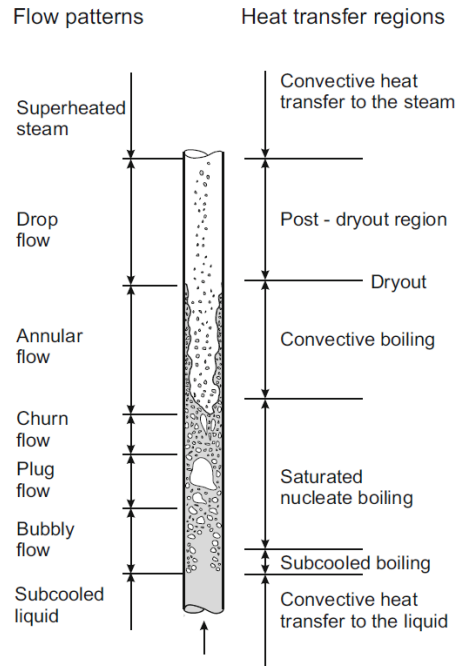


Figure 24 : Régimes d'écoulement rencontrés le long d'un écoulement en ébullition dans une conduite verticale [130]

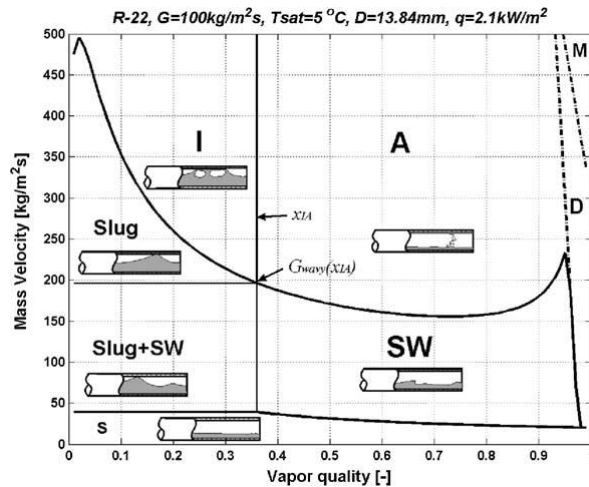


Figure 25 : Exemple de carte pour la prédiction du régime d'écoulement pour du R22 en écoulement horizontal [132]

De par leur construction, les modèles homogènes négligent les écarts de vitesse, de température et de pression entre les phases liquide et vapeur. Ils sont ainsi plus adaptés pour simuler des situations dans lesquelles ces écarts ont un impact faible sur l'écoulement et le transfert de chaleur. Bestion et Morel [128] indiquent que l'hypothèse de non-glissement entre les phases est souvent la source d'erreur la plus importante, en particulier pour les régimes d'écoulement dans lesquels les deux phases sont clairement séparées l'une de l'autre dans la conduite, comme le régime annulaire en conduite verticale, ou certains régimes en conduite horizontale où une stratification se crée entre régime et vapeur (cf. Figure 23). Par ailleurs, certains cas d'écoulement avec fortes vitesses ou forts flux de chaleur à la paroi peuvent voir apparaître des phénomènes qu'il est difficile de simuler avec un modèle homogène. Par exemple, dans le cas d'un écoulement en ébullition, lorsque l'apport de chaleur à la paroi est suffisamment important, le liquide peut se mettre à bouillir près de la paroi, tandis que le cœur de la

conduite se trouve toujours à une température inférieure à la température de saturation ; on parle d'ébullition sous-refroidie [130]. Le transfert de chaleur à la paroi pour ce type de régime dépendant de la température de la couche de vapeur adjacente à la paroi, il sera plus difficile pour un modèle homogène 1D de le prédire avec précision. Pour la simulation de l'écoulement d'eau / vapeur dans un système de stockage de vapeur par MCP, ce type de phénomènes n'est à priori pas présent, les vitesses d'écoulement et les flux de chaleur en jeu étant faibles.

II.3.1.2. Variantes

Sous leur formulation la plus basique, les modèles homogènes sont composés de trois équations constitutives de la forme des équations (24)-(26), pour trois inconnues. En posant des hypothèses simplificatrices, il est possible de réduire le nombre d'équations et d'inconnues du problème. Par exemple, plusieurs études font le choix de ne pas simuler les variations de débit le long de la conduite, ce qui permet d'éliminer l'équation de conservation de la masse ; on a alors un modèle à deux équations [133], [134]. Hirsch et al. [135] expriment le débit massique local à partir de la perte de charge par frottement (déduite de la pression), ce qui leur permet d'utiliser deux équations constitutives seulement tout en tenant compte des variations de débit. Il est possible également de ramener le problème à un simple bilan d'énergie, en ignorant à la fois les variations de la pression et de la vitesse de l'écoulement le long de la conduite [31]. L'équation de l'énergie est alors la seule équation du problème. Les modèles avec moins d'équations constitutives, plus simples, sont moins coûteux en ressources de calcul que les modèles à 3 équations plus généraux. Ils sont ainsi intéressants lorsque le modèle d'écoulement diphasique 1D doit être couplé à un autre modèle physique. Ju et al. [31] utilisent un modèle réduit à un bilan d'énergie pour simuler un système de stockage de vapeur par MCP ; le modèle fluide est couplé à un modèle 2D de transferts de chaleur et du changement de phase solide / liquide dans le MCP. Serrano-Aguilera et al. [134] simulent un récepteur solaire thermique ; un modèle à 2 équations de l'écoulement du fluide caloporteur diphasique (eau / vapeur) est couplé à un modèle 3D de transferts de chaleur dans les parties solides du tube et entre ces différentes parties solides.

Afin de s'affranchir de l'hypothèse de non-glissement entre les phases, qui peut être source d'erreurs dans certaines situations, certains modèles distinguent les vitesses des phases liquide et vapeur, et écrivent les termes faisant intervenir la vitesse ou le débit en sommant les contributions des deux phases [136]–[138]. Selon Lin et al. [138], les équations constitutives du problème sont alors les suivantes :

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_v v_v \varepsilon + \rho_l v_l (1 - \varepsilon)) = 0 \quad (28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_v v_v \varepsilon + \rho_l v_l (1 - \varepsilon)) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_v v_v^2 \varepsilon + \rho_l v_l^2 (1 - \varepsilon)) = -\frac{\partial P}{\partial z} - \rho_m g - F \quad (29)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_v \varepsilon \left(h_v + \frac{v_v^2}{2} + g z \cos(\theta) \right) + \rho_l (1 - \varepsilon) \left(h_l + \frac{v_l^2}{2} + g z \cos(\theta) \right) \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho_v v_v \varepsilon \left(h_v + \frac{v_v^2}{2} + g z \cos(\theta) \right) \right) \\ & + \rho_l v_l (1 - \varepsilon) \left(h_l + \frac{v_l^2}{2} + g z \cos(\theta) \right) = \frac{\partial P}{\partial t} + q \end{aligned} \quad (30)$$

Les enthalpies h_l et h_v des deux phases sont calculées en fonction de la température et de la pression locales. La détermination des vitesses v_l et v_v nécessite une information externe, et empirique, sur le glissement entre les phases. On utilise pour cela une corrélation sur le taux de vide ε , relié aux vitesses individuelles des deux phases par la relation suivante :

$$\varepsilon = \frac{x\rho_l}{x_{vap}\rho_l + (1 - x_{vap})\rho_g \frac{v_g}{v_l}} \quad (31)$$

où x_{vap} est le titre massique de vapeur, défini par :

$$x_{vap} = \frac{h - h_{l,sat}}{h_{v,sat} - h_{l,sat}} \quad (32)$$

avec $h_{l,sat}$ et $h_{v,sat}$ les enthalpies des deux phases à saturation, à la pression considérée.

Cette formulation ne nécessite ainsi pas plus d'informations ou de corrélations empiriques que celle de la section II.3.1.1 pour être mise en œuvre. Lin et al. [138] indiquent que cette formulation permet de rendre compte plus précisément des phénomènes physiques liés au glissement entre les phases, la contribution individuelle de chaque phase étant considérée.

II.3.2. Modèles bi-fluide

II.3.2.1. Principe, modèles à 6 équations

L'idée fondatrice des *modèles bi-fluide* est de considérer de manière individuelle le comportement de chacune des deux phases, par opposition à l'approche des modèles homogènes qui a vocation à décrire le comportement moyen de l'écoulement. Cette approche est similaire dans l'esprit aux méthodes bi-fluide pour la modélisation du changement de phase solide / liquide (cf. section II.2.2.1) : dans la modélisation bi-fluide la plus répandue, on écrit deux jeux d'équations de conservation (masse, quantité de mouvement et énergie), l'un pour la phase liquide et l'autre pour la phase gazeuse. On distingue ainsi dans le modèle la vitesse et la température individuelle de chaque phase : pour une phase donnée, les équations de masse et de quantité de mouvement décrivent l'évolution de la vitesse ou du débit de la phase concernée, et l'équation de l'énergie est un bilan sur l'énergie interne ou l'enthalpie de la phase concernée uniquement. Le nombre total d'équations constitutives est de six ; les six inconnues que l'on résout sont la vitesse et l'énergie individuelles de la phase liquide et de la phase gazeuse, la pression et le taux de vide. Ce modèle est ainsi appelé *modèle à 6 équations*.

Comme pour les modèles homogènes, la formulation des équations constitutives dépend du choix des inconnues et des hypothèses effectuées. A titre d'exemple, les six équations adoptées dans le code de simulation thermo-hydraulique CATHARE [139] sont les suivantes :

$$S \frac{\partial \varepsilon \rho_v}{\partial t} + \frac{\partial (S \varepsilon \rho_v v_v)}{\partial z} = S \Gamma \quad (33)$$

$$S \frac{\partial (1 - \varepsilon) \rho_l}{\partial t} + \frac{\partial (S (1 - \varepsilon) \rho_l v_l)}{\partial z} = -S \Gamma \quad (34)$$

$$S \frac{\partial \varepsilon \rho_v v_v}{\partial t} + \frac{\partial (S \varepsilon \rho_v v_v^2)}{\partial z} + S \varepsilon \frac{\partial P}{\partial z} = -\chi F_{pv} + S (1 - \varepsilon \rho_v g) + s_v \frac{\partial S}{\partial z} \quad (35)$$

$$S \frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_l v_l}{\partial t} + \frac{\partial(S(1-\varepsilon)\rho_v v_v^2)}{\partial z} + S(1-\varepsilon) \frac{\partial P}{\partial z} \quad (36)$$

$$= \chi F_{pl} + S(-I - (1-\varepsilon)\rho_v g) + s_l \frac{\partial S}{\partial z}$$

$$S \frac{\partial}{\partial t} \left(\varepsilon \rho_v \left(h_v + \frac{1}{2} v_v^2 \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(S \varepsilon \rho_l \left(h_v + \frac{1}{2} v_v^2 \right) \right) - S \varepsilon \frac{\partial P}{\partial t} \quad (37)$$

$$= S \left(q_{ig} + \Gamma \left(h_v + \frac{1}{2} v_v^2 \right) + \varepsilon \rho_v v_v g \right) + \chi q_{pv}$$

$$S \frac{\partial}{\partial t} \left((1-\varepsilon) \rho_l \left(h_l + \frac{1}{2} v_l^2 \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(S(1-\varepsilon) \rho_l \left(h_l + \frac{1}{2} v_l^2 \right) \right) - S(1-\varepsilon) \frac{\partial P}{\partial t} \quad (38)$$

$$= S \left(q_{il} + \Gamma \left(h_l + \frac{1}{2} v_l^2 \right) + (1-\varepsilon) \rho_l v_l g \right) + \chi q_{pl}$$

où :

- Γ est le taux de génération de vapeur par unité de volume (exprimé en $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$). Il s'exprime comme $\Gamma = \frac{\chi / S q_{pi} - q_{il} - q_{iv}}{h_v - h_l}$, où χ est le périmètre mouillé, q_{pi} est le transfert de chaleur entre la paroi et l'interface liquide-vapeur, et q_{il} et q_{iv} le transfert de chaleur entre l'interface et les phases liquide et vapeur respectivement.
- F_{pv} et F_{pl} sont des termes de frottement à la paroi, exprimés individuellement pour chaque phase.
- I représente l'échange de quantité de mouvement à l'interface liquide-vapeur. Ce terme est la somme de quatre contributions :
 - Un terme lié aux effets visqueux
 - Un terme lié aux effets inertiels, dit terme de masse virtuelle
 - Un terme de la forme $-p_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial z}$. Le facteur p_i est homogène à une pression ; son expression est différente selon que l'écoulement est stratifié ou non.
 - Un terme représentant l'échange de quantité de mouvement entre les phases lié au changement de phase. Ce terme est proportionnel au taux de génération de vapeur Γ .
- Les termes $s_v \frac{\partial S}{\partial z}$ et $s_l \frac{\partial S}{\partial z}$ interviennent uniquement dans une conduite de section variable. Les facteurs f_v et f_l ont pour expression $f_v = \tau \frac{\varepsilon}{4} p_i$ et $f_l = \tau \frac{(1-\varepsilon)}{4} p_i$. Le terme τ est appelé taux de stratification ; il vaut 0 pour un écoulement non stratifié, 1 pour un écoulement complètement stratifié, et prend une valeur entre 0 et 1 pour les cas intermédiaires.
- q_{iv} et q_{il} représentent le transfert d'énergie entre l'interface liquide-vapeur, et les phases vapeur et liquide respectivement.
- q_{pv} et q_{pl} représentent le transfert de chaleur à la paroi. Comme pour les termes de frottement F_{pv} et F_{pl} , ces deux termes sont les contributions respectives de la phase vapeur et de la phase liquide aux échanges de chaleur avec la paroi.

Comme on peut le voir, les diverses équations de conservation comportent des termes sources supplémentaires par rapport aux équations vues précédemment (de la forme des équations (24) à (26)). En effet, les effets liés au changement de phase liquide / vapeur et à l'interaction entre les phases viennent s'ajouter aux sources habituelles de quantité de mouvement et d'énergie. Très souvent, ces divers effets ne peuvent pas être quantifiés théoriquement, les phénomènes mis en jeu dans les interactions entre le liquide et la vapeur étant très complexes. Par ailleurs, l'écriture d'un jeu

d'équations de conservation individuellement pour chaque phase conduit à distinguer des termes d'interaction avec la paroi (frottement et transfert de chaleur) séparés pour les phases liquide et vapeur. Il n'est donc pas possible d'employer directement des expressions globales du frottement ou du transfert de chaleur à la paroi, du type que l'on utiliserait dans le cadre d'un modèle homogène : il faut connaître les contributions individuelles de chaque phase.

Pour ces raisons, les nombreux termes aux membres de droite des équations (33) à (38) sont exprimés à l'aide de corrélations, souvent dérivées sur la base d'expériences effectuées dans des conditions précises (régime d'écoulement, ...) et sous des hypothèses données, et donc valables uniquement pour un certain régime d'écoulement et un certain domaine de validité [139], [140]. Ainsi, comme le décrit Bestion [139], les lois de fermeture implémentées dans le code CATHARE sont issues de nombreuses expériences, effectuées afin de quantifier individuellement chacun des effets particuliers explicités dans les équations, et de couvrir un nombre de situations d'écoulement aussi vaste que possible.

Les modèles bi-fluide à 6 équations s'affranchissent de la majeure partie des hypothèses d'équilibre entre les phases liquide et vapeur, hypothèses fondamentales des modèles homogènes. La distinction des températures individuelles du liquide et de la vapeur permet de simuler avec plus d'exactitude qu'un modèle homogène les cas où les deux phases ne sont pas en équilibre thermodynamique ($T_l \neq T_g$). De même, le calcul indépendant de deux vitesses permet de mieux représenter les situations où une importante différence existe entre les vitesses des deux phases. La seule hypothèse d'équilibre des phases que conservent les modèles bi-fluide est celle de l'équilibre mécanique, les deux phases étant à la même pression.

II.3.2.2. Variantes – Modèles à 4, 5, 7 équations

De la même manière que pour les modèles homogènes, il est possible de réduire le nombre d'équations et d'inconnues du problème en posant des hypothèses d'équilibre partiel entre liquide et vapeur. En supposant l'équilibre thermique des deux phases (températures égales), on peut écrire une unique équation d'énergie pour le mélange. Alobaid et al. [140] présentent deux modèles effectuant cette hypothèse, avec respectivement 4 et 5 équations : le premier écrit également une équation de conservation de la masse unique pour le mélange, et le second écrit deux équations de masse séparées. D'autres modèles écrivent une unique équation de quantité de mouvement, formulée en termes d'une vitesse moyenne du mélange, et utilisent une relation de glissement pour décrire la vitesse relative des deux phases [128], [140]–[144]. Les vitesses individuelles des deux phases, qui interviennent dans les équations de masse et d'énergie, sont alors exprimées à l'aide de la vitesse moyenne. L'approche *drift-flux*, détaillée plus loin (section II.3.3), est très souvent employée pour exprimer la vitesse relative des phases.

Il existe également des modèles à 7 équations, qui s'affranchissent de l'hypothèse d'équilibre mécanique effectuée par les autres modèles bi-fluide : le liquide et la vapeur peuvent ici être localement à des pressions différentes [140], [145]. Le problème a alors 7 inconnues, deux pressions étant calculées au lieu d'une seule pour le mélange. Les six premières équations constitutives sont celles des modèles à 6 équations (équations (33) à (38)) ; la septième équation introduite décrit l'évolution du taux de vide. Ce type de modèles permet de modéliser correctement un écoulement diphasique qui soit totalement hors d'équilibre, et présente par ailleurs des avantages sur les plans mathématique et numérique par rapport aux modèles à 6 équations. Le code de thermo-hydraulique américain RELAP-7, actuellement en développement, est fondé sur un modèle à 7 équations [145], [146].

II.3.2.3. Codes de simulation implémentant des modèles bi-fluide

Les modèles bi-fluide sont utilisés dans les codes de calcul thermo-hydraulique du secteur de l'énergie nucléaire. On peut citer parmi eux le code français CATHARE [139], le code américain RELAP [146], le code finlandais Apros [147], et le code allemand ATHLET [148]. Tous ces codes implémentent un modèle à 6 équations, ainsi que quelques modèles à 4 ou 5 équations. Il n'est pas fait mention dans la littérature d'autres outils disponibles implémentant des modèles bi-fluide unidimensionnels, ou d'éventuelles études effectuées avec un code bi-fluide développé par ailleurs ; les codes du secteur nucléaire semblent avoir l'exclusivité de ce type de modèles.

Le faible nombre de codes bi-fluide disponibles est probablement à relier à l'importante quantité de données expérimentales nécessaire à la mise au point des lois de fermeture, celles-ci étant nombreuses et devant prendre en compte un certain nombre de régimes d'écoulement différents. Le code de simulation doit également gérer la transition entre ces différents régimes, ainsi que les difficultés numériques liées au changement des lois de fermeture lors du passage d'un régime à un autre. La mise en place d'un code de simulation bi-fluide doit ainsi représenter un travail bien plus important que l'implémentation d'un modèle homogène. Les efforts qui y ont été consacrés dans le secteur de l'énergie nucléaire proviennent du besoin de simuler des écoulements diphasiques fortement hors d'équilibre, que l'on peut rencontrer dans un réacteur nucléaire du fait des forts flux de chaleur et des fortes vitesses mises en jeu. [127]

II.3.3. Modèles drift-flux

II.3.3.1. Principe

Les modèles *drift-flux* (terme que l'on pourrait traduire en français par *flux de dérive*) sont des modèles de complexité intermédiaire entre les modèles homogènes et bi-fluide. Les modèles de cette classe ne supposent pas l'égalité des vitesses des deux phases localement dans la conduite. Leur idée fondatrice est d'exprimer la différence de vitesse entre les phases à l'aide d'une relation extérieure, au lieu de calculer les deux vitesses de manière indépendante, comme le font les modèles bi-fluide avec deux équations de quantité de mouvement. On n'écrit ainsi qu'une seule équation de quantité de mouvement. L'expression utilisée pour relier les vitesses des deux phases provient du travail de Zuber et Findlay [149] ; ces auteurs ont proposé en 1965 une équation reliant la vitesse relative des deux phases au taux de vide, ainsi qu'à plusieurs autres paramètres spécifiques décrivant l'écoulement. Cette relation est appelée *modèle drift-flux* dans la littérature ; ce même nom est ainsi donné par extension aux modèles d'écoulements diphasiques se basant sur le travail de Zuber et Findlay. Il existe d'autres modèles diphasiques dans lesquels une relation de fermeture d'un autre type relie la vitesse des deux phases ; c'est le cas des modèles décrits en section II.3.1.2 [136], [138]. Ces modèles-ci ne sont pas désignés sous le nom de *drift-flux*, ce terme étant associé spécifiquement à l'approche de Zuber et Findlay.

Dans cette approche, le glissement entre les phases est décrit à l'aide d'une grandeur nommée *vitesse de glissement*, notée ici \bar{v}_{gj} . Cette vitesse est définie comme la différence entre la vitesse de la phase gazeuse v_v , et le flux volumique de l'écoulement j :

$$\bar{v}_{gj} = v_v - j \quad (39)$$

Le flux volumique j est défini par l'équation (40) ci-dessous. Il correspond à une vitesse moyenne de l'écoulement, pondérée par le volume local des deux phases.

$$j = \varepsilon v_v + (1 - \varepsilon)v_l \quad (40)$$

Zuber et Findlay [149] expriment la vitesse \bar{v}_{gj} en fonction de deux autres paramètres. L'un, noté ici $\langle\langle v_{gj} \rangle\rangle$, est une moyenne sur la section de la conduite de la vitesse de glissement locale. L'autre, nommé *distribution parameter* en anglais et noté C_0 , traduit le fait que les distributions du taux de vide ε et de la vitesse moyenne j sur la section de la conduite ne sont pas forcément corrélées.

$$\bar{v}_{gj} = \langle\langle v_{gj} \rangle\rangle + (C_0 - 1)j \quad (41)$$

Les équations constitutives de l'écoulement sont formulées de manière à faire apparaître la vitesse \bar{v}_{gj} ; le problème est alors fermé à l'aide d'une expression de cette vitesse. La plupart du temps, on utilise des corrélations donnant l'expression des paramètres $\langle\langle v_{gj} \rangle\rangle$ et C_0 , le plus souvent valables pour un régime d'écoulement donné [140], [143]. Pour certains régimes d'écoulement, il est possible de trouver des corrélations donnant directement la vitesse \bar{v}_{gj} . [142]. Une variante consiste à formuler les équations en faisant apparaître la différence de vitesse $v_v - v_l$ au lieu de la vitesse \bar{v}_{gj} [141], [150], [151]. Dans le cadre de l'approche de Zuber et Findlay, cette différence de vitesse s'exprime de la manière suivante :

$$v_v - v_l = \frac{1}{1 - \varepsilon} \left((C_0 - 1)j + \langle\langle v_{gj} \rangle\rangle \right) \quad (42)$$

II.3.3.2. Formulation des équations

Les modèles drift-flux peuvent avoir 3, 4 ou 5 équations constitutives. On n'écrit qu'une seule équation de quantité de mouvement ; selon les hypothèses effectuées, on peut écrire une ou deux équations de masse et d'énergie.

L'unique équation de quantité de mouvement est formulée avec la vitesse moyenne du mélange v_m . Cette vitesse-ci est une moyenne pondérée par la masse des deux phases (à ne pas confondre avec la vitesse j qui est une moyenne pondérée par les volumes) ; elle s'exprime par $v_m = \frac{1}{\rho_m} (\rho_g \alpha v_g + \rho_l (1 - \alpha) v_l)$ [143]. L'équation a la même forme que l'équation classique pour un écoulement monophasique, avec deux termes supplémentaires. Le premier terme tient compte des effets liés à la vitesse relative entre les phases, et le second est un terme de covariance, qui traduit le fait que la moyenne du produit de plusieurs grandeurs n'est pas égale au produit de leurs moyennes individuelles ; ce second terme est généralement négligé. Hibiki et Ishii [142] fournissent la forme complète suivante pour l'équation de quantité de mouvement :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_m v_m) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_m v_m^2) \\ = -\frac{\partial P}{\partial z} - \rho_m g - F - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\varepsilon \rho_v \rho_l}{(1 - \varepsilon) \rho_m} \bar{v}_{gj}^2 \right) \\ - \frac{\partial}{\partial z} \left(COV(\varepsilon \rho_v v_v^2) + COV((1 - \varepsilon) \rho_l v_l^2) \right) \end{aligned} \quad (43)$$

où COV est un opérateur de covariance.

La formulation de l'équation de l'énergie varie selon les termes négligés ou non : conduction axiale, dissipation visqueuse, termes de pression, termes de covariance. Hibiki et Ishii [142] donnent une formulation pour une unique équation de l'énergie pour le mélange, tenant compte de tous ces termes ; étant assez lourde, elle ne sera pas recopiée ici. A titre d'exemple, Zou et al. [143] adoptent de leur côté la formulation suivante, en ignorant les termes de conduction, de dissipation visqueuse et de covariance :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m h_m - P) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_m h_m v_m) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\varepsilon \rho_v \rho_l}{\rho_m} (h_v - h_l) \bar{v}_{gj} \right) \\ = q + \left(v_m + \frac{\varepsilon(\rho_l - \rho_v)}{\rho_m} \bar{v}_{gj} \right) \frac{\partial P}{\partial z} \end{aligned} \quad (44)$$

Lorsque deux équations d'énergie sont écrites, les termes liés à la vitesse relative des deux phases ont une forme spécifique. Une formulation avec deux équations d'énergie peut être trouvée chez Kim et Roy [141].

Pour la conservation de la masse, trois formulations sont possibles. On peut écrire une unique équation de conservation pour le mélange [140], ou bien écrire une équation pour chacune des phases [141], [144], [150]. Une troisième possibilité, présentée par Hibiki et Ishii [142], est d'écrire une première équation de masse pour le mélange, et une seconde équation pour la phase gazeuse. Lorsqu'elle est écrite pour le mélange, l'équation de la masse a une forme classique, similaire à l'équation (24). Lorsqu'une équation est écrite pour l'une des phases individuelles, des termes liés à la vitesse relative des phases interviennent, comme dans les équations de quantité de mouvement et d'énergie. Le second membre comporte également un terme traduisant le transfert de masse entre liquide et vapeur lié au changement de phase, de la même manière que dans un modèle bi-fluide (termes $S\Gamma$ et $-S\Gamma$ des équations (33)-(34)). Une expression du taux de génération de vapeur Γ doit être introduite pour la fermeture du problème ; ce terme étant dépendant du régime d'écoulement, il est généralement estimé lui aussi à l'aide d'une corrélation empirique [142], [143].

II.3.4. Modèles à frontière mobile

II.3.4.1. Principe

Les *modèles à frontière mobile* se distinguent des autres types de modèles présentés dans le reste de cette section, de par le fait qu'il ne s'agit pas de modèles 1D à proprement parler. Au lieu d'introduire un maillage 1D régulier de la conduite, ces modèles déterminent des valeurs moyennes des grandeurs caractéristiques de l'écoulement (pression, débit, enthalpie, ...) sur un certain nombre de tronçons axiaux de la conduite, qui correspondent à des zones occupées par du fluide dans un certain état : liquide sous-refroidi, mélange de liquide et de vapeur saturés, vapeur surchauffée. Sous leur forme la plus classique, on distingue trois zones, pour ces trois états. Les conditions aux limites à la paroi sont représentées par des valeurs moyennées, différentes pour chacune des zones (Figure 26). La longueur et la position dans la conduite des zones sous-refroidie, saturée et surchauffée évolue au cours du temps, suivant la vitesse des transferts de masse et de chaleur dans le fluide, et les variations dans le temps des conditions aux limites. Afin de prendre en compte cette évolution, les longueurs des trois zones sont considérées comme des variables du problème : les équations du problème font intervenir ces longueurs et leur dérivée temporelle. Un modèle à frontière mobile peut ainsi être vu comme une juxtaposition de plusieurs modèles 0D, à laquelle s'ajoute le calcul de l'évolution temporelle de la longueur des zones de la conduite représentées par chacun de sous-modèles.

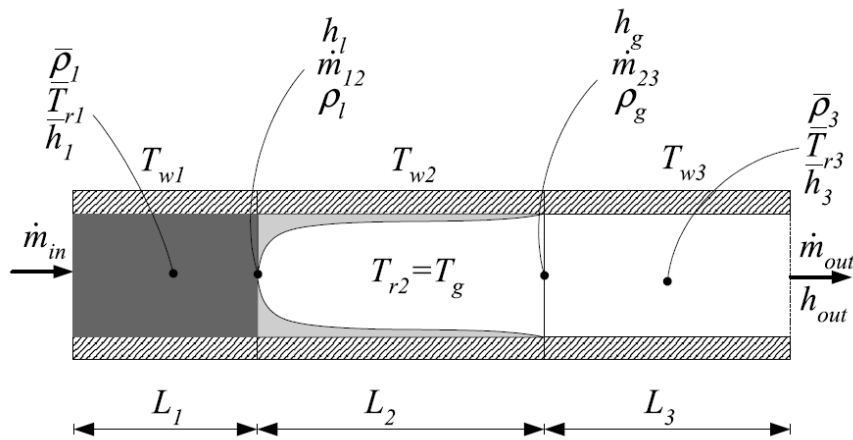


Figure 26 : Schéma général de la représentation des écoulements diphasiques par un modèle à frontière mobile, dans le cas d'un écoulement horizontal avec distinction de trois zones [152]

Les équations du problème sont obtenues en intégrant les équations de conservation 1D sur la longueur des différentes zones. On écrit généralement une équation de masse et une équation d'énergie pour chaque zone ; l'évolution de la pression le long de la conduite n'est en général pas considérée. Les inconnues du problème comptent toujours à minima la pression, la longueur d'une partie des zones (la longueur de l'une des zones peut se déduire de celle des autres, et de la longueur totale de la conduite), l'enthalpie moyenne dans l'une des zones ou à sa frontière, et le taux de vide moyen dans la zone saturée. Selon les choix effectués, on peut également déterminer le débit en sortie de la conduite [153], ou les débits aux interfaces entre les zones [154]. La formulation exacte des équations dépend des choix et hypothèses effectuées, et de la représentation qui est faite de l'écoulement (ébullition ou condensation, zones considérées, ...). A titre d'exemple, une formulation du problème pour un modèle avec trois zones, pour le cas de l'ébullition d'un écoulement sous-refroidi à l'injection, peut être trouvée chez Jensen et Tummescheit [152].

En dépit de l'absence de discrétisation 1D, les modèles à frontière mobile permettent de simuler les écoulements diphasiques avec une précision globalement comparable à celle des modèles 1D homogènes, pour un temps de calcul plus faible du fait du nombre total de variables moins important pour le problème. [155] Les modèles à frontière mobile sont utilisés pour modéliser des échangeurs de chaleur avec écoulements diphasiques pour diverses applications [154], [156], [157], et également des récepteurs solaires à concentration. [153] Les faibles temps de calcul en comparaison des modèles 1D rendent ces modèles intéressants pour les besoins de la régulation et du contrôle-commande, qui demandent une prédiction à la fois fiable et en temps réel de la réponse du système aux changements dans son environnement.

II.3.4.2. Variantes

Certains modèles à frontière mobile permettent de prendre en compte le fait que certaines zones peuvent disparaître ou apparaître dynamiquement au cours du temps. Cela peut par exemple arriver lorsque les conditions à l'injection ou bien le flux de chaleur à la paroi varient dans le temps : un écoulement en ébullition peut se vaporiser complètement lorsque le flux à la paroi est fort (trois zones, configuration (a) sur la Figure 27), ou bien sortir de la conduite en n'étant pas complètement vaporisé lorsque le flux est plus faible (deux zones, configuration (c) sur la Figure 27). La Figure 27 montre l'ensemble des situations d'écoulement envisageables en termes de nombre et de disposition des

zones. Pour gérer l'évolution dynamique du nombre et du type des zones, on remplace les équations des zones qui disparaissent par des relations qui tendent à maintenir à une valeur stable les variables du problème liées à la zone disparue. Si la zone réapparaît, on remplace de nouveau ces équations non physiques par les équations de conservation. [153], [154], [156]

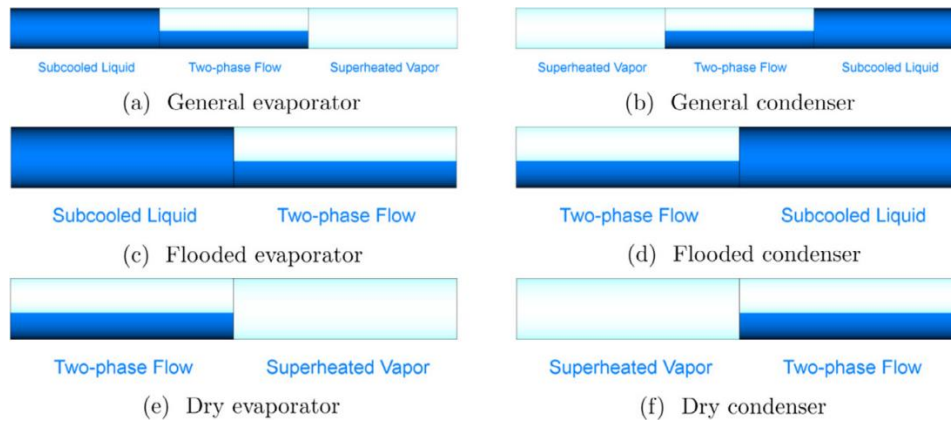


Figure 27 : Situations d'écoulement envisageables dans le cadre d'un modèle à frontières mobiles. [156]
A gauche : écoulement en évaporation. A droite : écoulement en condensation.

Il est également possible d'envisager un nombre de zones supérieur à trois. Un modèle à quatre zones est présenté par Abdalla [157] et par Berry [158], qui étudient un générateur de vapeur utilisé dans un réacteur nucléaire ; dans ce système, deux régimes de transfert de chaleur différents sont susceptibles de se développer sur la longueur où a lieu l'ébullition de l'eau liquide. Ces deux régimes sont caractérisés par des flux de chaleur à la paroi très différents. Afin de rendre compte de ces différences au sein de la longueur saturée de la conduite, on considère deux zones saturées au lieu d'une, correspondant aux tronçons de la conduite où l'on trouve les deux régimes de transfert de chaleur. On spécifie un coefficient d'échange avec l'extérieur différent pour chacune de ces deux zones. La position de la frontière qui les sépare (c'est-à-dire le point où se produit le changement de régime) est donnée par une relation empirique, en fonction du débit, et des propriétés physiques de deux phases.

Enfin, certains modèles incorporent un bilan de quantité de mouvement plus ou moins simplifié, afin de s'affranchir de certaines hypothèses et limitations de la formulation de base des modèles à frontière mobile. Plusieurs auteurs [153], [157] écrivent un bilan sur l'ensemble du tube, qui leur permet d'estimer le débit en sortie de la conduite. L'intérêt est d'obtenir une prédiction plus fine du débit de sortie dans les situations où les conditions aux limites varient rapidement dans le temps ; ces variations sont en effet accompagnées d'une phase transitoire où pressions et débits se rééquilibrent, pendant laquelle les débits en entrée et en sortie ne sont pas forcément égaux. Yebra et al. [159] introduisent une division de la conduite en deux zones, définies parallèlement aux trois zones du modèle à frontière mobile, et effectuent un bilan de quantité de mouvement sur ces deux nouvelles zones. Leur approche permet de déterminer la pression dans chacune des trois zones principales : on représente ainsi le gradient de pression le long de la conduite.

II.4. Synthèse

En termes de niveau de maturité technologique, la technologie du stockage de vapeur par MCP de type tubes-calandre est actuellement au stade du prototype pré-industriel. Elle se positionne ainsi à mi-chemin entre l'accumulateur de vapeur, technologiquement mature et éprouvé dans l'industrie depuis plusieurs décennies, et les autres technologies de stockage de vapeur par MCP, qui sont au stade de la théorie ou de l'échelle laboratoire. Un effort de recherche plus important a été consacré à la technologie du stockage tubes-calandre. Cet intérêt s'explique par la relative simplicité de ce concept, et par l'expérience acquise sur ce type de système de stockage de chaleur par MCP, au-delà de l'application du stockage de vapeur. La technologie du stockage tubes-calandre par MCP est en effet beaucoup étudiée pour d'autres applications où le fluide caloporteur est monophasique, tels que les centrales solaires thermiques (avec un fluide caloporteur monophasique autre que de la vapeur) pour la production d'électricité [57] ou de chaleur industrielle [160], la récupération de chaleur fatale [161], ou les réseaux de chaleur [162].

La viabilité de cette technologie pour le stockage de vapeur a été démontrée à l'échelle prototype ; le premier démonstrateur à l'échelle industrielle a été installé très récemment par l'organisme de recherche technologique allemand DLR, dans une centrale de cogénération [60] (cf. section II.1.2.1.2). Le déploiement de stockages de vapeur tubes-calandre par MCP dans l'industrie créera des nouveaux besoins quant à la modélisation d'un module de stockage. Il faudra être capable d'une part de concevoir des modules adaptés à différents procédés et applications, et d'autre part d'assurer la robustesse de leur conception aux différentes conditions et modes de fonctionnement auxquels il sera soumis dans un procédé donné. La mise au point d'une méthodologie pour le dimensionnement et la prédiction rapide et précise des performances d'un module de stockage facilitera ainsi le passage de cette technologie dans l'industrie, en permettant de dimensionner rapidement un module de stockage, et d'aider au dimensionnement du procédé dans lequel il sera intégré.

Les modèles pour la simulation thermo-fluidique à maille fine des phénomènes de fusion et de solidification sont nombreux. Une grande variété de techniques différentes existe pour représenter l'évolution d'un front de changement de phase au sein d'un MCP, et pour prendre en compte les différentes spécificités de ce type de problèmes. Pour les travaux de la thèse, le choix a été fait de s'orienter sur une modélisation qui soit autant que possible déjà maîtrisée, et si possible déjà implémentée dans un code de simulation disponible au CEA. En effet, la simulation doit en définitive servir à estimer les transferts de chaleur au sein d'un module de stockage, de manière aussi précise que possible, afin de pouvoir mettre au point un modèle réduit d'un module que l'on peut utiliser pour une modélisation à l'échelle système. En adoptant un modèle déjà éprouvé et un code maîtrisé, le travail peut se concentrer sur l'usage du modèle plutôt que sur son développement, dans l'objectif de l'utiliser au mieux pour prédire les performances thermiques d'un module de stockage.

Le choix s'est ainsi porté sur le modèle qui est de loin le plus utilisé dans la littérature, à savoir le modèle enthalpie-porosité de Voller. Il s'agit d'une méthode à interface diffuse, mono-fluide. L'annulation de la vitesse dans le MCP solide est assurée par la technique du terme source de Darcy (cf. section II.2.2.1), et l'absorption ou la libération de chaleur quasi-isotherme lors du changement de phase est prise en compte par la méthode du terme source (cf. section II.2.2.2). L'usage répandu du modèle enthalpie-porosité de Voller s'explique d'une part par sa facilité d'implémentation dans un code de mécanique des fluides numérique (CFD), et d'autre part par les résultats généralement bons qu'il

permet d'obtenir. Depuis que Voller et Prakash [99] ont introduit cette approche en 1987, elle s'est imposée comme un standard. Le code ANSYS Fluent®, qui est utilisé au CEA pour la simulation thermo-fluidique 2D / 3D, implémente le modèle enthalpie-porosité pour la simulation des phénomènes de changement de phase solide-liquide. C'est donc sur ce code-ci que s'est porté le choix du code CFD à utiliser.

Du côté de la modélisation à l'échelle système, les différents modèles existants pour la simulation 1D d'un écoulement diphasique liquide / vapeur dans une conduite se distinguent par la complexité de leur formulation. Toute une gamme de modèles existe entre les modèles homogènes à une, deux ou trois équations, et les modèles bi-fluide à six voire sept équations qui modélisent séparément les phases liquide et vapeur. Les modèles à frontière mobile permettent de réduire encore la complexité du modèle, en supprimant la discrétisation des zones occupées par le liquide, la vapeur et le fluide changeant de phase dans la conduite. Si les modèles les plus évolués permettent de tenir compte de plus de situations physiques (déséquilibres entre phases liquide et vapeur), les temps de calcul augmentent avec la complexité du modèle. Par ailleurs, si l'on excepte les modèles à frontière mobile, les modèles 1D les plus complexes sont également les plus difficiles à mettre en œuvre, du fait de l'importante quantité d'informations externes qu'il est nécessaire d'apporter aux modèles bi-fluide (sur les transferts de chaleur, le frottement, les interactions entre les phases, ...), et de la complexité numérique inhérente au traitement d'un nombre plus important d'équations constitutives et de termes mathématiques. Le critère pour le choix d'un modèle semble ainsi être le niveau de détail avec lequel on souhaite représenter la physique : il est inutile d'adopter un modèle représentant des phénomènes dont l'effet est négligeable pour l'écoulement que l'on souhaite modéliser.

Dans un système de stockage de vapeur tubes-calandre par MCP, l'écoulement d'eau liquide / vapeur s'effectue à des vitesses assez faibles (environ 20 g.s^{-1} pour les modules prototypes de l'installation LHASSA du CEA Grenoble [22]), et le flux de chaleur échangé à la paroi des tubes est modéré (environ 400 W.m^{-1} au maximum lors de la charge d'un module de LHASSA). On peut donc s'attendre à ce que les déséquilibres entre liquide et vapeur soient faibles. Pour cette raison, il a été choisi d'adopter un modèle homogène pour les travaux de la thèse. Les modèles à frontière mobile ne sont pas retenus afin de faciliter l'interfaçage du modèle liquide / vapeur avec un modèle système du MCP : on souhaite mailler le MCP de manière régulière dans le modèle système, ce qui rend préférable de mailler également les tubes régulièrement, avec le même pas d'espace dans la direction de l'écoulement liquide / vapeur, afin de pouvoir coupler les modèles du MCP et de la vapeur. Le modèle liquide / vapeur adopté a deux équations, le choix étant fait de négliger les variations de pression dans la conduite ; les détails sont présentés dans le chapitre IV (section IV.2.1, p. 108).

Des approches de modélisation ayant été choisies pour les différents échelles du modèle multi-échelles, la première partie du travail porte sur la validation et l'investigation de la sensibilité du modèle solide / liquide fin à ses paramètres. Le modèle enthalpie-porosité de Voller contient en effet plusieurs paramètres liés intimement à la physique du changement de phase, dont il convient de pouvoir déterminer les valeurs afin d'obtenir des résultats les plus fidèles possibles à la réalité. Ce travail fait l'objet du chapitre suivant. La maîtrise du modèle fin, plus complexe par nature que le modèle 1D de l'écoulement liquide / vapeur, permet d'aborder sereinement la construction d'un modèle multi-échelles d'un module de stockage, présentée dans le chapitre IV.

Chapitre III. Modélisation 2D / 3D du changement de phase solide / liquide

III.1. Problématique et objectifs

Dans un système de stockage thermique par MCP, les transferts de chaleur sont gouvernés par plusieurs phénomènes physiques. Comme expliqué en introduction, la convection naturelle dans la phase liquide du MCP a souvent une influence importante, notamment dans les systèmes de stockage de taille prototype ou industrielle où les dimensions sont grandes. Les transferts de chaleur convectifs entre les parois du système de stockage (paroi des tubes et des éventuels ailettes et inserts conducteurs) dépendent de la vitesse de l'écoulement, et de la taille et de la forme des boucles de convection. Ces derniers paramètres sont directement liés à la forme et aux dimensions de l'espace occupé par la phase liquide, et donc, dans le cas d'un stockage tubes-calandre, à la forme des éventuelles ailettes et inserts disposés dans le MCP, à partir desquels le front de fusion ou de solidification se forme et se propage.

L'impact de l'écoulement du MCP liquide par convection naturelle sur les transferts de chaleur rend indispensable sa simulation par CFD pour prédire les transferts de chaleur au sein d'un système de stockage. Dans un module de stockage avec tubes ailetés et inserts, les boucles de convection naturelle peuvent être de petite taille. En effet, l'espace occupé par la phase liquide du MCP est souvent confiné : c'est le cas en début de fusion ou en fin de solidification, où seule une fine couche de liquide est présente, ou bien dans les cas où les ailettes et les inserts sont rapprochés les uns des autres, donnant lieu aux développements de petites boucles de convection dans les espaces étroits situés entre les ailettes ou au sein des inserts. Pour cette raison, la simulation de ces phénomènes se doit d'employer des modèles numériques à maille fine. Afin de simuler des boucles de convection, il convient de modéliser l'écoulement et les transferts thermiques en 2D, voire en 3D si la géométrie des ailettes et des inserts donne lieu à un écoulement tridimensionnel non simplifiable sous la forme d'une représentation 2D axisymétrique.

Le modèle enthalpie-porosité de Voller, décrit dans la revue bibliographique du précédent chapitre (section II.2.2.2.1, p. 39), constitue l'approche la plus couramment utilisée pour la simulation 2D / 3D fine des phénomènes de changement de phase solide / liquide, prenant en compte l'écoulement de la phase liquide. Ce modèle a fait ses preuves depuis son introduction dans les années 1980 [99], et est aujourd'hui implémenté dans plusieurs codes commerciaux de mécanique des fluides numérique (CFD). Pour ces raisons, c'est ce modèle qui est utilisé dans ce travail de thèse, pour le versant petite échelle de l'approche de modélisation multi-échelles qui y est développée. Le modèle enthalpie-porosité présente plusieurs paramètres caractérisant le changement de phase, dont le choix de la bonne valeur n'est à priori pas immédiat : certains de ces paramètres sont empiriques, tandis que d'autres caractérisent la thermique du changement de phase qu'il est difficile de caractériser expérimentalement avec précision (cf. section III.2.3 ci-dessous, p. 68).

Afin de pouvoir s'appuyer sur des résultats CFD fiables, il convient d'appréhender le fonctionnement du modèle enthalpie-porosité, afin de pouvoir l'utiliser et le paramétrer au mieux. Pour ce faire, deux cas de fusion de MCP présentant des caractéristiques différentes ont été simulés à l'aide de ce modèle, pour pouvoir observer le comportement du modèle dans différentes situations. Pour chacun d'entre

eux, une étude des paramètres du modèle qui caractérisent le changement de phase a été menée. Afin de pouvoir identifier les valeurs des paramètres les plus adéquates pour chaque cas d'étude, les résultats de simulation sont comparés à des résultats expérimentaux, issus de la littérature pour le premier cas, et d'essais menés sur une installation expérimentale du CEA Grenoble pour le second. Dans un premier temps, les équations et les hypothèses du modèle enthalpie-porosité sont exposées, ainsi que les problématiques et défis associés à ses différents paramètres spécifiques. Dans un second temps, les deux cas d'étude, les installations expérimentales associées et les modèles numériques mis en place sont présentés. Enfin, les résultats de l'étude paramétrique sont détaillés, avant de présenter les leçons apprises de cette étude quant à l'utilisation du modèle enthalpie-porosité.

III.2. Le modèle enthalpie-porosité de Voller et ses problématiques

III.2.1. Equations constitutives

Selon la classification des modèles de changement de phase établie en section II.2 (p. 31), le modèle enthalpie-porosité de Voller est un modèle à interface diffuse mono-fluide. Cela signifie que l'ensemble du solide et du liquide est décrit par un unique fluide équivalent, modélisé par un jeu d'équations de Navier-Stokes sous une forme classique : aucune équation supplémentaire ou technique spécifique n'est utilisée pour suivre explicitement l'interface solide – liquide. La chaleur latente de changement de phase et l'absence de mouvements dans le solide sont tous deux pris en compte par l'ajout de termes puits aux équations de la physique.

Les trois équations constitutives sont celles de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Dans l'étude présentée ici, les phénomènes d'expansion et de contraction volumique lors du changement de phase ne sont pas représentés, ainsi que les éventuels mouvements de blocs solides au sein de la phase liquide : ainsi, la masse volumique du MCP est constante. Les forces de flottabilité à l'origine de la convection naturelle sont prises en compte à l'aide de l'approximation de Boussinesq.

Un terme de pénalisation est présent dans l'équation de quantité de mouvement, permettant d'immobiliser l'écoulement là où le MCP est solide. L'enthalpie massique totale h_{MCP} est écrite comme la somme d'une contribution sensible $h_{sens,MCP}$ et d'une contribution latente $h_{lat,MCP}$. L'équation de l'énergie est ainsi formulée avec l'enthalpie sensible $h_{sens,MCP}$, avec un terme puits faisant intervenir $h_{lat,MCP}$, qui traduit l'absorption ou la libération de chaleur à température constante ou quasi constante lors du changement de phase. Les équations constitutives sont les suivantes :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{MCP} = 0 \quad (45)$$

$$\begin{aligned} & \rho_{MCP} \left(\frac{d\vec{v}_{MCP}}{dt} + \vec{v}_{MCP} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_{MCP} \right) \\ & = -\vec{\nabla} P_{MCP} + \vec{\nabla} \cdot (\mu_{MCP} \vec{\nabla} \vec{v}_{MCP}) + \rho_{MCP} (1 - \beta_{MCP} (T_{MCP} - T_{ref,b})) \vec{g} + A \vec{v}_{MCP} \end{aligned} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} & \rho_{MCP} \left(\frac{dh_{sens,MCP}}{dt} + \vec{v}_{MCP} \cdot \vec{\nabla} h_{sens,MCP} \right) \\ & = \vec{\nabla} \cdot (\lambda_{MCP} \vec{\nabla} T_{MCP}) - \rho_{MCP} \left(\frac{dh_{lat,MCP}}{dt} + \vec{v}_{MCP} \cdot \vec{\nabla} h_{lat,MCP} \right) \end{aligned} \quad (47)$$

Dans l'équation de quantité de mouvement (46), le facteur A du terme de pénalisation est nul lorsque le MCP est liquide, et prend une valeur très grande lorsque le MCP est solide : de cette manière, la phase solide est immobilisée, sa vitesse étant amenée vers une valeur nulle. La valeur de A évolue

progressivement de 0 à sa valeur maximale dans l'épaisseur de la zone pâteuse, où solide et liquide coexistent au sein des mailles. L'expression de A est inspirée de l'équation de Carman-Kozeny pour les milieux poreux [99], [163] : on considère la zone pâteuse comme un milieu poreux dans lequel le MCP liquide s'écoule au milieu de dendrites de MCP solide. En notant Y_l la fraction liquide massique locale du MCP, l'expression de A est la suivante :

$$A = -A_{mush} \frac{(1 - Y_l)^2}{Y_l^3 + b} \quad (48)$$

Le terme A_{mush} est un facteur constant nommé *constante de zone pâteuse* ou *constante de mushy zone*, qui quantifie le ralentissement de l'écoulement dans la zone pâteuse. La valeur de cette constante doit être élevée ($\geq 10^3 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$) afin que l'amortissement de la vitesse dans la phase solide ($Y_l = 0$) soit suffisant pour l'immobiliser complètement. L'influence de la valeur de A_{mush} sur les résultats est l'un des objets de ce chapitre. Le terme b est introduit pour éviter la division par zéro lorsque $Y_l = 0$; sa valeur est fixée à $b = 10^{-3}$.

Dans l'équation de l'énergie, les enthalpies sensible et latente s'expriment de la manière suivante :

$$h_{sens,MCP}(T) = h_{ref} + \int_{T_{ref}}^T c_p(T) dT \quad (49)$$

$$h_{lat,PCM} = Y_l L \quad (50)$$

La température de référence T_{ref} est choisie arbitrairement ; son choix peut être distinct de celui de la température $T_{ref,b}$ de l'approximation de Boussinesq (équation (46)). On fixe $T_{ref} = 25^\circ\text{C}$ dans cette étude. La fraction liquide Y_l est proportionnelle à la masse de MCP liquide dans la maille considérée. Dans le cas où le changement de phase s'effectue sur un intervalle de température, on suppose que Y_l est une fonction linéaire de la température T sur cet intervalle. En notant T_{sol} et T_{liq} les bornes de la plage de température du changement de phase (appelées respectivement *température de solidus* et *température de liquidus*), Y_l s'exprime alors comme suit :

$$Y_l = \begin{cases} 0, & T \leq T_{sol} \\ \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}}, & T_{sol} < T < T_{liq} \\ 1, & T \geq T_{liq} \end{cases} \quad (51)$$

III.2.2. Problématique de la constante de zone pâteuse

Le choix de la valeur de la constante de zone pâteuse, introduite dans l'équation (48), n'est à priori pas immédiat. Le modèle suppose que la zone pâteuse est assimilable à un milieu poreux ; en effet, dans cette zone, le liquide s'écoule au milieu de dendrites de solide, qui le freinent. Comme l'indiquent Voller et Prakash [99] dans leur article originel sur le modèle enthalpie-porosité, la valeur à donner à A_{mush} dépend à priori de la « morphologie » de ce milieu poreux. En effet, le terme de pénalisation de la vitesse (équation (48)) est issu de la loi de Darcy pour les milieux poreux. Cette loi contient un facteur similaire à A_{mush} , dont la valeur est fonction des caractéristiques du milieu poreux et du fluide en écoulement. Malgré cette parenté du modèle à une loi physique connue, il n'existe aucune méthode permettant de déterminer la valeur de A_{mush} à adopter pour un cas donné : aucune loi reliant A_{mush} à des propriétés physiques du MCP ou à d'autres conditions du problème étudié n'a jamais été mise en évidence.

Dans la littérature, les études utilisant le modèle enthalpie-porosité peuvent adopter une grande variété de valeurs de A_{mush} , illustrée dans la Table 1. Le spectre des valeurs s'étend de 10^3 à 10^{11} $\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$. Le terme b qui apparaît au dénominateur du terme de pénalisation (48) est généralement pris égal à $b = 10^{-3}$, cependant la valeur adoptée n'est pas toujours précisée dans les études citées dans la Table 1. Lorsque des résultats expérimentaux sont disponibles pour valider le modèle CFD, la constante de zone pâteuse peut être utilisée pour caler le modèle sur l'expérience [164]–[167]. Dans d'autres cas, la valeur est simplement reprise d'études précédentes [168], [169], ou bien on ne donne tout simplement aucune justification quant au choix effectué [170], [171]. Peu de publications s'intéressent spécifiquement aux questions de l'influence de A_{mush} sur les résultats, et de la valeur à adopter pour un cas donné.

A_{mush} ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$)	10^3	10^4	10^5	10^6	$1,6 \times 10^6$
Références	[172]	[173], [174]	[164], [168], [170], [171], [175], [176]	[177], [178]	[103]

A_{mush} ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$)	$2,5 \times 10^6$	10^7	10^8	10^{10}	10^{11}
Références	[166]	[179]	[165], [180]–[182]	[167]	[183]

Table 1 : Exemples de valeurs de la constante de zone pâteuse adoptées dans la littérature

Malgré cela, certaines études qui se sont penchées sur ces questions ont montré que A_{mush} pouvait avoir une forte influence sur les résultats. Dans l'étude d'origine de leur propre modèle, Voller et Prakash [99] montrent qu'augmenter la constante de $1,6 \times 10^3$ à $1,6 \times 10^5$ $\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ modifiait de manière notable la forme du front de fusion dans une cavité rectangulaire. Kumar et Krishna [184], et Hameter et Walter [185] constatent que le temps total de fusion ou de solidification pour $A_{mush} = 10^8$ $\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ est environ deux fois plus faible que pour $A_{mush} = 10^3$ et 10^5 $\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ respectivement. Les cas étudiés sont respectivement la fusion d'une paraffine dans une cavité rectangulaire et la fusion et la solidification de nitrate de sodium dans un système de stockage tubes-calandre avec ailettes longitudinales. Shmueli et al. [165] font varier la constante de 10^5 à 10^{10} $\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ sur un cas de fusion d'une paraffine dans un cylindre chauffé à sa paroi. Ils constatent non seulement eux aussi une décroissance du temps de fusion avec l'augmentation de la constante, mais également une influence de la température de chauffe et du diamètre du cylindre sur la sensibilité à la constante : selon les valeurs de ces deux paramètres, le temps de fusion connaît une variation de 10 à 50% sur la plage de valeurs de A_{mush} explorée (Figure 28).

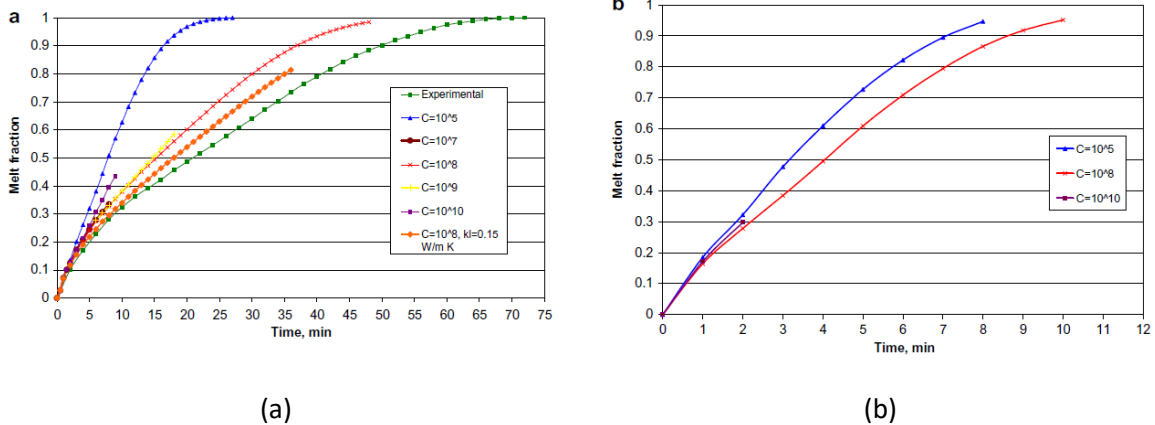


Figure 28 : Evolution de la fraction liquide selon la valeur de la constante de mushy zone pour le cas de la fusion d'une paraffine dans un cylindre [165]

$$C = A_{mush} \cdot \text{Unité} : \text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$$

(a) : Cylindre de 4 cm de diamètre et température de chauffe plus faible ($\Delta T = 10^\circ\text{C}$) ; (b) : Cylindre de 3 cm de diamètre et température de chauffe plus élevée ($\Delta T = 30^\circ\text{C}$)

D'autres études rapportent au contraire un faible impact de la constante sur leur cas d'étude. Arena et al. [186] constatent une influence quasi nulle sur le cas de la fusion et de la solidification d'une paraffine dans un module de stockage tubes-calandre de taille laboratoire avec ailettes circulaires, pour des valeurs de la constante allant de 10^4 à $10^8 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ (Figure 29). L'interprétation donnée est le fait que le transfert de chaleur est principalement conductif, les mouvements de convection naturelle étant limités par les faibles dimensions du système et la présence des ailettes. La constante peut également avoir une faible influence sur des cas où la convection a un plus fort impact sur les transferts de chaleur. Schüller et al. [187] font ce constat sur le cas de la fusion de glace dans une cavité rectangulaire, avec des valeurs de A_{mush} allant de 10^6 à $10^{12} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$. Shatikian et al. [175], qui étudient la fusion d'une paraffine dans un système de stockage avec ailettes verticales, rapportent ne pas voir de différence significative entre des valeurs de 10^5 et $1,6 \cdot 10^6 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

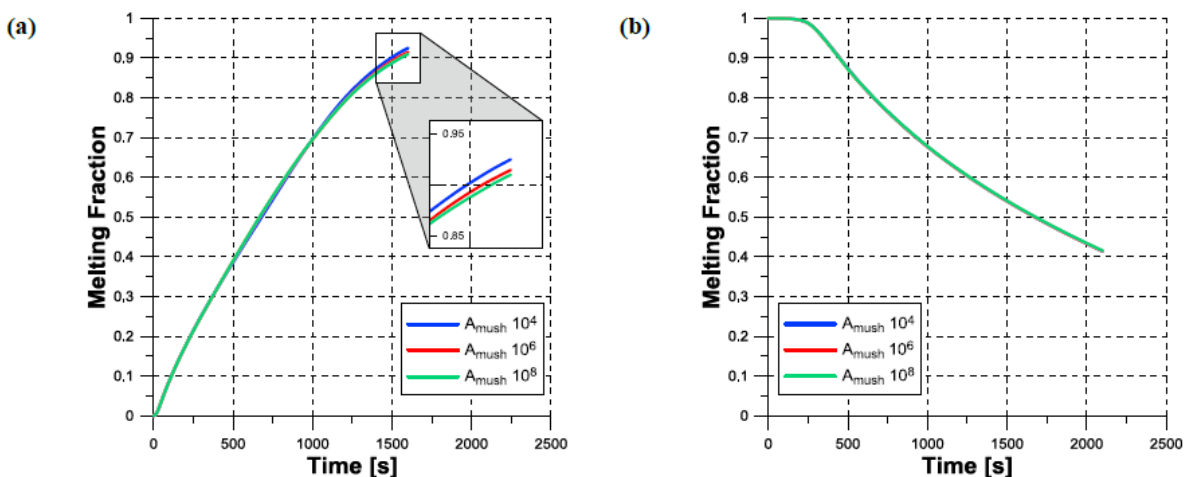


Figure 29 : Evolution de la fraction liquide selon la valeur de la constante de mushy zone, pour un cas avec transferts principalement conductifs [186]

(a) : Fusion ; (b) : Solidification

La sensibilité des résultats à la constante de zone pâteuse est ainsi fortement dépendante du cas étudié. Par ailleurs, la diversité de valeurs trouvées dans la littérature (Table 1) semble indiquer que la valeur de la constante permettant le meilleur accord avec l'expérience varie également selon le cas d'étude. Assis et al. ont montré que la valeur optimale pouvait dépendre des phénomènes physiques en jeu. Dans deux études successives, ils identifient une valeur optimale de $10^5 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ pour un cas de fusion non contrainte dans une capsule sphérique [168], puis de $10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ pour la solidification dans la même capsule [180]. Ils observent que la valeur de $10^5 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ n'immobilise pas complètement la vitesse du solide, celui-ci coulant dans le liquide comme le ferait une bulle d'un liquide très visqueux. La simulation reproduit ainsi le phénomène de chute du bloc solide en fusion au fond de la capsule, que l'on observe expérimentalement (fusion non contrainte) ; ce phénomène n'est pas présent dans le cas de solidification (changement de phase contraint), ce qui explique les deux valeurs différentes nécessaires pour reproduire les résultats expérimentaux. Les valeurs de 10^5 et $10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ ont été identifiées comme optimales par d'autres auteurs [164], [165], tandis que d'autres études rapportent avoir adopté d'autres valeurs, comme 10^6 [178] ou $10^{11} \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ [183], après en avoir testé plusieurs. Cela montre que les deux valeurs identifiées par Assis et al. ne sont pas uniques, laissant à penser que l'optimum à adopter pourrait dépendre d'autres facteurs que le caractère contraint ou non contraint du changement de phase.

III.2.3. Problématique de la caractérisation du MCP

Les aspects thermiques du changement de phase sont décrits par d'autres paramètres du modèle. Une valeur de chaleur latente intervient dans le terme source de l'équation de l'énergie (47), et un intervalle de température sur lequel s'effectue le changement de phase est introduit (51). Ces propriétés physiques du MCP sont habituellement déterminées à l'aide de mesures calorimétriques, la plus courante d'entre elles étant la calorimétrie différentielle à balayage (ou DSC pour *Differential Scanning Calorimetry*).

L'imprécision sur les valeurs de chaleur latente (L), et de températures de solidus (T_{sol}) et de liquidus (T_{liq}) déduites de ces mesures peut-être élevée. En effet, les résultats de caractérisation sont sujets à une incertitude liée à l'inertie thermique de l'échantillon de MCP utilisé pour la mesure. Du fait de la vitesse de chauffe ou de refroidissement et de la masse de l'échantillon, la chaleur n'est pas absorbée ou relâchée instantanément par celui-ci, et la température en son sein n'est pas uniforme lors d'un changement de phase. Il peut être ainsi difficile de déterminer avec précision l'enthalpie massique du MCP en fonction de sa température. Par ailleurs, les impuretés présentes dans la plupart des MCP réels altèrent la chaleur latente, ainsi que la répartition de l'absorption (en fusion) ou du dégagement (en solidification) de chaleur latente selon la température. Pour un MCP changeant de phase sur une plage de température (c'est-à-dire autre qu'un corps pur ou un mélange eutectique), le solide absorbe ou relâche une quantité relativement faible de chaleur latente sur une importante plage de température ; sur cette plage, la quantité de chaleur latente absorbée ou relâchée augmente progressivement avec la température jusqu'à atteindre un maximum pour une température donnée [188]. Cet effet étant d'autant plus important que la concentration en impuretés est élevée, il peut être difficile de définir une température de solidus pour certains matériaux. L'incertitude sur la nature et la concentration des impuretés, combinée aux effets d'inertie thermique de l'échantillon, font qu'il n'est pas toujours simple de déduire des propriétés du MCP à l'aide du thermogramme mesuré par DSC. La méthode de caractérisation utilisée et le protocole expérimental peuvent également influencer les mesures. Pour la chaleur latente, l'incertitude de mesure est généralement de l'ordre de 10% [189], [190].

Afin d'illustrer la difficulté à déterminer par DSC les caractéristiques d'un changement de phase étalé en température, la Figure 30 représente les thermogrammes obtenus en fusion et en solidification pour une solution aqueuse avec 2% d'impuretés, pour une vitesse de chauffe ou de refroidissement de $5 \text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$. Dans l'étude dont est issue cette figure [188], ces thermogrammes sont obtenus par la simulation numérique du changement de phase de l'échantillon de MCP dans la cellule de l'appareil de mesure DSC ; la courbe $\frac{\partial h}{\partial T}$ du MCP est déduite de sa relation $h = f(T)$, que l'on peut déterminer du fait des hypothèses faites sur sa composition chimique (solution saline). Comme on peut le voir, les deux thermogrammes sont assez éloignés de la courbe $\frac{\partial h}{\partial T}$ réelle du matériau. Sur le thermogramme obtenu en solidification (en bleu sur la figure), le flux présente un point anguleux à la température du pic, ce qui permet de repérer cette température. Cependant, en-dessous de cette température, le profil de $\frac{\partial h}{\partial T}$ n'est pas le même que celui du flux de chaleur transmis au MCP, en charge comme en décharge ; cet effet est dû à l'inertie thermique de l'échantillon. Ces mesures ne permettent donc pas de déterminer de manière évidente la relation entre l'enthalpie du MCP et sa température.

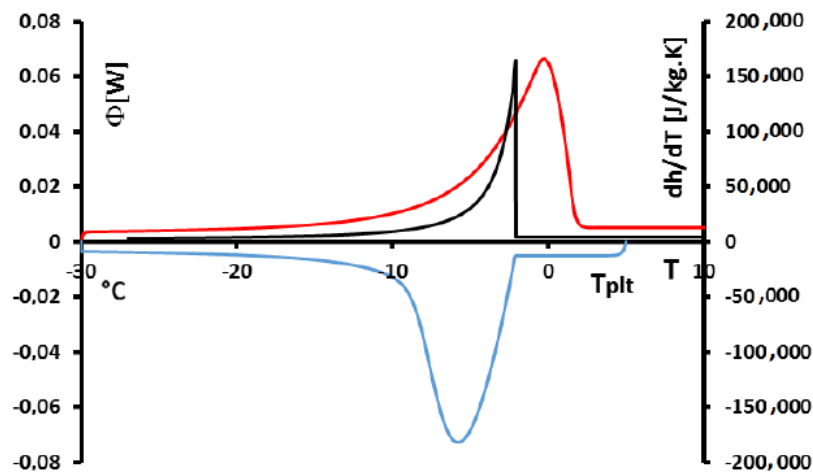


Figure 30 : Thermogrammes mesurés par DSC pour une solution aqueuse avec 2% d'impuretés (concentration molaire), pour une vitesse de chauffe ou de refroidissement de $5 \text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ [188]

Rouge (resp. bleu) : thermogramme en chauffe (resp. en refroidissement). Noir : courbe $\frac{\partial h}{\partial T}$ du MCP.

Au vu des incertitudes sur les paramètres de caractérisation, il apparaît important de connaître la sensibilité des résultats de simulation à ces paramètres, ainsi que les valeurs à adopter pour optimiser l'accord avec l'expérience. L'impact de la caractérisation sur les résultats n'est quasiment pas étudié dans la littérature. La seule étude qui s'est attachée à étudier l'effet des températures de solidus et de liquidus est celle de Kheirabadi et Groulx [191]. Ces auteurs étudient de manière croisée les effets de la constante de zone pâteuse et de l'intervalle de changement de phase $T_{liq} - T_{sol}$, sur le cas de la fusion d'acide laurique dans une cavité rectangulaire. Ils montrent que la plage de changement de phase a non seulement un impact sur le temps de fusion et la forme du front de fusion, mais également que cet impact est dépendant de la valeur de A_{mush} : les deux paramètres ne sont ainsi pas indépendants. Ce constat, ainsi que celui de la dépendance de l'influence de A_{mush} au cas d'étude, motive l'étude croisée des deux paramètres sur deux cas d'étude différents, présentée ici.

III.3. Description des expériences numériques

III.3.1. Description des cas d'étude

L'influence croisée de la constante de zone pâteuse A_{mush} et l'intervalle de changement de phase $T_{liq} - T_{sol}$ a été étudiée sur deux cas présentant des caractéristiques différentes. Le premier cas étudié est celui de la fusion de gallium dans une cavité rectangulaire ; il s'agit d'une expérience menée par Gau et Viskanta [192], qui est souvent utilisée dans la littérature pour la validation de codes de simulation du changement de phase solide-liquide. Comme le montrent les résultats expérimentaux, les mouvements de convection naturelle du MCP liquide ont un impact important sur les transferts de chaleur et le changement de phase. Le second cas est celui de la fusion d'une paraffine dans un système de stockage tube-calandre basse température de taille laboratoire, installé au CEA Grenoble. Dans ce système, l'unique tube est muni d'ailettes circulaires qui limitent les mouvements liquides : le transfert de chaleur est ainsi principalement conductif. Le choix de ces deux cas permet d'observer l'effet des deux paramètres étudiés selon la géométrie du système, et l'importance de la convection naturelle. Les différents résultats de simulation sont comparés aux résultats expérimentaux afin de déterminer les valeurs des paramètres optimisant l'accord avec l'expérience.

III.3.1.1. Cas 1 – Fusion dans une cavité rectangulaire

Le dispositif expérimental de Gau et Viskanta [192] est représenté sur la Figure 31. Le MCP se situe dans une cavité parallélépipédique mesurant 8,89 cm de longueur, 4,45 cm de hauteur et 3,81 cm de profondeur ; le ratio de la hauteur sur la longueur est de $\frac{1}{2}$. Les deux parois latérales sont maintenues à température constante durant les tests. Les pertes thermiques vers l'environnement extérieur sont réduites grâce à l'isolation de certaines des autres parois et au contrôle de la température de la pièce pendant les essais.

Du gallium est utilisé comme MCP ; il s'agit d'un métal dont la température de changement de phase est de 29,78°C. Gau et Viskanta indiquent que le gallium utilisé est quasi pur ; il est ainsi attendu que la fusion s'effectue de manière quasi isotherme à cette température. Le gallium est initialement entièrement solide, maintenu à une température uniforme de 27,5°C. Au début du test, la température de la paroi de gauche est augmentée à 38,3°C, tandis que la paroi de droite est maintenue à la température initiale : le gallium fond progressivement. Plusieurs thermocouples sont disposés sur la ligne horizontale au centre de la cellule, à une distance de 2,225 cm des parois supérieure et inférieure, afin de mesurer le profil de température sur cette ligne pendant les essais. Le volume de gallium fondu et la forme de l'interface solide-liquide sont également mesurés, en vidant le gallium fondu de la cellule de test. Plusieurs essais sont effectués dans des conditions identiques (citées plus haut) ; le gallium est vidé à un instant différent pour chaque essai, ce qui permet de mesurer l'évolution du volume fondu et de la forme de l'interface au cours du temps pendant la fusion.

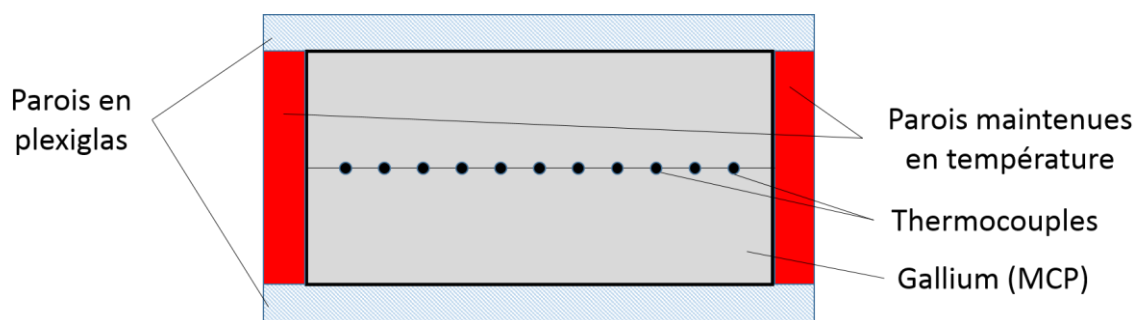


Figure 31 : Schéma du dispositif expérimental de Gau et Viskanta (cas 1)

Le transfert de chaleur est conductif au début du test ; à mesure que la fusion progresse, la convection naturelle qui se met en place dans le gallium fondu influence les transferts de chaleur, ainsi que la forme de l'interface solide-liquide. Dans l'analyse qu'ils font des transferts de chaleur, Gau et Viskanta n'évoquent aucun effet lié au changement de volume du gallium lors de la fusion ; de ce fait, ce phénomène est ignoré dans les simulations numériques effectuées ici.

III.3.1.2. Cas 2 – Fusion dans un système de stockage tube-calandre

Le système de stockage du second cas est représenté Figure 32. Il est constitué d'une calandre en polyméthacrylate de méthyle (abrégé en PMMA) remplie de paraffine, au milieu de laquelle passe un unique tube de fluide caloporteur. Le tube est en acier et est muni d'ailettes en aluminium dont la fonction est d'améliorer les échanges thermiques entre le fluide caloporteur et le MCP. A l'intérieur du tube se trouve un insert cylindrique en polyétheréthercétone (abrégé en PEEK), dont le rôle est d'assurer que l'écoulement de fluide caloporteur soit dans un régime de convection forcée laminaire. Les dimensions géométriques de la section d'essais sont rassemblées dans la Table 2. La paraffine utilisée comme MCP est de la RT35-HC, vendue par la société Rubitherm [193] ; il s'agit d'eicosane (alcane avec 20 atomes de carbone). Sa transition de phase s'effectue sur une plage de température (changement de phase non isotherme) située autour de 35°C. Le fluide caloporteur utilisé est de l'eau liquide. Lors des essais de fusion effectués, le système est disposé verticalement et le fluide caloporteur est injecté par le haut du tube. La masse volumique de la RT35-HC solide est de 880 kg.m^{-3} , et celle de la phase liquide est de 770 kg.m^{-3} ; l'expansion volumique de la paraffine lors de la fusion est ainsi de 14% environ. Pour la simulation numérique, on suppose que l'influence de cette expansion volumique sur les transferts de chaleur est négligeable ; Longeon et al. [117] ont montré que c'est bien le cas lors de la charge avec injection par le haut d'un stockage tube-calandre avec tube nu.

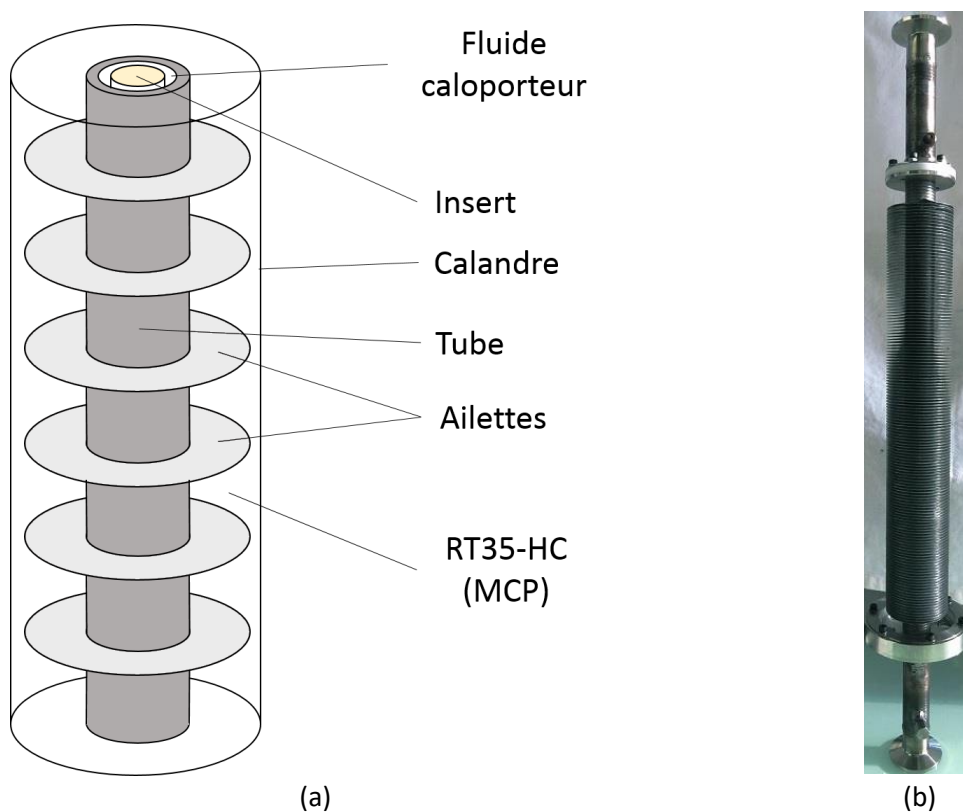


Figure 32 : Système de stockage tube-calandre avec ailettes circulaires (cas 2)
(a) : Schéma ; (b) : Photo de la section d'essais

Calandre	Hauteur	400 mm
	Diamètre	60 mm
Tube	Diamètre interne	19 mm
	Diamètre externe	25,4 mm
Insert	Diamètre	17 mm
Ailettes	Diamètre	57,5 mm
	Épaisseur	0,35 mm
	Distance entre deux ailettes	3,63 mm
	Nombre d'ailettes	99

Table 2 : Dimensions du système de stockage tube-calandre

La température d'injection de l'eau est mesurée dans le tube à 31 mm en amont de la section d'essais (haut de la calandre), et sa température de sortie à 77 mm en aval (bas de la calandre), par des thermocouples type K. Dans le MCP, la température est mesurée par 40 thermocouples type K placés à diverses positions. Sur cinq plans horizontaux le long de l'axe du tube, notés de A à E, 8 thermocouples sont disposés selon le motif illustré sur la Figure 33-(b). Les cinq plans se situent respectivement à 351, 273, 195, 117 et 39 mm de la paroi inférieure de la calandre. Sur chaque plan, les thermocouples les plus proches du tube, notés *-in*, sont éloignés de 6 mm de la paroi du tube ; les plus éloignés, notés *-out*, sont à une distance de 14 mm de la paroi. L'étalonnage des thermocouples permet d'avoir une incertitude sur les mesures de l'ordre de 0,1°C. Durant l'essai, l'écart moyen entre les mesures de thermocouples situés à la même distance du tube sur un même plan horizontal (10 groupes de 4 thermocouples) est de 0,5°C ; la température peut ainsi être considérée indépendante de la position azimutale. Afin de pouvoir tenir compte des pertes thermiques dans la simulation, la température de la pièce est également mesurée ; elle reste plutôt stable pendant l'essai, à une valeur de $20,4 \pm 0,8^\circ\text{C}$.

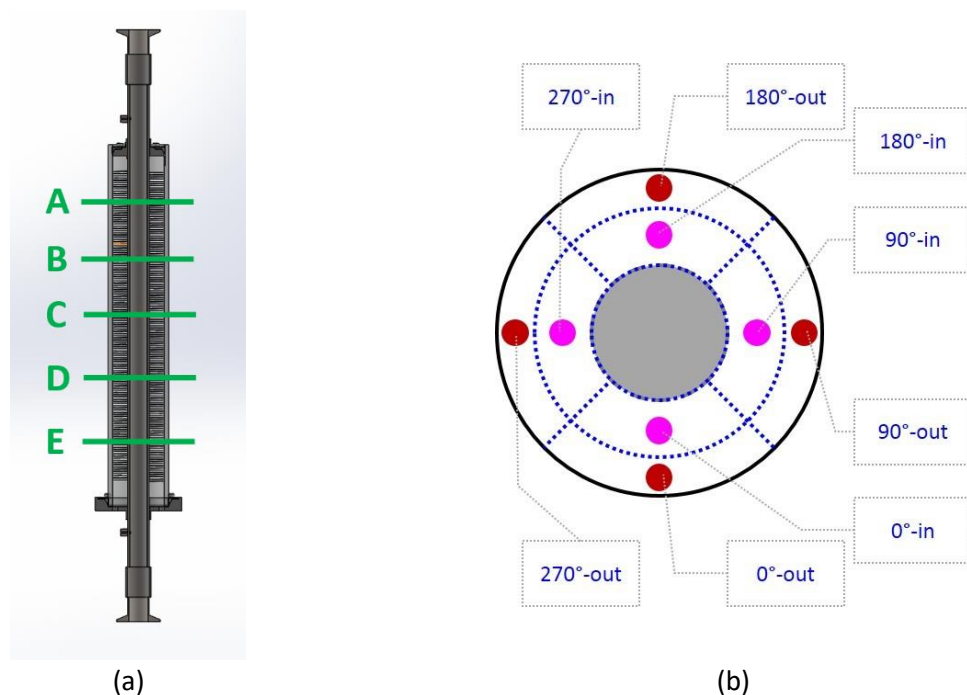


Figure 33 : Position des thermocouples côté MCP dans la section d'essais du cas 2
 (a) : Disposition des cinq plans horizontaux où les thermocouples sont placés
 (b) : Disposition des thermocouples sur chacun des cinq plans

Au début de l'essai, la RT35-HC est initialement entièrement solide, à la température de 19,9°C. De l'eau chaude à 50°C est injectée en haut du tube, avec un débit de 9,14 kg.h⁻¹. Le fluide caloporteur cède sa chaleur à la paraffine qui fond progressivement. La température du fluide caloporteur diminue dans le sens de son écoulement, à mesure qu'il cède de la chaleur au MCP ; de ce fait, le MCP situé dans le haut fond plus vite que celui du milieu de la section, qui fond lui-même plus vite que celui du bas.

III.3.2. Modèle numérique

Les simulations sont effectuées à l'aide du code de CFD commercial ANSYS Fluent® v. 17.2, qui implémente le modèle enthalpie-porosité pour la simulation des problèmes de changement de phase solide-liquide. Les équations du modèle sont détaillées en partie III.2.1. Cette section détaille les domaines de calcul, les maillages et pas de temps adoptés, les conditions initiales et aux limites, et le paramétrage du modèle pour la simulation des deux expériences.

Les valeurs adoptées pour les propriétés physiques des différents matériaux sont rassemblées dans la Table 3. Pour le cas 1, les propriétés du gallium proviennent de [194]. Pour le cas 2, certaines des propriétés de la RT35-HC sont fournies par le fabricant [193], certaines autres proviennent de mesures effectuées sur l'eicosane dans la littérature [195], [196]. La capacité thermique sensible des phases solide et liquide ainsi que la chaleur latente de la RT35-HC ont été mesurées par DSC, à l'aide d'un calorimètre μ DSCevo. La valeur de chaleur latente mesurée ($L = 245,7 \text{ kJ.kg}^{-1}$) est comprise dans l'intervalle d'incertitude donné par le fabricant, à savoir $222 \text{ kJ.kg}^{-1} \leq L \leq 258 \text{ kJ.kg}^{-1}$ [193]. Elle est également proche d'autres mesures effectuées sur l'eicosane [197]–[200], qui estiment une chaleur latente comprise entre 247 et 248 kJ.kg⁻¹. Les propriétés de l'eau, de l'acier du tube et du PEEK viennent de [201]–[203].

Matériau	ρ (kg.m ⁻³)	C_p (kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	λ (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)	μ (Pa.s)	β (K ⁻¹)	L (kJ.kg ⁻¹)
Gallium (cas 1)	6093	0,3815	32	1,81x10 ⁻³	1,2x10 ⁻⁴	80,160
RT35-HC (cas 2)	789,5	Solide : $c_{p,s} = 2,219$ Liquide : $c_{p,l} = 2,323$ Zone pâteuse : $C_{p,mush} = Y_l C_{p,l} + (1-Y_l)C_{p,s}$	0,2	3,1x10 ⁻³	7,14x10 ⁻⁴	245,7
Eau (cas 2)	994,1	4,179	0,6233	7,19x10 ⁻⁴	--	--
Tube en acier (cas 2)	8030	0,5048	16,27	--	--	--
PEEK (cas 2)	1320	1,340	0,25	--	--	--
Aluminium (cas 2)	2719	0,871	202,4	--	--	-

Table 3 : Valeurs des propriétés des matériaux adoptées pour la simulation

Le choix et le paramétrage des algorithmes de résolution numérique dans Fluent® sont les mêmes pour les deux cas. Le schéma PISO est adopté pour le couplage pression-vitesse, et le schéma PRESTO! pour la discrétisation de la pression ; ces schémas sont recommandés par l'éditeur de Fluent®, respectivement pour les calculs transitoires et pour la simulation d'un écoulement par convection naturelle. Les autres schémas utilisés sont ceux recommandés par défaut par l'éditeur : Least Squares Cell Based pour le calcul des gradients, et Second Order Upwind pour la discrétisation des équations de quantité de mouvement et d'énergie. L'intégration temporelle est implicite (schéma First Order Implicit). Les détails des méthodes numériques utilisées dans Fluent® peuvent être trouvés dans le manuel de théorie du code [111]. Les facteurs de sous-relaxation sont laissés aux valeurs par défaut suggérées par le logiciel (0,3 pour la pression, 1 pour la masse volumique, les forces volumiques et l'énergie, 0,7 pour la quantité de mouvement, et 0,9 pour la fraction liquide).

III.3.2.1. Cas 1

Le problème de fusion de gallium dans une cavité rectangulaire est supposé être bidimensionnel (Gau et Viskanta ne constatent pas d'effets tridimensionnels dans leur expérience [192]). Le domaine de calcul correspond à la cavité occupée par le gallium dans la section d'essais. La température des parois gauche et droite est fixée à $T_c = 38,3^\circ\text{C}$ et $T_f = 27,5^\circ\text{C}$ respectivement, conformément à l'expérience, tandis que les parois inférieure et supérieure sont adiabatiques (on suppose les pertes thermiques négligeables). Les conditions initiales dans le gallium sont uniformes, et sont les suivantes : $\vec{v} = \vec{0}$, $T = T_c = 27,5^\circ\text{C}$, et une pression relative de $P = 0$ Pa. La température de référence pour l'approximation de Boussinesq vaut $T_{ref,b} = \frac{T_c + T_{cp}}{2} = 34,0^\circ\text{C}$; la valeur de $T_{ref,b} = T_{cp} = 29,78^\circ\text{C}$ a été également testée et donne les mêmes résultats, pour un temps de calcul très légèrement plus élevé (4%). On adopte un critère de convergence absolu ; les valeurs limites des résidus pour convergence sont fixées à 10^{-3} pour les équations de masse et de quantité de mouvement, et à 10^{-6} pour l'équation de l'énergie.

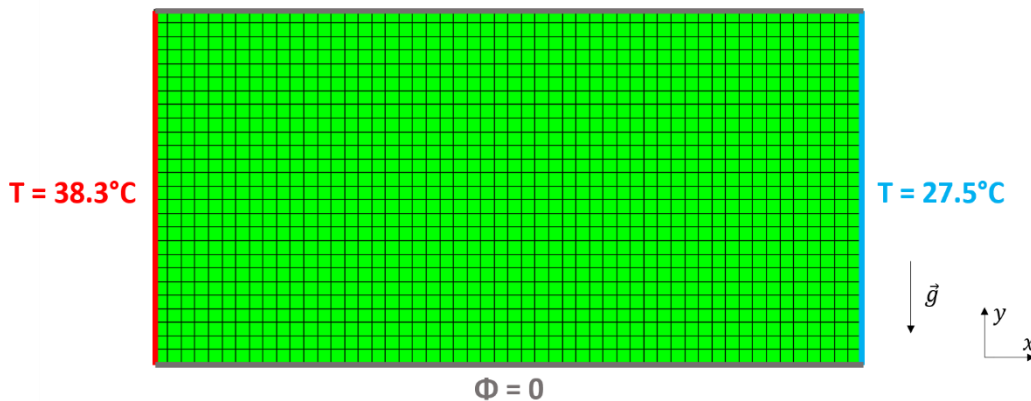


Figure 34 : Domaine de calcul, conditions aux limites et maillage (pour $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$ et 1°C) pour le cas 1

Comme dit précédemment, l'un des objectifs de l'étude est d'observer l'influence croisée de la constante de zone pâteuse A_{mush} , et de l'écart entre les températures de solidus et de liquidus ($T_{liq} - T_{sol}$) entre lesquelles s'effectue le changement de phase. Des simulations ont été effectuées pour sept valeurs différentes de A_{mush} et trois valeurs de $T_{liq} - T_{sol}$, pour un total de 21 simulations. Les valeurs testées sont les suivantes :

- $A_{mush} \in \{10^4 ; 5 \times 10^4 ; 10^5 ; 5 \times 10^5 ; 10^6 ; 10^7 ; 10^8\} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$

- $T_{liq} - T_{sol} \in \{0 ; 1 ; 2\} ^\circ C$. Pour toutes les simulations, l'intervalle de température est centré sur la température de changement de phase du gallium, $T_{cp} = 29.78^\circ C$ (on a donc $\frac{1}{2} (T_{sol} + T_{liq}) = T_{cp}$, ou bien $T_{sol} + \frac{\Delta T}{2} = T_{cp}$).

Le maillage est constitué de mailles carrées, dont le nombre varie pour les différents calculs effectués. Pour les simulations avec $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ C$ ou $1^\circ C$, on utilise un maillage de 1352 cellules, de $\Delta x = \Delta y = 1,7$ mm de côté (représenté Figure 34). Le pas de temps adopté est de $\Delta t = 0,1s$. L'indépendance des résultats de calcul aux pas de temps et d'espace a été vérifiée en les comparant à ceux obtenus respectivement pour $\Delta x = \Delta y = 1,2$ mm (maillage de 2738 cellules), et pour $\Delta t = 0,05s$. Pour les simulations avec $T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ C$, un maillage plus fin de 6104 cellules ($\Delta x = \Delta y = 0,8$ mm) est utilisé, ainsi qu'un pas de temps de $0,05s$. En effet, lorsque $T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ C$, les résultats ne sont plus indépendants du maillage : une différence de température non négligeable (jusqu'à $1,8^\circ C$) subsiste avec ceux obtenus pour $\Delta x = \Delta y = 0,4$ mm. L'essai de plusieurs maillages de finesse croissante a montré que l'on s'approchait de l'indépendance au maillage avec $\Delta x = \Delta y = 0,2$ mm. Afin de limiter les temps de calcul, le maillage avec $\Delta x = \Delta y = 0,8$ mm a été adopté pour $T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ C$. Afin de s'assurer que ce choix n'altère pas les résultats de l'étude, des calculs additionnels ont été effectués avec le maillage $\Delta x = \Delta y = 1,2$ mm, avec les sept valeurs de la constante de zone pâteuse évoquées plus haut. L'écart avec l'expérience est pratiquement le même que pour $\Delta x = \Delta y = 0,8$ mm, ce qui montre que l'étude paramétrique reste valide malgré la dépendance des résultats au maillage. Les résultats pour $\Delta x = \Delta y = 0,8$ mm sont indépendants du pas de temps, une valeur de $\Delta t = 0,025s$ donnant des résultats proches.

III.3.2.2. Cas 2

Pour le cas du système de stockage tube-calandre, on simule à la fois le MCP, l'écoulement du fluide caloporteur et le transfert de chaleur dans l'épaisseur du tube, les ailettes et l'insert cylindrique qui se trouve dans le tube. On suppose l'écoulement de fluide caloporteur incompressible, laminaire, et dénué de mouvements de convection naturelle (l'insert assurant un écoulement selon un régime de convection forcée laminaire). Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour le fluide caloporteur sont ainsi les suivantes :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_{calo} = 0 \quad (52)$$

$$\rho_{calo} \left(\frac{d\vec{v}_{calo}}{dt} + \vec{v}_{calo} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_{calo} \right) = -\vec{\nabla} P_{calo} + \vec{\nabla} \cdot (\mu_{calo} \vec{\nabla} \vec{v}_{calo}) \quad (53)$$

$$\rho_{calo} \left(\frac{dh_{calo}}{dt} + \vec{v}_{calo} \cdot \vec{\nabla} (h_{calo}) \right) = \vec{\nabla} \cdot (\lambda_{calo} \vec{\nabla} T_{calo}) \quad (54)$$

Dans les parties solides (ailettes, tube, insert), l'unique équation constitutive est l'équation de la chaleur :

$$\rho_{solide} \left(\frac{dh_{solide}}{dt} \right) = \vec{\nabla} \cdot (\lambda_{solide} \vec{\nabla} T_{solide}) \quad (55)$$

Le domaine est 2D axisymétrique (Figure 35). La frontière en bas de la figure correspond à l'axe de symétrie. La longueur de tube prise en compte est de 61 mm côté injection (haut) et de 107 mm côté sortie (bas). Ces longueurs sont choisies de manière à ce que les deux extrémités du domaine soient situées à 30 mm des deux thermocouples placés dans le fluide caloporteur ; ce choix est fait afin de s'assurer que l'écoulement est bien établi côté injection lorsqu'il atteint la position du thermocouple.

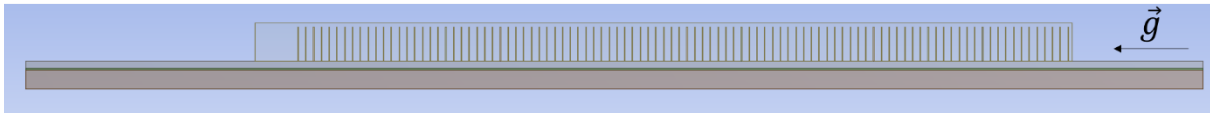


Figure 35 : Domaine de calcul pour le cas 2

Les conditions aux limites sont représentées sur la Figure 36. On applique aux parois de la calandre une condition d'échange convectif afin de représenter les pertes thermiques vers l'environnement extérieur. Dans chaque cellule adjacente aux parois, le flux de chaleur cédé à l'extérieur est le suivant :

$$\varphi = \alpha(T_{cellule} - T_{amb}) \quad (56)$$

Le coefficient d'échange avec l'extérieur vaut $\alpha = 20 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$; cette valeur est choisie afin que la température du MCP à la fin de la charge concorde avec l'expérience. La température ambiante est fixée à $T_{amb} = 20^\circ\text{C}$. Le fluide caloporteur est injecté avec un débit de $9,14 \text{ kg.h}^{-1}$; la vitesse à l'injection est constante selon le rayon. La température d'injection suit l'évolution mesurée expérimentalement, visible Figure 37. Partant initialement de $19,2^\circ\text{C}$, la température augmente pour atteindre 50°C en 500s, puis se stabilise progressivement vers $50,6^\circ\text{C}$. A l'extrémité de sortie du fluide caloporteur, on fixe une pression relative de $P = 0 \text{ Pa}$. Les autres frontières du domaine (paroi du tube, extrémités du tube et de l'insert, axe de symétrie) sont adiabatiques. La température de référence pour l'approximation de Boussinesq vaut $T_{ref,b} = 47^\circ\text{C}$; il s'agit de la température à laquelle la masse volumique de l'eicosane est égale à la valeur utilisée pour la simulation ($789,5 \text{ kg.m}^{-3}$) [196].

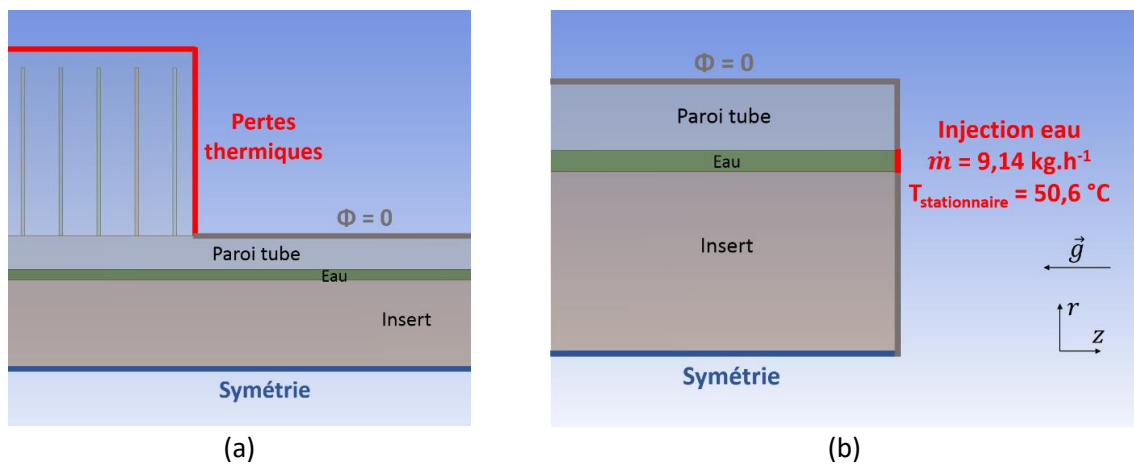


Figure 36 : Conditions aux limites pour le cas 2
(a) : Parois de la calandre, du tube et de l'insert. (b) : Injection du fluide caloporteur

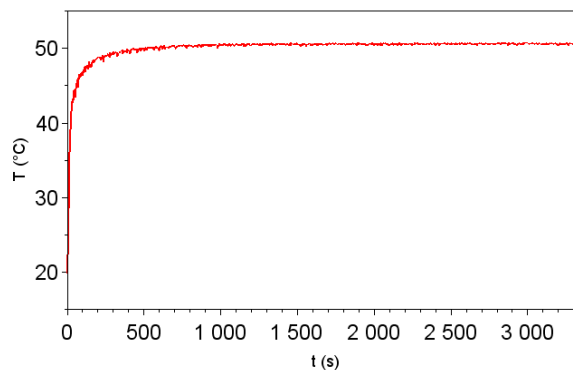


Figure 37 : Evolution dans le temps de la température d'injection du fluide caloporteur (cas 2)

La température initiale est de 19,9°C dans le MCP, et de 19,75°C partout ailleurs (eau, tube, ailettes, insert), conformément aux mesures expérimentales. Dans l'eau et le MCP, la vitesse initiale est fixée à $\vec{v} = -0.045 \vec{u}_z \text{ m.s}^{-1}$ où \vec{u}_z est le vecteur unité dans la direction verticale ; il s'agit de la vitesse d'injection de l'eau (dans la réalité, le MCP est immobile à l'instant initial, car il est entièrement à l'état solide ; cependant, fixer $\vec{v} = \vec{0}$ initialement dans le MCP cause des problèmes de convergence dans les premiers pas de temps). Comme pour le cas 1, on adopte un critère de convergence absolu. Les valeurs limites des résidus sont ici aussi de 10^{-3} pour les équations de continuité et de quantité de mouvement. Pour l'équation de l'énergie, on adopte ici une valeur limite de 10^{-11} ; en effet, il a été observé qu'avec la valeur par défaut de 10^{-6} , le solveur de Fluent® n'effectuait qu'une seule itération interne à certains pas de temps, ce qui amène à une convergence insuffisante.

Pour le cas 2, l'étude croisée de la constante de zone pâteuse et de la plage de température du changement de phase est effectuée sur la base de cinq valeurs de la constante et de quatre valeurs de l'intervalle $T_{liq} - T_{sol}$, pour un total de 20 simulations. Les valeurs testées sont les suivantes :

- $A_{mush} \in \{10^3; 10^4; 10^5; 10^6; 10^7\} \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
- $T_{liq} - T_{sol} \in \{0; 1; 2; 4\} \text{ }^\circ\text{C}$

Expérimentalement, le changement de phase de la RT35-HC apparaît être réparti entre 33°C et 35°C. On centre donc l'intervalle de changement de phase sur 34°C (on a donc $\frac{1}{2} (T_{sol} + T_{liq}) = 34^\circ\text{C}$, ou bien $T_{liq} - \frac{\Delta T}{2} = 34^\circ\text{C}$).

Le maillage utilisé est représenté Figure 38. Il est constitué de 107433 cellules rectangulaires, de dimensions et de tailles variables selon la zone du domaine de calcul. Dans le MCP et les ailettes, les cellules sont carrées, de côté égal à l'épaisseur d'une ailette ($\Delta z = \Delta r = 0,35 \text{ mm}$). Dans le tube, le fluide caloporteur et l'insert, les cellules sont étirées ou aplaties comme représenté Figure 38-(b), afin d'une part de limiter le nombre de cellules dans les portions situées au-delà de la calandre, et d'autre part de raffiner le maillage près des parois de la section de passage du fluide caloporteur. Le pas de temps adopté est de $\Delta t = 0,25\text{s}$. L'indépendance des résultats aux pas de temps et d'espace a été vérifiée en les comparant à ceux obtenus respectivement avec $\Delta t = 0,1\text{s}$, et avec un maillage plus dense (345285 cellules) où le pas d'espace est divisé par 2 dans le MCP et les ailettes, et où la taille des autres cellules est adaptée afin de conserver le rapport de tailles entre deux cellules adjacentes du maillage d'origine.

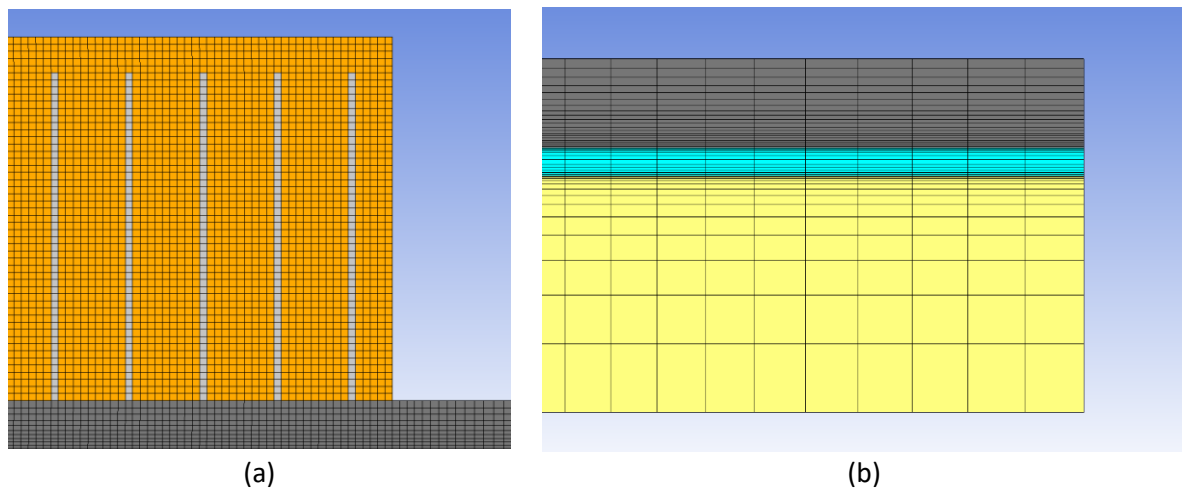


Figure 38 : Détails du maillage du cas 2
 (a) : Région du MCP - (b) : Région de l'extrémité du tube
 Orange : MCP - Gris clair : Ailettes - Gris sombre : Epaisseur du tube - Bleu : Fluide caloporteur - Jaune : Insert

III.3.3. Méthodologie de comparaison des essais numériques avec l'expérience

Pour l'étude croisée de la constante de zone pâteuse et de l'intervalle de température du changement de phase, on utilise l'écart des différents résultats de simulation à l'expérience pour évaluer l'influence des deux paramètres. Les données de mesure disponibles pour les deux sections d'essais sont nombreuses (températures en plusieurs points, front de fusion...), et ces mesures sont effectuées régulièrement dans le temps, au cours de la fusion du MCP. Pour pouvoir quantifier l'écart d'une simulation à l'expérience, il convient ainsi de définir des critères d'écart tenant compte de toutes les mesures expérimentales disponibles, et de leur évolution au cours du temps. Cette section décrit les différents critères d'écart entre simulation et expérience définis pour les deux cas d'étude.

Pour le cas 1, Gau et Viskanta [192] fournissent l'évolution dans le temps de la forme et de la position du front de fusion dans la section d'essais, de la fraction fondue totale, et du profil de température sur la ligne horizontale au centre de la cavité (représentée Figure 31). Pour ces trois types de mesures, on définit un écart moyen et un écart maximal entre simulation et expérience ; un nombre total de six critères d'écart sont ainsi définis pour un essai numérique. La définition de ces critères est la suivante :

- Front de fusion :** Pour tous les instants auxquels des données sont disponibles (2, 5, 6, 8, 10, 12, 14, 17 et 19 min), on discrétise les fronts de fusion expérimental (à l'aide du logiciel GraphClick [204]) et numérique. Pour chaque point du front numérique discret, on identifie les deux points du front expérimental discret les plus proches. Un écart absolu est calculé comme la distance entre le point numérique et son projeté orthogonal sur la droite reliant les deux points expérimentaux. Le résultat est divisé par la hauteur de la cavité (4,45 cm), afin d'obtenir un écart relatif.

Un écart relatif moyen et un écart relatif maximal sont calculés le long de l'interface. Enfin, pour ces deux écarts, les valeurs obtenues pour chaque instant sont moyennées : on obtient un écart moyen et un écart maximal globaux.
- Fraction fondue totale :** À chaque instant, l'écart est défini comme la différence entre la fraction fondue mesurée et prédite par la simulation, que l'on divise par la valeur expérimentale (écart relatif). Un écart moyen et un écart maximal au cours du temps sont calculés.

- *Température sur la ligne centrale* : À chaque instant où des mesures de température sont disponibles (4, 8, 12, 16 et 20 min), on calcule un écart de température à chaque point de la ligne horizontale (écart absolu). Des écarts moyen et maximal sont calculés le long de la ligne, puis les valeurs de ces deux écarts obtenues pour chaque instant sont moyennées : on obtient ainsi des écarts moyen et maximal globaux, de la même manière que pour le front de fusion.

Pour le cas 2, les mesures expérimentales sont les relevés de température des 40 thermocouples disposés dans le MCP (Figure 33). Ici, deux critères d'écart sont définis pour chaque essai numérique, à savoir un écart moyen et un écart maximal, prenant en compte l'ensemble des thermocouples et l'ensemble des instants auxquels des données sont disponibles. Le module de stockage étant axisymétrique, on effectue dans un premier temps des calculs d'écart pour les dix positions du plan (r, z) où des mesures sont effectuées. Pour cela, les mesures des quatre thermocouples disposés autour du tube à chacune de ces positions sont moyennées, puis un écart moyen et un écart maximal de température (écart absolu) au cours du temps entre simulation et expérience sont calculés. Enfin, la moyenne de ces deux écarts sur les dix positions (r, z) est calculée, afin de condenser les résultats sous la forme d'un unique critère d'écart moyen et d'un unique critère d'écart maximal.

III.4. Étude croisée de la constante de zone pâteuse et de la plage de température du changement de phase

Les quatre tables ci-dessous présentent les différents critères d'écart calculés pour chacun des essais numériques effectués, comme exposé dans la section précédente. La Table 4, la Table 5 et la Table 6 concernent les essais numériques du cas 1 ; la Table 7 concerne le cas 2. Afin de mettre en évidence de manière visuelle les tendances suivies par les résultats selon les valeurs des deux paramètres étudiés, les écarts inférieurs à 10% ou 1°C sont indiqués en vert dans les trois premières tables, et ceux supérieurs à 50% ou 3°C sont en rouge.

Des graphes d'évolution de la fraction fondue pour le cas 1, et de la température pour le cas 2, sont également donnés ci-dessous, afin de pouvoir observer l'influence des deux paramètres sur les résultats de simulation bruts. Pour le cas 1, la Figure 39 et la Figure 40 illustrent l'influence de la constante de zone pâteuse, pour $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$ et 1°C respectivement. L'influence de l'intervalle de température $T_{liq} - T_{sol}$ est illustré Figure 41, pour une valeur faible et une valeur élevée de la constante de zone pâteuse ($A_{mush} = 5 \times 10^4$ et $10^7 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ respectivement). Pour le cas 2, la Figure 42 illustre l'influence de la constante pour $T_{liq} - T_{sol}$ fixé, et la Figure 43 l'influence de $T_{liq} - T_{sol}$ pour A_{mush} fixé.

Dans cette section, ces différents résultats quantitatifs et graphiques sont analysés et commentés. D'une part, l'influence des deux paramètres sur les résultats pour les deux cas d'étude, ainsi que leurs effets croisés, sont mis en évidence et analysés. D'autre part, les valeurs des deux paramètres permettant d'optimiser l'accord avec l'expérience sont discutées, ainsi que les grandeurs et critères sur la base desquels comparer la simulation à l'expérience pour son calage et sa validation.

A_{mush} ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$)	Position de l'interface		Fraction fondue		Température	
	Moy (%)	Max (%)	Moy (%)	Max (%)	Moy ($^\circ\text{C}$)	Max ($^\circ\text{C}$)
10^4	13.55	23.53	38.52	67.38	1.14	3.61
5×10^4	8.63	14.14	26.10	58.31	0.82	2.73
10^5	7.62	12.57	22.87	55.88	0.77	2.47
5×10^5	6.51	11.21	18.72	52.16	0.69	1.93
10^6	6.36	11.17	17.59	51.14	0.70	1.86
10^7	6.45	11.68	15.78	49.91	0.68	1.70
10^8	6.57	11.93	15.54	49.80	0.67	1.68

Table 4 : Ecart entre simulation et expérience pour le cas 1 ; Essais numériques avec $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$

A_{mush} ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$)	Position de l'interface		Fraction fondue		Température	
	Moy (%)	Max (%)	Moy (%)	Max (%)	Moy ($^\circ\text{C}$)	Max ($^\circ\text{C}$)
10^4	47.52	76.23	87.75	107.53	1.64	4.21
5×10^4	27.59	47.48	55.52	68.04	1.32	3.69
10^5	20.80	36.82	44.40	62.73	1.22	3.52
5×10^5	9.91	17.36	26.53	56.01	0.79	2.61
10^6	7.92	13.19	21.29	54.36	0.68	2.08
10^7	6.97	12.82	16.40	52.40	0.63	1.48
10^8	7.31	13.44	15.84	52.08	0.65	1.57

Table 5 : Ecart entre simulation et expérience pour le cas 1 ; Essais numériques avec $T_{liq} - T_{sol} = 1^\circ\text{C}$

A_{mush} ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$)	Position de l'interface		Fraction fondue		Température	
	Moy (%)	Max (%)	Moy (%)	Max (%)	Moy (°C)	Max (°C)
10^4	35.33	71.34	47.80	110.97	1.96	3.72
5×10^4	26.25	43.99	57.62	83.01	1.53	3.62
10^5	20.42	33.67	46.87	72.45	1.27	3.55
5×10^5	11.86	20.18	31.68	65.08	0.92	2.96
10^6	9.79	16.03	26.28	61.74	0.79	2.43
10^7	8.29	15.93	19.42	57.60	0.67	1.81
10^8	8.53	16.54	18.08	56.47	0.71	1.94

Table 6 : Ecart entre simulation et expérience pour le cas 1 ; Essais numériques avec $T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ\text{C}$

$T_{liq} - T_{sol}$ (°C)	0		1		2		4	
A_{mush} ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$)	Moy (°C)	Max (°C)	Moy (°C)	Max (°C)	Moy (°C)	Max (°C)	Moy (°C)	Max (°C)
10^3	0.78	4.67	0.77	4.43	0.75	4.21	0.68	3.84
10^4	0.77	4.68	0.71	4.44	0.70	4.20	0.66	3.82
10^5	0.79	4.68	0.69	4.44	0.65	4.21	0.62	3.75
10^6	0.80	4.68	0.71	4.44	0.64	4.21	0.59	3.75
10^7	0.81	4.68	0.72	4.45	0.65	4.21	0.57	3.75

Table 7 : Ecart de température entre simulation et expérience pour le cas 2

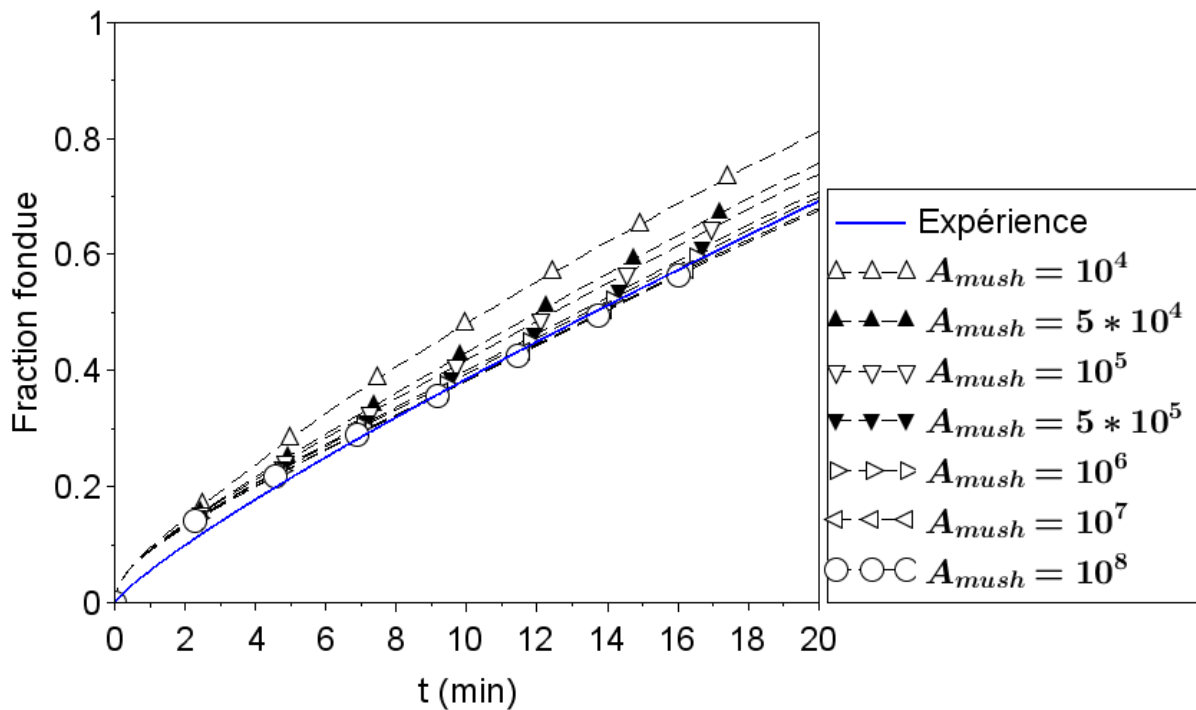


Figure 39 : Evolution de la fraction fondue totale pour le cas 1, pour différentes valeurs de la constante de zone pâteuse $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$; A_{mush} exprimé en $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$

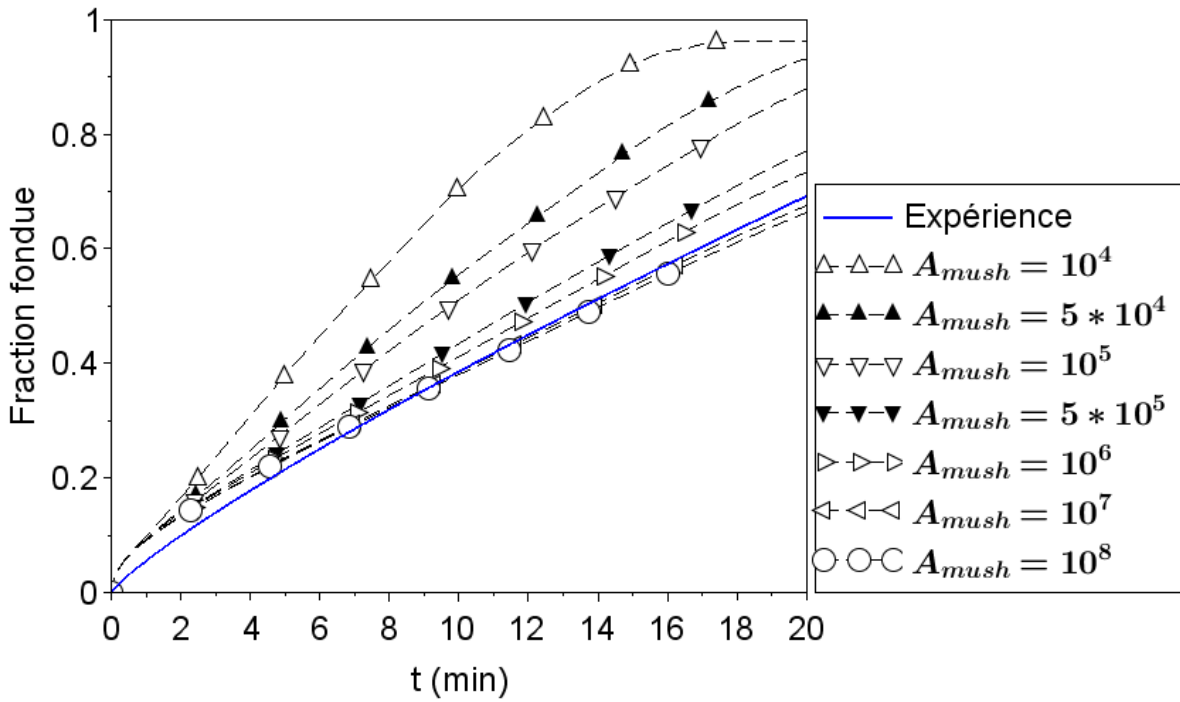


Figure 40 : Evolution de la fraction fondue totale pour le cas 1, pour différentes valeurs de la constante de zone pâteuse $T_{liq} - T_{sol} = 1^{\circ}C$; A_{mush} exprimé en $kg.m^{-3}.s^{-1}$

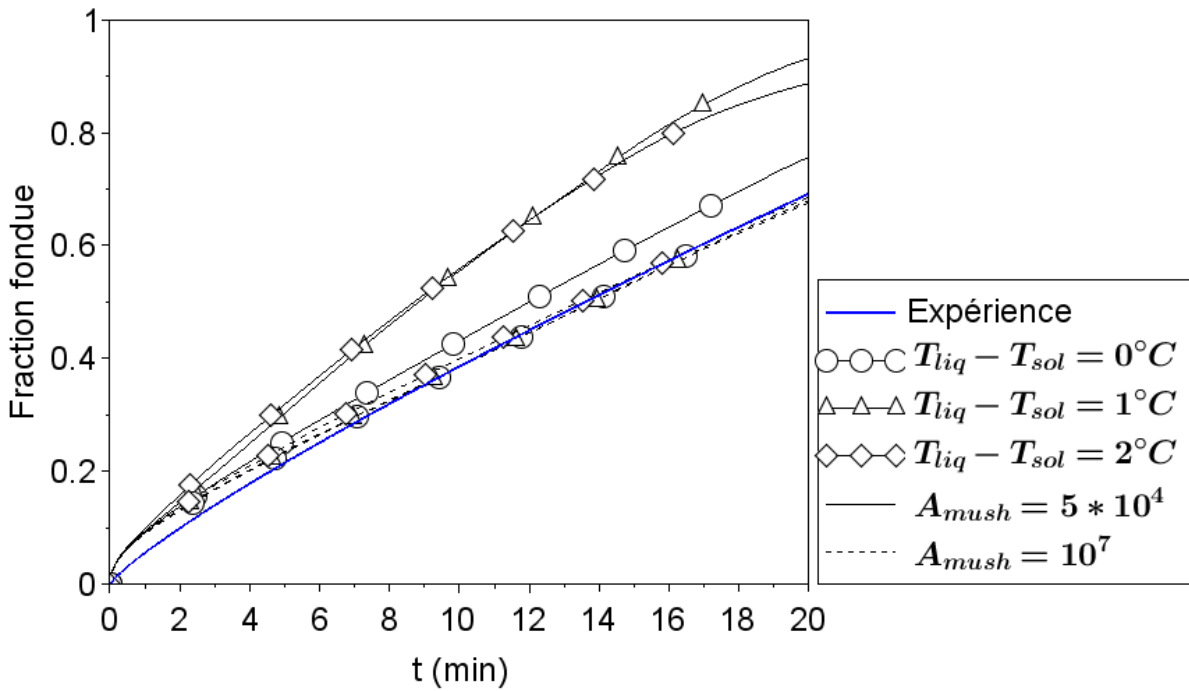
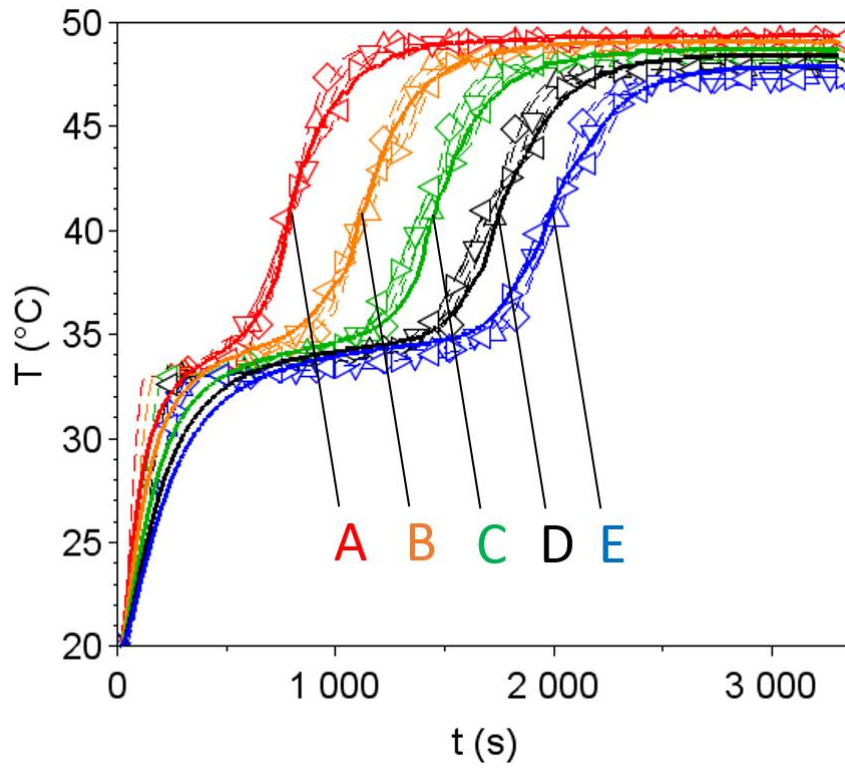
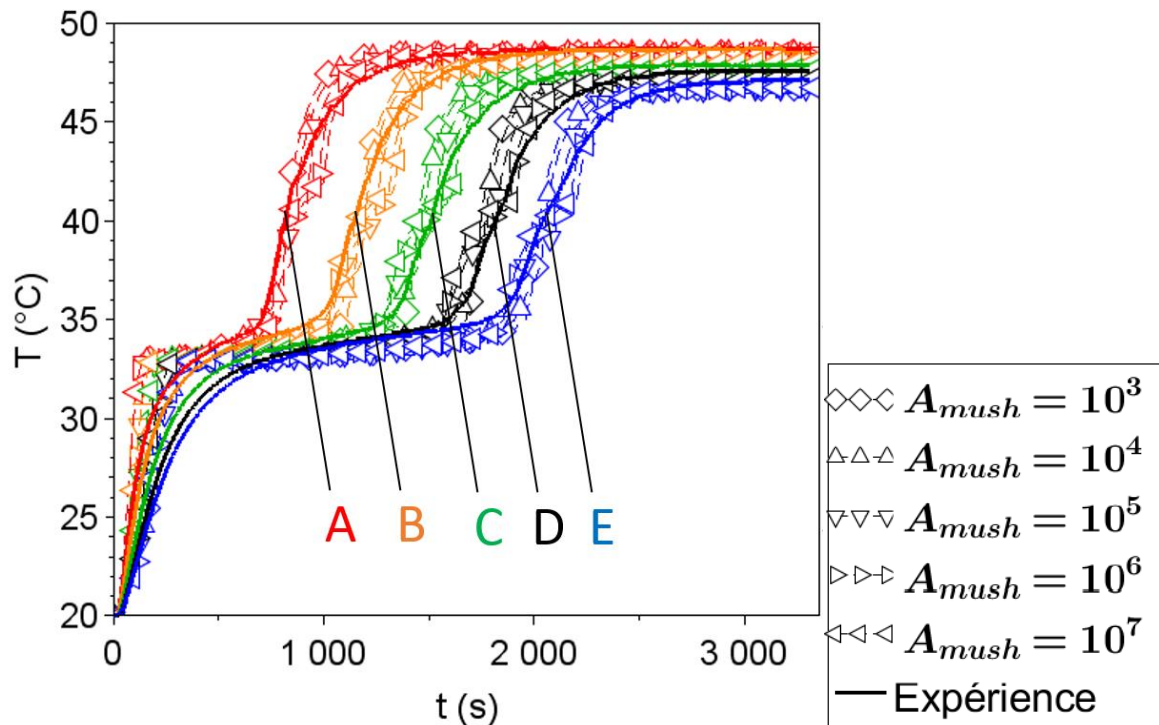


Figure 41 : Evolution de la fraction fondue totale pour le cas 1, pour différentes valeurs de l'intervalle de changement de phase A_{mush} exprimé en $kg.m^{-3}.s^{-1}$

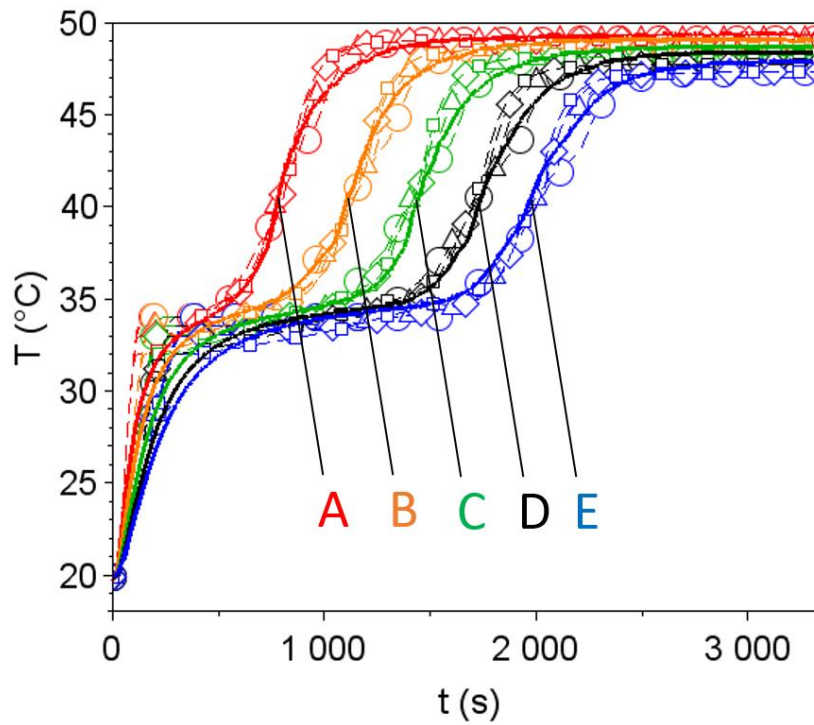


(a)

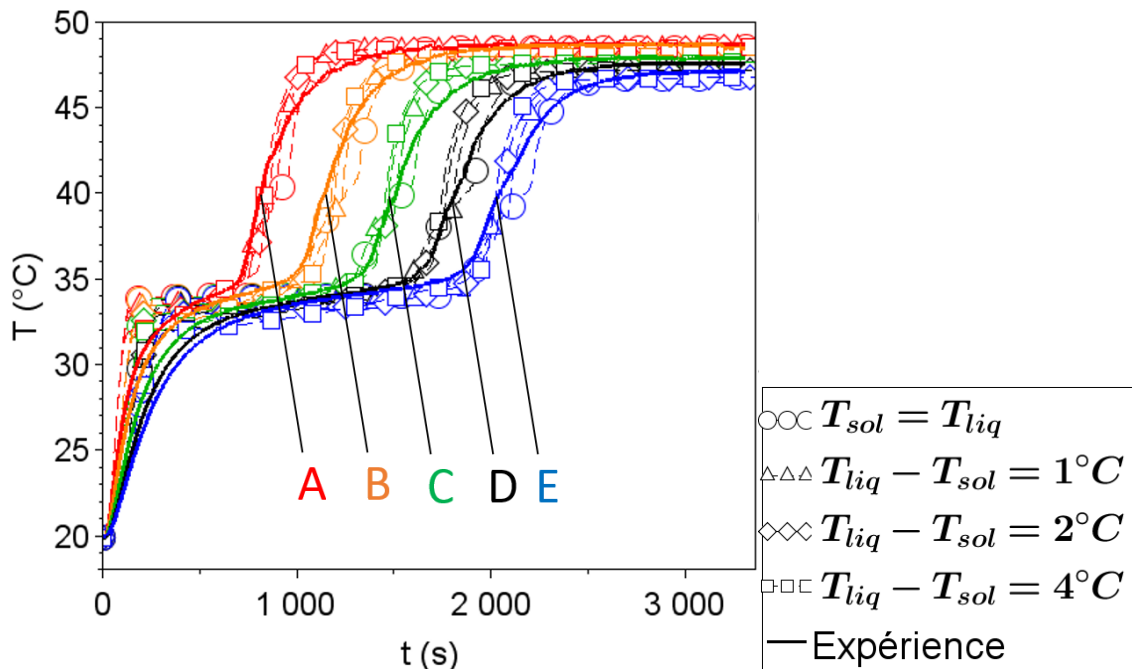


(b)

Figure 42 : Evolution de la température dans le MCP pour le cas 2, pour différentes valeurs de la constante de zone pâteuse
 (a) : Thermocouples proches du tube (-in) - (b) : Thermocouples proches de la calandre (-out)
 $T_{liq} - T_{sol} = 2^{\circ}\text{C}$; A_{mush} exprimé en $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$



(a)



(b)

Figure 43 : Evolution de la température dans le MCP pour le cas 2, pour différentes valeurs de l'intervalle de température $T_{liq} - T_{sol}$
 (a) : Thermocouples proches du tube (-in) - (b) : Thermocouples proches de la calandre (-out)
 $A_{mush} = 10^4 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$

III.4.1. Différences entre les deux cas d'étude

III.4.1.1. Sensibilité des résultats aux paramètres

Le premier résultat important à relever, au vu de l'ensemble des résultats de simulation, concerne la différence de sensibilité des deux cas d'étude aux deux paramètres étudiés. Le cas de la fusion du gallium dans une cavité (cas 1) se montre notablement plus sensible à la constante de zone pâteuse et à l'intervalle de température du changement de phase que le cas du système de stockage tube-calandre (cas 2). Comme on peut le voir sur la Figure 39, pour $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$, la valeur instantanée de la fraction fondue peut connaître des variations allant jusqu'à 0,14 selon la valeur de A_{mush} ; en relatif, l'écart moyen au cours du temps avec l'expérience varie de 16 à 39% entre $A_{mush} = 10^4$ et $10^8 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ (Table 4). Pour les valeurs plus élevées (non nulles) de $T_{liq} - T_{sol}$, les résultats de simulation se montrent encore plus sensibles à A_{mush} , la fraction fondue instantanée pouvant varier de 0,5 entre deux valeurs (Figure 40). Pour ce qui est de la température du MCP, la variation entre les valeurs de A_{mush} les plus extrêmes est, pour $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$, de $0,5^\circ\text{C}$ environ en ce qui concerne la température moyenne, et de 2°C en ce qui concerne la température maximale (Table 4). Pour $T_{liq} - T_{sol} > 0^\circ\text{C}$, cette variation devient égale (pour $T_{liq} - T_{sol} = 1^\circ\text{C}$) voire supérieure (pour $T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ\text{C}$) à 1°C pour la température moyenne, et atteint de 2 à $2,5^\circ\text{C}$ pour la température maximale (Table 5 ; Table 6).

En comparaison, la sensibilité du cas 2 aux deux paramètres est beaucoup plus faible. Comme on peut le voir dans la Table 7, la variation de température moyenne va de $0,03^\circ\text{C}$ à $0,11^\circ\text{C}$ entre différentes valeurs de A_{mush} , selon la valeur de $T_{liq} - T_{sol}$, et va de $0,10^\circ\text{C}$ à $0,24^\circ\text{C}$ entre différentes valeurs de $T_{liq} - T_{sol}$, selon la valeur de A_{mush} . En ce qui concerne la température maximale, la variation avec A_{mush} n'excède pas $0,10^\circ\text{C}$; celle induite par $T_{liq} - T_{sol}$ se montre plus importante, étant légèrement inférieure à 1°C . Les courbes d'évolution de la température dans le MCP visibles Figure 42 et Figure 43 sont pratiquement confondues les unes avec les autres et sont toutes globalement en bon accord avec les relevés de température expérimentaux, sauf au début de l'essai pendant la montée en température sensible du MCP en phase solide.

Ces différences entre les deux cas peuvent s'expliquer par les différences dans la structure et l'amplitude des mouvements de convection naturelle qui se développent dans le MCP liquide pour chaque cas. Dans le cas 1, la cavité rectangulaire dans laquelle se situe le MCP ne contient aucune ailette, ni aucun autre élément solide qui pourrait faire obstacle à l'écoulement du MCP liquide. Ainsi, comme on peut le voir sur la Figure 44, cela permet le développement d'une grande boucle de convection, qui occupe en quasi-totalité l'espace de la cavité. La vitesse locale maximale atteinte par l'écoulement dans cette boucle est d'environ $15 \text{ mm}\cdot\text{s}^{-1}$; elle atteint $18 \text{ mm}\cdot\text{s}^{-1}$ au début de la fusion. Dans le cas 2, les ailettes disposées à l'intérieur de la calandre constituent un obstacle aux mouvements liquides verticaux induits par les différences de température dans le MCP liquide. Les ailettes sont en effet circulaires et horizontales, et s'étendent sur la quasi-totalité du rayon de la calandre : seul un étroit passage de 2,5 mm de rayon, entre l'extrémité des ailettes et la paroi extérieure de la calandre, est laissé pour les mouvements liquides verticaux. De plus, les ailettes étant nombreuses et proches les unes des autres (pas d'ailettes de 3,63 mm), peu de place est laissé pour le développement de boucles de convection entre les ailettes. Ainsi, la géométrie et les dimensions de la section d'essais inhibent les mouvements de convection naturelle. Le champ de vitesse à un instant donné pour l'un des cas de simulation est représenté Figure 45. On peut y voir que des boucles de convection sont malgré tout présentes entre les ailettes, et que des mouvements verticaux sur l'ensemble de la hauteur de la section d'essais ont lieu dans l'espace situé entre l'extrémité des ailettes et la paroi extérieure. Cependant, la vitesse locale maximale est ici inférieure à $1 \text{ mm}\cdot\text{s}^{-1}$.

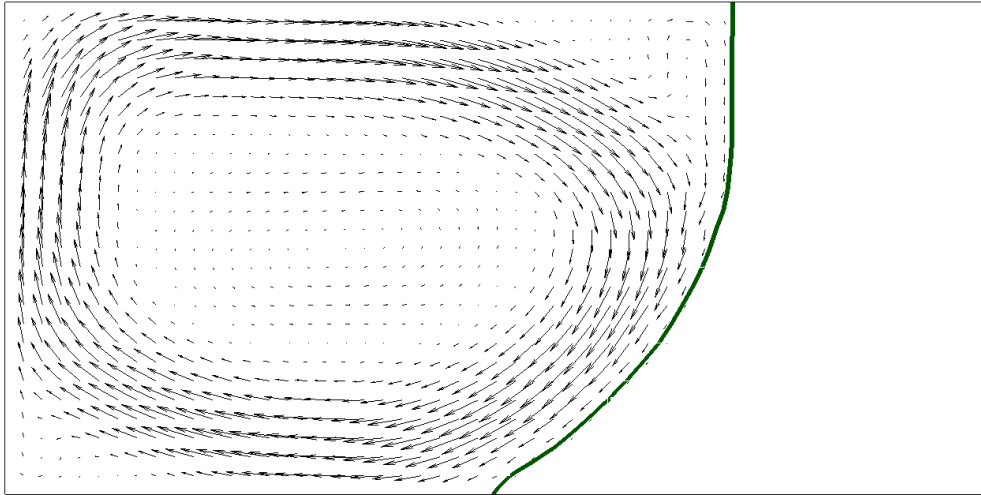


Figure 44 : Champ de vitesse dans le MCP fondu pour le cas 1, 20 min après le début de la fusion
L'interface solide-liquide est représentée en vert.

$$A_{mush} = 10^7 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1} ; T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$$

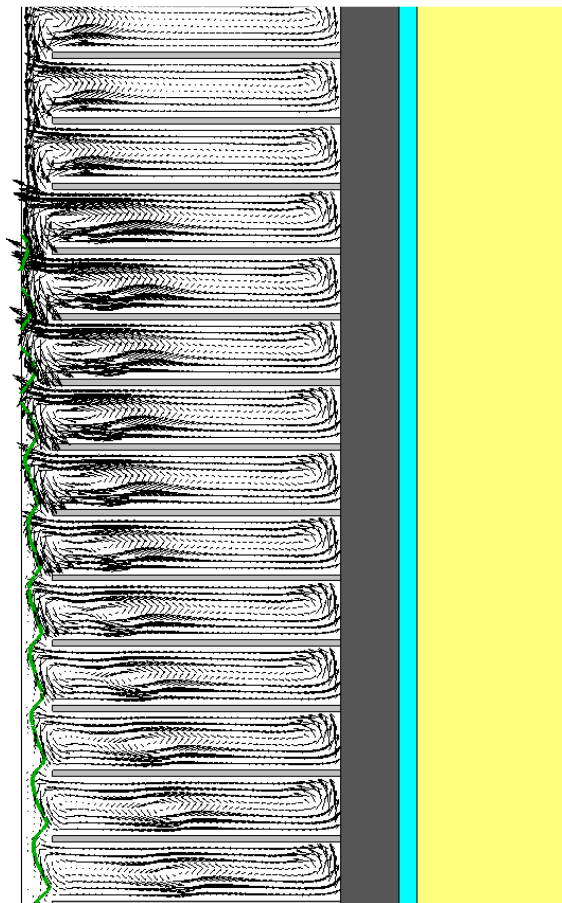


Figure 45 : Champ de vitesse dans le MCP fondu pour le cas 2, 15 min après le début de la fusion
L'interface solide-liquide est représentée en vert.

$$A_{mush} = 10^4 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1} ; T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ\text{C}$$

En résumé, les mouvements de convection naturelle prennent la forme d'une unique boucle de convection importante dans le cas 1, et d'un ensemble de petites boucles se développant dans des espaces plus confinés (entre les ailettes, et dans l'espace au-delà de l'extrémité des ailettes) dans le cas 2. Le rapport des vitesses locales maximales de l'écoulement entre les deux cas est de 15 à 20. Ces constats permettent d'expliquer l'influence plus importante de A_{mush} pour le cas 1 : la vitesse de l'écoulement y étant plus élevée, elle sera plus sensible à l'amortissement lié au terme de pénalisation contenant A_{mush} (équation (48)). En conséquence, le MCP chaud situé dans la zone pâteuse va s'écouler moins vite, voire rester immobile pour les valeurs de A_{mush} les plus élevées, alors qu'il sera éloigné du front de fusion pour les valeurs de A_{mush} moins élevées : en d'autres termes, le transfert de chaleur par convection au niveau du front de fusion est moins important lorsque A_{mush} augmente. Dans le cas 2, les vitesses en jeu étant faibles, le transfert de chaleur au niveau du front est plus conducteur que convectif. L'amortissement des vitesses par A_{mush} influence donc de manière moins importante sur ce transfert de chaleur : en conséquence, un changement dans la valeur de A_{mush} aura moins d'impact sur ce transfert.

Les sensibilités à $T_{liq} - T_{sol}$ des deux cas peuvent aussi être expliquées par le caractère principalement convectif (pour le cas 1) ou conducteur (pour le cas 2) du transfert de chaleur au niveau du front de fusion. En effet, c'est dans l'épaisseur de la zone pâteuse que la vitesse est amortie par le terme de pénalisation. Cette épaisseur augmente avec $T_{liq} - T_{sol}$ (comme illustré Figure 46) : ainsi, plus ce paramètre est élevé, plus l'amortissement de la vitesse s'applique donc sur une grande zone de l'espace. Ainsi, lorsque les transferts de chaleur au niveau du front de fusion sont dominés par la convection, une zone pâteuse plus épaisse aura un impact plus important sur ces transferts, et donc sur la vitesse à laquelle s'effectue la fusion. Les profils de fraction fondue représentés Figure 41 pour le cas 1 montrent que, pour les faibles valeurs de A_{mush} , le taux de fusion augmente avec $T_{liq} - T_{sol}$. Ce constat peut s'expliquer par le fait que l'intervalle de température du changement de phase reste centré sur la même température d'une simulation à l'autre ($\frac{T_{sol} + T_{liq}}{2}$ ne varie pas). Ainsi, lorsque $T_{liq} - T_{sol}$ augmente, T_{sol} diminue, ce qui permet à du MCP à une température moins élevée de se mettre en mouvement. La quantité de MCP en mouvement dans la zone pâteuse est donc plus importante : le transfert de chaleur au niveau du front augmente donc, et le taux de fusion également par voie de conséquence.

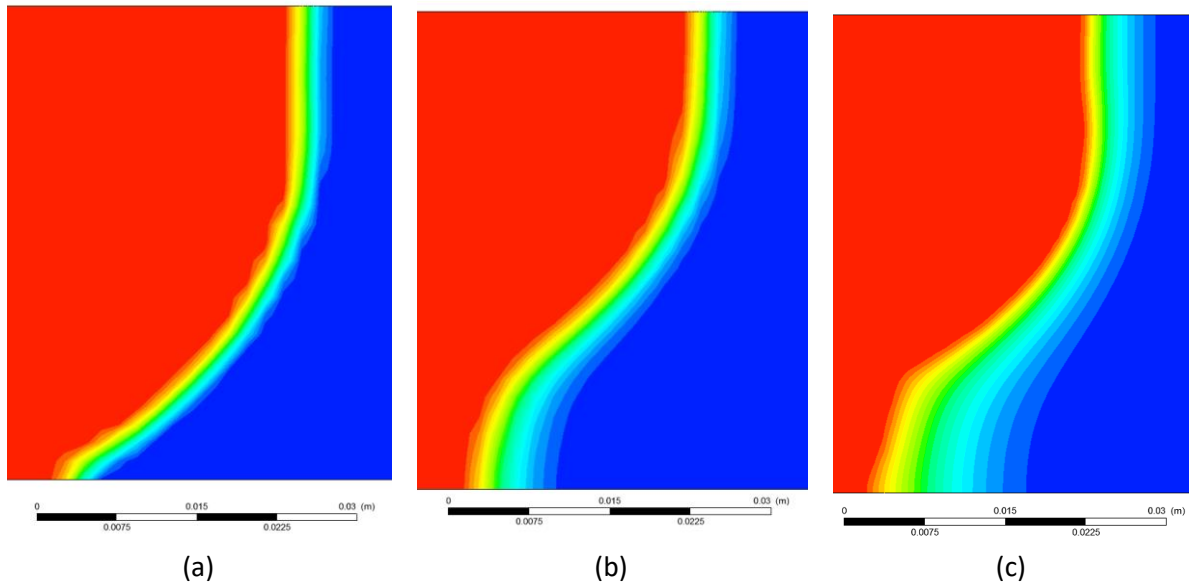


Figure 46 : Epaisseur de la zone pâteuse selon la valeur de $T_{liq} - T_{sol}$ (cas 1)
 $A_{mush} = 10^7 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$; Rouge : MCP liquide ; Bleu : MCP solide
(a) : $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$; (b) : $T_{liq} - T_{sol} = 1^\circ\text{C}$; (c) : $T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ\text{C}$

III.4.1.2. Influence relative des deux paramètres

Une autre différence que l'on peut relever entre les deux cas se situe au niveau du paramètre ayant le plus d'influence. Pour le cas 1, les résultats se montrent plus sensibles à A_{mush} qu'à $T_{liq} - T_{sol}$. Les différents critères d'écart à l'expérience montrés Table 4, Table 5 et Table 6 varient au minimum d'un facteur 2 (jusqu'à 6,5) selon la valeur de A_{mush} ; l'impact de $T_{liq} - T_{sol}$ se montre moins important, bien qu'il reste loin d'être négligeable. La Figure 41 montre clairement que A_{mush} affecte la vitesse de fusion de manière plus marquée que $T_{liq} - T_{sol}$. A l'inverse, pour le cas 2 (Table 7), $T_{liq} - T_{sol}$ apparaît comme le paramètre ayant le plus d'influence. A_{mush} induit des variations de température n'excédant pas $0,10^\circ\text{C}$, même en considérant l'écart maximal avec l'expérience. $T_{liq} - T_{sol}$ fait varier l'écart de température moyen de $0,10^\circ\text{C}$ à $0,24^\circ\text{C}$, selon la valeur de A_{mush} , et fait varier l'écart maximal de manière significative : entre $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$ et $T_{liq} - T_{sol} = 4^\circ\text{C}$, l'écart maximal varie d'environ 1°C .

Un zoom sur le plateau de température caractéristique du changement de phase est montré pour le cas 2 sur la Figure 48, pour l'une des positions où la température est mesurée dans le MCP. On peut y voir que la pente du plateau augmente avec $T_{liq} - T_{sol}$, et que celui-ci commence à une température d'autant plus basse que $T_{liq} - T_{sol}$ est élevé ; ces deux effets sont respectivement dus à la largeur de la plage de changement de phase (directement définie par la valeur de $T_{liq} - T_{sol}$), et à la valeur de T_{sol} , qui diminue lorsque $T_{liq} - T_{sol}$ augmente. Comme on peut le voir sur la Figure 48, ces deux effets ont pour résultat de rapprocher la température simulée de la température expérimentale lorsque $T_{liq} - T_{sol}$ augmente, ce qui explique l'influence de $T_{liq} - T_{sol}$ sur l'écart maximal de température, visible Table 7. De son côté, avant le changement de phase (MCP en phase solide), A_{mush} n'a aucun impact sur l'évolution de la température du MCP (Figure 47), ce qui est logique, la constante de zone pâteuse influençant uniquement les mouvements du MCP en phase liquide. Après le changement de phase, la montée en température de la phase liquide ne semble pas être influencée plus fortement par l'un ou l'autre des deux paramètres (Figure 42 ; Figure 43).

L'influence de $T_{liq} - T_{sol}$ pour le cas 2 apparaît donc être à relier à son influence sur la température du MCP pendant le changement de phase (autrement dit, sur la relation entre l'enthalpie et la température du MCP). Comme expliqué précédemment, l'intervalle de température du changement de phase conditionne par ailleurs l'épaisseur de la zone pâteuse, qui a une influence sur l'écoulement du liquide ; de ce fait, l'effet mis en évidence pour le cas 2 a moins d'importance pour le cas 1, où les mouvements de convection naturelle sont plus importants. Ainsi, la contribution de la convection naturelle aux transferts de chaleur détermine les paramètres qui impactent le plus les résultats de simulation. Lorsque les transferts de chaleur sont majoritairement convectifs (cas 1), la sensibilité à la constante de zone pâteuse est plus élevée. Lorsque les transferts conductifs prédominent, c'est au contraire $T_{liq} - T_{sol}$ qui apparaît comme le paramètre le plus déterminant : en l'absence de mouvements convectifs importants, les transferts de chaleur et la vitesse de la fusion sont gouvernés uniquement par l'évolution de la température du MCP selon la chaleur qu'il reçoit.

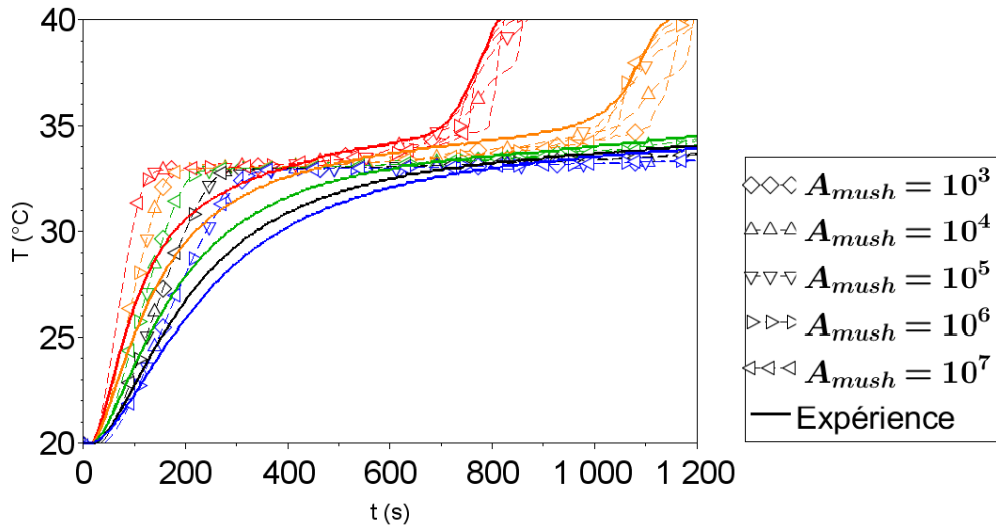


Figure 47 : Evolution de la température du MCP pour le cas 2 selon la valeur de A_{mush} , durant la montée en température en phase solide et le changement de phase
 $T_{liq} - T_{sol} = 2^{\circ}C$

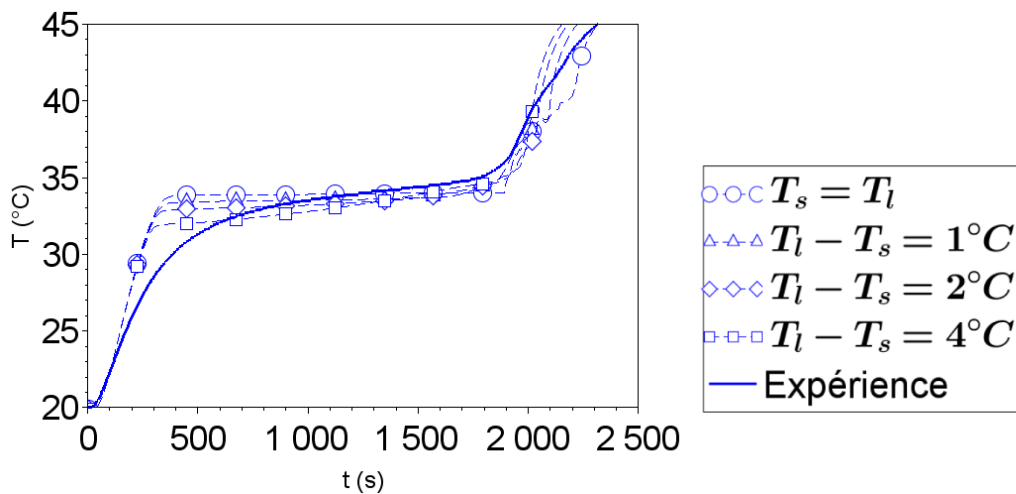


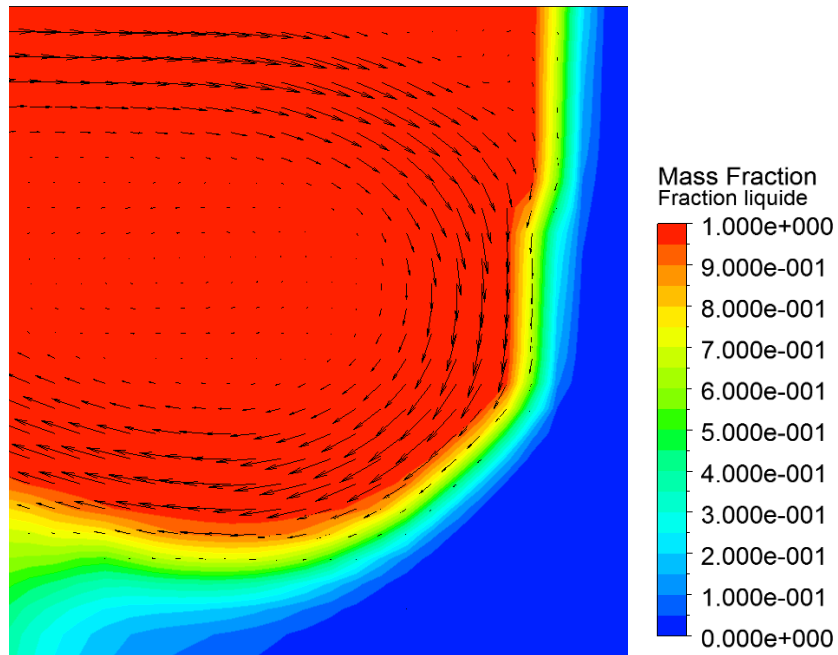
Figure 48 : Evolution de la température du MCP pour le cas 2 selon la valeur de $T_{liq} - T_{sol}$, dans le bas de la section d'essais (thermocouples E-in)
 $A_{mush} = 10^4 \text{ kg.m}^{-3}.s^{-1}$

III.4.2. Influence croisée des deux paramètres

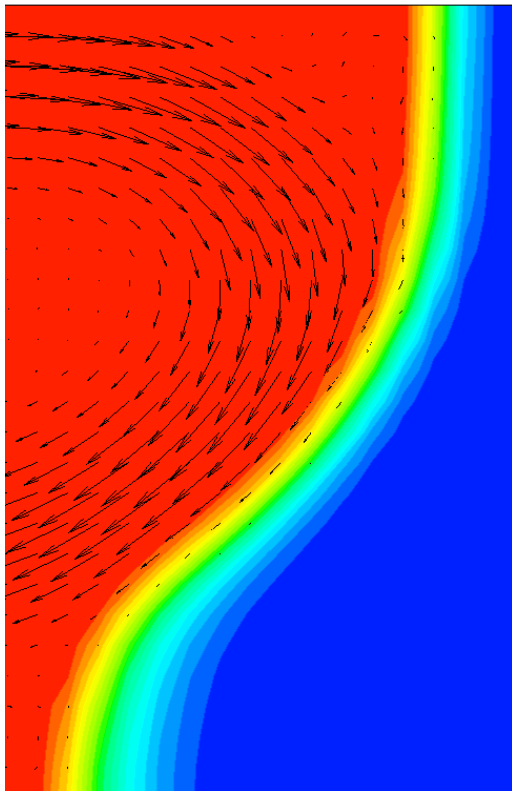
Les différents résultats quantitatifs présentés Table 4, Table 5, Table 6 et Table 7 montrent que pour les deux cas d'étude, les résultats sont plus sensibles à la constante de zone pâteuse pour les plus larges valeurs de l'intervalle de changement de phase. La Figure 41 illustre bien cet effet pour le cas 1 : on peut y voir que les évolutions transitoires de la fraction fondue pour les simulations avec $A_{mush} = 5 \times 10^4 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ et $A_{mush} = 10^7 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ sont plus proches l'une de l'autre lorsque $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$ que lorsque $T_{liq} - T_{sol} > 0^\circ\text{C}$. Ce constat peut s'expliquer par le fait que $T_{liq} - T_{sol}$ augmente l'épaisseur de la zone pâteuse (cf. Figure 46). Plus la valeur de $T_{liq} - T_{sol}$ est élevée, plus la constante de zone pâteuse influence l'écoulement du MCP liquide sur une grande zone de l'espace. Comme expliqué dans la section précédente, lorsque A_{mush} est plus faible, le transfert de chaleur augmente au niveau du front de fusion, car le MCP chaud situé dans la zone pâteuse est éloigné du front de fusion par l'écoulement ; lorsque A_{mush} est plus élevé, ce MCP reste sur place ou bien s'éloigne plus lentement du front. Cet effet de A_{mush} sur le transfert au niveau du front est d'autant plus fort que la zone pâteuse est épaisse. En effet, pour une zone pâteuse plus épaisse, la quantité de MCP dont les mouvements sont affectés par la valeur prise par A_{mush} est plus importante. Il semble ainsi logique que lorsque $T_{liq} - T_{sol}$ augmente, les résultats soient alors plus sensibles à A_{mush} .

Pour le cas 1, la sensibilité des résultats à A_{mush} diminue lorsque A_{mush} augmente. Pour $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$, on peut voir Table 4 que l'écart entre deux simulations avec $A_{mush} \geq 5 \times 10^5 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ est au maximum de 0,7% pour la position de l'interface, 3% pour la fraction fondue, et $0,25^\circ\text{C}$ pour la température. On observe une différence comparable entre les cas avec $A_{mush} \geq 10^6 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ pour $T_{liq} - T_{sol} = 1^\circ\text{C}$ (Table 5), et entre les cas avec $A_{mush} \geq 10^7 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ pour $T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ\text{C}$ (Table 6). Pour les valeurs de A_{mush} plus faibles, la différence entre deux cas de simulation avec des valeurs de A_{mush} voisines est en revanche plus élevée : elle peut atteindre plusieurs % pour la position de l'interface et la fraction fondue, et plusieurs dixièmes de $^\circ\text{C}$ pour la température. Il apparaît donc qu'il existe une valeur seuil de A_{mush} en-dessous de laquelle la sensibilité des résultats à la constante est forte, et au-dessus de laquelle l'influence de la constante devient plus marginale. Cette valeur seuil dépend de $T_{liq} - T_{sol}$.

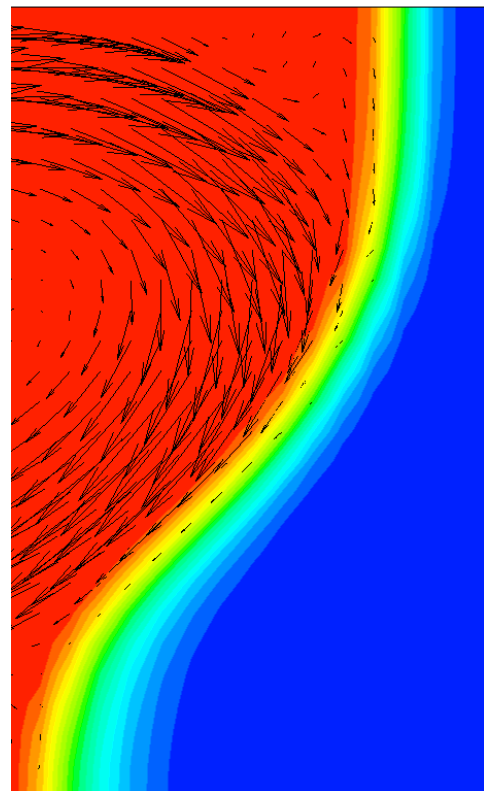
On peut expliquer ce constat par l'effet fondamental de A_{mush} , qui est de diminuer la vitesse de l'écoulement dans la zone pâteuse. Plus la constante est élevée, plus la vitesse sera amortie. Ainsi, au-delà d'une certaine valeur de A_{mush} , l'amortissement devient tel que la vitesse est nulle dans la totalité ou la quasi-totalité de la zone pâteuse, peu importe la valeur prise par A_{mush} . Cet effet est illustré sur la Figure 49, où les champs de vitesse pour différentes valeurs de A_{mush} sont représentés (pour $T_{liq} - T_{sol} = 1^\circ\text{C}$). On peut y voir que pour $A_{mush} = 10^7$ et $10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$, il n'y a pratiquement plus d'écoulement dans la zone pâteuse, la vitesse n'étant significative que dans des mailles où la fraction liquide locale est supérieure à 0,7 environ (en jaune, orange et rouge sur la figure). Pour $A_{mush} = 10^5 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$, c'est plutôt pour les valeurs inférieures à 0,5 que la vitesse est totalement annulée ; on distingue toujours des vecteurs vitesses à des points où la fraction liquide locale est entre 0,6 et 0,8 (en vert clair et en jaune sur la figure).



(a)



(b)



(c)

Figure 49 : Champs de fraction liquide et de vitesse au niveau du front de fusion pour le cas 1, pour diverses valeurs de la constante de zone pâteuse

$t = 600s$; $T_{liq} - T_{sol} = 1^{\circ}C$

(a) : $A_{mush} = 10^5 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$; (b) : $A_{mush} = 10^7 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$; (c) : $A_{mush} = 10^8 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$

En ce qui concerne la sensibilité à $T_{liq} - T_{sol}$, la tendance selon la valeur de A_{mush} n'est pas la même pour les deux cas d'étude. Pour le cas 2, les écarts de température de la Table 7 diminuent avec $T_{liq} - T_{sol}$, et ce d'autant plus que A_{mush} est plus élevé. Entre $T_{liq} - T_{sol} = 0$ et 4°C , la variation d'écart de température moyen est de $0,10^{\circ}\text{C}$ pour $A_{mush} = 10^3 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$, et de $0,24^{\circ}\text{C}$ pour $A_{mush} = 10^7 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$. La variation d'écart de température maximal entre les valeurs extrêmes de $T_{liq} - T_{sol}$ est de $0,85^{\circ}\text{C}$ et de $0,93^{\circ}\text{C}$ respectivement pour ces deux valeurs de A_{mush} . Ces différences de sensibilité à $T_{liq} - T_{sol}$ selon A_{mush} sont négligeables ; ce constat est cohérent avec l'influence quasi nulle de A_{mush} sur les résultats pour le cas 2, soulignée en partie III.4.1.1. Il apparaît ainsi peu pertinent de conclure sur la sensibilité à $T_{liq} - T_{sol}$ selon A_{mush} pour un cas d'étude comme le cas 2, où le choix de la valeur de A_{mush} a en définitive peu d'importance au vu de son impact quasi nul sur les résultats.

Pour le cas 1, la sensibilité à $T_{liq} - T_{sol}$ diminue lorsque A_{mush} augmente. Cet effet est visible aussi bien sur les résultats quantitatifs globaux de la Table 4, la Table 5 et la Table 6, que sur l'évolution transitoire de la fraction fondue visible sur la Figure 41. Pour $A_{mush} \geq 10^7 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$, l'influence de $T_{liq} - T_{sol}$ devient comparable à celle que ce paramètre a pour le cas 2 ; à titre d'illustration, pour $A_{mush} = 10^8 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$, la différence de température entre les essais numériques avec différentes valeurs de $T_{liq} - T_{sol}$ devient négligeable ($< 0,1^{\circ}\text{C}$), et la différence sur la position de l'interface et la fraction fondue est inférieure à 2%. Cet effet-ci peut être interprété par le fait que, comme expliqué précédemment, les valeurs élevées de A_{mush} immobilisent le MCP sur toute l'épaisseur de la zone pâteuse. Ainsi, pour $T_{liq} - T_{sol} \neq 0^{\circ}\text{C}$ et A_{mush} élevé, le transfert de chaleur convectif à l'interface solide-liquide s'effectue au niveau de sa frontière côté liquide (où $T = T_{liq}$). Le MCP entièrement liquide ($Y_l = 1$), en écoulement, cède de la chaleur à une couche de MCP majoritairement liquide ($\frac{1}{2} < Y_l < 1$) mais quasi immobile du fait de la forte valeur de A_{mush} , dans laquelle le transfert de chaleur s'effectue ainsi majoritairement par conduction ; cette couche est entourée d'un cercle rouge sur la Figure 50. Lorsque $T_{liq} - T_{sol} = 0^{\circ}\text{C}$, l'échange s'effectue directement entre le MCP solide, situé au-delà de la zone pâteuse ($T < T_{sol}$), et le MCP liquide en écoulement, l'épaisseur de la zone pâteuse étant beaucoup plus faible (elle est nulle en théorie ; la zone pâteuse que l'on observe malgré tout dans les résultats de simulation s'étend sur l'épaisseur d'une maille uniquement, elle est présente fatalement du fait de la discrétisation de l'espace que l'on introduit pour la simulation CFD). Les conductivités des phases solide et liquide du MCP sont supposées égales ; de ce fait, il semble logique que l'échange de chaleur soit le même lorsque $T_{liq} - T_{sol} = 0^{\circ}\text{C}$, et lorsque $T_{liq} - T_{sol} \neq 0$ et A_{mush} est élevé.

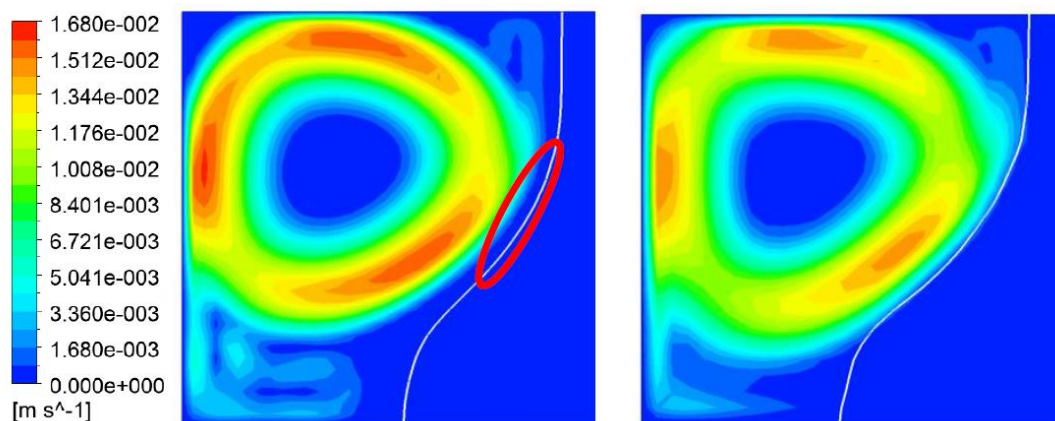


Figure 50 : Norme du vecteur vitesse pour le cas 1, 10 min après le début de la fusion, pour $A_{mush} = 10^7 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
 Gauche : $T_{liq} - T_{sol} = 2^{\circ}\text{C}$; Droite : $T_{liq} - T_{sol} = 0^{\circ}\text{C}$
 Ligne blanche : interface solide-liquide

III.4.3. Choix des valeurs des paramètres

Après avoir examiné l'influence des deux paramètres étudiés sur les résultats de simulation, la question qui se pose naturellement est celle de la valeur à leur donner pour optimiser l'accord de la simulation avec l'expérience. Pour une étude de conception ou de dimensionnement dans un contexte industriel, effectuer une étude paramétrique croisée du type de celle effectuée ici pour déterminer les valeurs à donner à A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$ peut ne pas être envisageable, du fait des importantes ressources de calcul qui peuvent être nécessaires pour une simulation CFD transitoire. Dans cette idée, cette section s'attache à dégager des considérations permettant d'orienter le choix des valeurs de A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$.

III.4.3.1. Constante de zone pâteuse

Concernant la valeur de A_{mush} , les simulations menées sur le cas 2 (Table 7 ; Figure 42) ont montré que son choix importait peu pour ce cas d'étude, du fait du caractère majoritairement conducteur des transferts de chaleur. Il apparaît qu'il n'est utile de s'attarder sur ce paramètre que lorsque la convection naturelle influence de manière non négligeable le transfert de chaleur ; il s'agit d'un premier résultat intéressant.

Pour le cas 1, les résultats quantitatifs (Table 4 ; Table 5 ; Table 6) montrent que l'écart entre simulation et expérience tend à se réduire lorsque A_{mush} augmente. Comme dit précédemment, la sensibilité à A_{mush} s'amenuise en outre pour les fortes valeurs de A_{mush} ; ainsi, n'importe quelle valeur de A_{mush} supérieure à la valeur limite au-delà de laquelle la sensibilité diminue apparaît comme convenable. Cependant, il a été constaté par ailleurs que le temps de calcul augmentait avec A_{mush} , comme on peut le voir dans la Table 8 qui rassemble les temps de calcul des diverses simulations effectuées pour le cas 1. Ce constat peut s'expliquer par le fait que le terme de pénalisation varie de manière plus importante avec la fraction liquide locale Y_l lorsque A_{mush} est plus élevé, ce qui rend plus difficile la résolution numérique du problème par le solveur. Les résultats de simulation n'ont pas de lien avec le temps de calcul, celui-ci croissant avec A_{mush} y compris dans la gamme de valeurs de A_{mush} dans laquelle les résultats ne sont plus sensibles à ce paramètre. Il apparaît ainsi que, parmi les valeurs de A_{mush} qui minimisent l'accord avec l'expérience, la valeur à préconiser serait la plus faible d'entre elles, afin de minimiser le temps de calcul. Ces valeurs seraient respectivement de $A_{mush} = 5 \times 10^5 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ pour $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$, $A_{mush} = 10^6 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ pour $T_{liq} - T_{sol} = 1^\circ\text{C}$, et $A_{mush} = 10^7 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ pour $T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ\text{C}$.

$T_{liq} - T_{sol}$ (°C)	0	1	2
A_{mush} ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$)			
10^4	3h30	3h	8h30
5×10^4	4h30	3h30	10h30
10^5	4h	4h	7h45
5×10^5	4h30	3h45	10h
10^6	6h	4h30	9h40
10^7	7h	5h30	13h
10^8	7h40	6h	12h15

Table 8 : Temps de calcul des différents essais numériques effectués pour le cas 1

Par ailleurs, il est intéressant de remarquer que les écarts à l'expérience obtenus pour les valeurs de A_{mush} supérieures ou égales à ces valeurs limites sont similaires pour les trois valeurs de $T_{liq} - T_{sol}$. En prenant les trois valeurs de A_{mush} optimales précédemment identifiées, l'écart entre les trois simulations pour les trois plages de changement de phase ne dépasse pas 5% pour la position de l'interface et la fraction fondue, et 0,3°C pour la température. Ainsi, en dépit du fait que la valeur de $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$ donne des résultats bien meilleurs que les deux autres valeurs du fait de la grande pureté du gallium utilisé expérimentalement, il semble que n'importe quelle valeur de $T_{liq} - T_{sol}$ puisse être adoptée pour optimiser l'accord avec l'expérience, du moment que A_{mush} prend une valeur suffisamment élevée. Ainsi, il n'existe pas d'optimum unique pour les valeurs de A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$. Deux remarques peuvent être faites suite à ce constat. D'une part, cela minimise l'importance que l'on peut accorder à la détermination précise des deux paramètres : si l'un d'entre eux n'est pas connu avec précision (dans le cas présent, si l'information de la présence ou de l'absence d'impuretés dans le gallium n'était pas connue), l'erreur induite sur les résultats peut être masquée en ajustant correctement le second paramètre. Cet effet de compensation d'un paramètre par l'autre semble aussi être présent en dehors des plages de valeurs qui optimisent l'accord avec l'expérience : certains essais numériques avec des valeurs différentes pour les deux paramètres présentent des résultats similaires. Par exemple, l'essai avec $A_{mush} = 10^5 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ et $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$ (Table 4) donne des résultats proches de celui avec $A_{mush} = 10^6 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ et $T_{liq} - T_{sol} = 1^\circ\text{C}$ (Table 5). D'autre part, cela montre que le modèle peut induire en erreur sur la plage de température sur laquelle le MCP change réellement de phase, une valeur de A_{mush} suffisamment élevée permettant d'aboutir à des résultats similaires peu importe la valeur de $T_{liq} - T_{sol}$.

III.4.3.2. Intervalle de température

Concernant $T_{liq} - T_{sol}$, la valeur optimale qui se dégage est différente pour les deux cas.

Pour le cas 1, c'est $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$ qui donne les résultats les plus proches de l'expérience, pour toutes les valeurs de A_{mush} testées. Gau et Viskanta [192] précisent que le gallium utilisé pour leur expérience présente une grande pureté (99,6 %), et que sa température de fusion est de 29,76°C. De ce fait, le fait que les simulations avec $T_{sol} = T_{liq} = 29,76^\circ\text{C}$ donnent les meilleurs résultats était prévisible. Il est malgré tout intéressant de remarquer l'important écart qui existe entre ces essais numériques et ceux pour lesquels $T_{liq} - T_{sol} > 0^\circ\text{C}$. S'ils dépendent de la valeur de A_{mush} , l'écart entre $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$ et $T_{liq} - T_{sol} = 1^\circ\text{C}$ va jusqu'à 20 % et 1°C pour $A_{mush} = 10^5 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$. Pour la plus faible valeur de A_{mush} testée ($10^4 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$), l'écart sur la position de l'interface et la fraction fondue dépasse 50 %. Le fait qu'une erreur de seulement 1°C sur l'intervalle de changement de phase modifie les résultats de manière aussi significative montre que la caractérisation du MCP est fondamentale pour pouvoir simuler sa fusion avec le modèle enthalpie-porosité. Pour simuler l'expérience de Gau et Viskanta, il apparaît important d'être certain de la pureté du gallium utilisé. Le caractère pur ou non d'un MCP peut être indiqué par son fournisseur ; il est possible par ailleurs de déterminer cet aspect du MCP à l'aide de mesures calorimétriques DSC, en effectuant plusieurs mesures avec différentes vitesses de chauffe ou avec des échantillons du MCP de masses différentes. [188]

Pour le cas 2, l'écart avec l'expérience diminue avec $T_{liq} - T_{sol}$; c'est la plus grande plage de changement de phase, $T_{liq} - T_{sol} = 4^\circ\text{C}$, qui donne les meilleurs résultats. Ici aussi, cette valeur optimale est à relier à l'évolution de la température du MCP de la paraffine pendant le changement de phase. Celle-ci est représentée Figure 48 pendant la montée en température sensible solide, et pendant le plateau de changement de phase. On peut y voir une différence entre expérience et simulation, présente quelle que soit la valeur de $T_{liq} - T_{sol}$. Dans la simulation, la température évolue quasi linéairement pendant le

réchauffement de la phase sensible solide, puis une rupture de pente survient lorsque le changement de phase commence. Ce comportement est dû au fait que le modèle enthalpie-porosité suppose que l'ensemble de l'absorption de chaleur latente est répartie uniformément entre les températures de solidus et de liquidus ; en dehors de cette plage, la capacité thermique (sensible) est prise constante. Expérimentalement, la pente de la courbe diminue progressivement entre sa valeur maximale au début de l'essai (20°C), et le plateau de changement de phase autour de 34°C. Ce comportement est cohérent avec les mesures calorimétriques effectuées sur la paraffine ; la courbe de capacité thermique équivalente mesurée par DSC est montrée Figure 51. On peut voir que l'absorption de chaleur liée au changement de phase n'est pas uniforme avec la température : la capacité thermique équivalente amorce une croissance progressive, qui débute à une température inférieure à 30°C, avant d'atteindre un pic autour de 35°C.

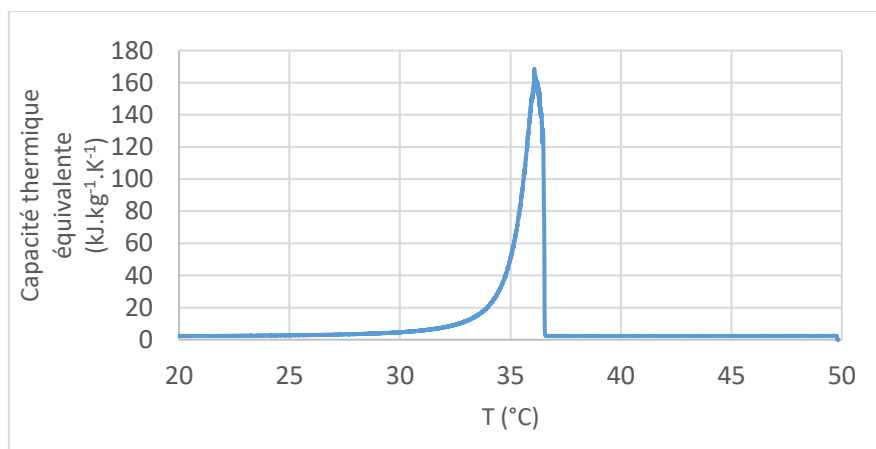


Figure 51 : Courbe de capacité thermique équivalente de la RT35-HC en fusion, déduite de mesures DSC

Le changement de phase de la paraffine s'effectue ainsi sur une plage de température assez large ; il peut ainsi sembler logique que l'augmentation de la plage de changement de phase améliore l'accord avec l'expérience. On peut voir sur la Figure 48 que, pour les plus grandes valeurs de $T_{liq} - T_{sol}$, la température simulée est effectivement plus souvent proche de l'expérience, la courbe de la simulation croisant la courbe expérimentale plus tôt. L'écart de température est maximal au niveau de la rupture de pente au début du plateau ; la température à cet instant est égale à T_{sol} . La température expérimentale étant alors plus faible, cela explique la diminution avec $T_{liq} - T_{sol}$ du critère d'écart maximal avec l'expérience montré Table 7. Cependant, la chaleur n'étant pas absorbée uniformément avec la température, une diminution trop importante de T_{sol} ne donnerait pas un bon accord : on observerait un plateau de changement de phase très pentu, occupant une importante gamme de température. Sous sa forme la plus classique, le modèle enthalpie-porosité fait l'hypothèse que la fraction liquide dépend linéairement de la température sur la plage de changement de phase, ce qui implique une absorption de chaleur indépendante de la température pendant le changement de phase. Ainsi, le modèle tel qu'il est utilisé ici ne peut pas représenter une répartition non uniforme de l'absorption de chaleur latente avec la température. Pour la simulation de la charge d'un système de stockage dans un contexte industriel, simuler précisément l'évolution de température n'est pas une priorité. Le temps de fusion et les niveaux de température sont correctement prédits, comme on peut le voir sur la Figure 48 ; ces prédictions sont suffisantes pour exploiter le modèle pour le dimensionnement ou la prédiction des performances d'un module de stockage.

III.4.4. Grandeurs pertinentes pour la validation du modèle

Les résultats de l'étude paramétrique appellent un dernier commentaire, qui ne concerne pas l'influence des deux paramètres sur les résultats, mais les grandeurs et données à exploiter pour étudier cette influence. Pour les deux cas d'étude, les écarts de température avec l'expérience apparaissent comme étant globalement bons pour tous les essais numériques. Pour la majorité des simulations menées pour le cas 1, et pour la totalité des simulations du cas 2, l'écart de température moyen est inférieur à 1°C. Sur les systèmes industriels, la précision des mesures de température n'est en général pas inférieure à 1°C ; ainsi, en se basant uniquement sur les températures, tous les jeux de valeurs de A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$ donnant un écart moyen inférieur à ce seuil pourraient être jugés acceptables.

Si l'on s'intéresse à la position de l'interface et à la fraction fondue pour le cas 1, les variations des différents écarts selon A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$ sont bien plus importantes. La majorité des essais numériques dont la température se compare bien à l'expérience présente, pour les deux autres grandeurs, des écarts à l'expérience qui ne sont, à contrario, pas raisonnablement acceptables. Par exemple, pour $T_{liq} - T_{sol} = 0^\circ\text{C}$, la simulation avec $A_{mush} = 10^5 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ a un écart de température moyen à l'expérience correct (0,77°C en moyenne), mais l'écart moyen sur la fraction fondue est de 23%. De fait, on peut voir Figure 39 que, pour ce calcul-ci, la fusion s'effectue plus vite que dans l'expérience ; la fraction fondue est toujours supérieure à la mesure expérimentale, d'une valeur de 0,06 en moyenne. Augmenter la constante de zone pâteuse à une valeur de $A_{mush} = 10^7 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ permet un gain non négligeable de 7% de l'accord sur la fraction fondue, et un meilleur accord sur l'évolution transitoire de cette grandeur, les courbes de la simulation et de l'expérience se rejoignant à partir de 7 min environ sur la Figure 39.

Il apparaît ainsi que la température du MCP n'est pas un critère optimal pour la validation du modèle de simulation. Les faibles valeurs d'écart de température observées pour la majorité des essais numériques pourraient amener à valider des valeurs de A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$ non optimales, voire même non acceptables au vu des autres grandeurs comparées. On pourrait conclure qu'afin de valider un choix de paramètres sur des résultats expérimentaux, il est préférable de se baser sur d'autres grandeurs que la température. Pour le cas étudié ici, la fraction liquide se montre être bien plus pertinente pour la validation, d'autant plus que cette grandeur est importante dans l'évaluation des performances d'un système de stockage thermique. Cependant, mesurer une fraction fondue expérimentalement n'est à priori pas simple, en particulier sur un module de stockage de taille industrielle. Les mesures expérimentales de Gau et Viskanta ont pu être obtenues du fait que leur dispositif est un banc d'essais de taille laboratoire : la fraction fondue est mesurée en vidant le gallium liquide de la cavité, interrompant le processus de fusion (les neuf mesures faites au cours du temps nécessitent chacune un essai différent) [192]. Une conclusion plus réaliste serait que, si l'on ne dispose que de mesures de température expérimentales, une attention particulière doit être prêtée aux mesures à utiliser pour la validation de la simulation, et à la méthode de comparaison des résultats de calcul aux mesures. Pour le cas de l'expérience de Gau et Viskanta, une préconisation pourrait être d'utiliser pour la validation l'écart de température maximal, plutôt que l'écart de température moyen. Bien qu'il reste assez faible dans l'absolu (entre 1,5 et 3°C pour la majorité des essais numériques), ses variations avec les deux paramètres sont d'une part plus importantes, permettant de mieux discriminer les essais, et ce critère d'écart suit d'autre part la même tendance avec A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$ que ceux sur la fraction fondue.

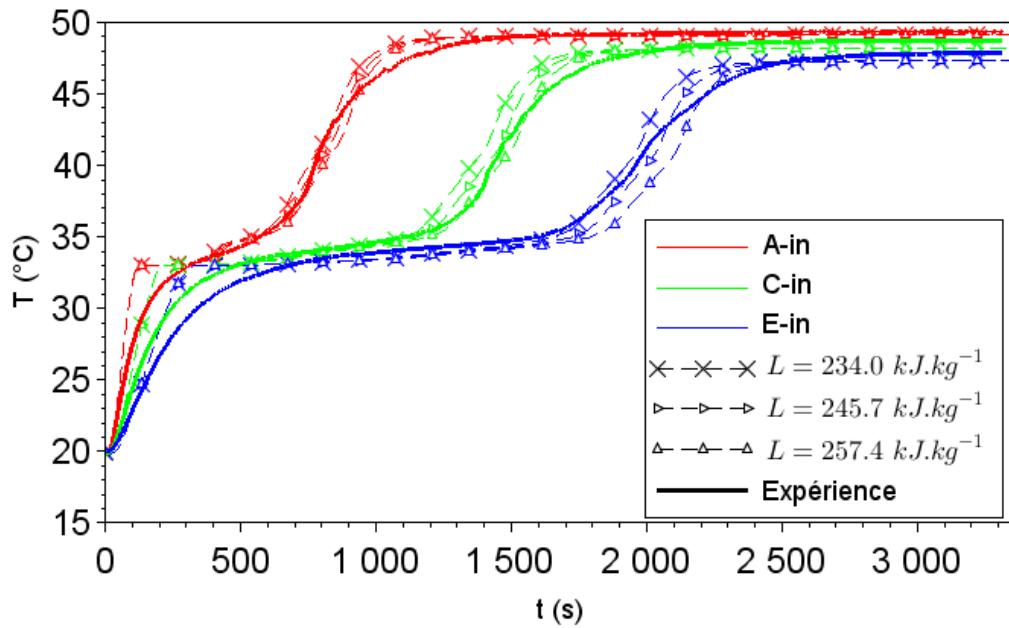
III.5. Influence de la chaleur latente de changement de phase

Dans un second temps, on s'intéresse aux effets de la chaleur latente, qui intervient dans le modèle dans le terme source de l'équation de l'énergie (équation (50)). La motivation de l'étude de ce paramètre vient, d'une part, de son importance pour un système de stockage thermique, la chaleur latente du MCP constituant la majeure partie de la capacité de stockage. D'autre part, l'incertitude communément admise sur la valeur de cette grandeur physique est de 10 % [189], [190], ce qui est non négligeable au vu de son caractère dimensionnant pour un système de stockage.

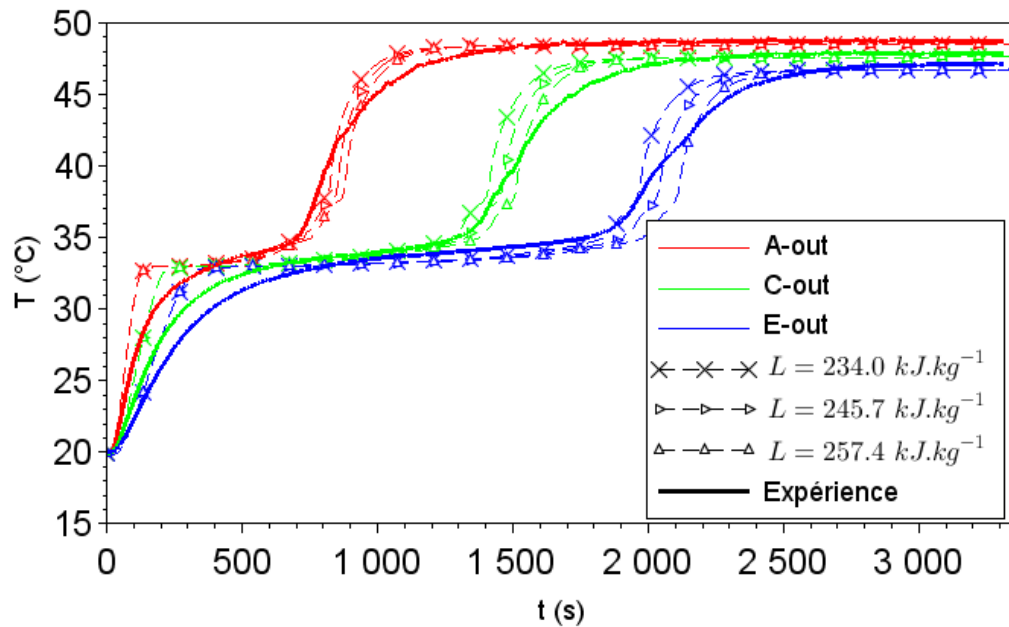
Afin d'étudier l'impact de la chaleur latente sur les résultats de simulation, des simulations avec différentes valeurs sont menées pour le cas 2. Pour l'étude croisée de A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$ présentée dans la section précédente, la valeur adoptée pour la chaleur latente de la RT35-HC est de $L = 245,7 \text{ kJ.kg}^{-1}$. La comparaison avec d'autres mesures de la chaleur latente de l'eicosane montre que cette valeur est sujette à caution. Dans la littérature, plusieurs auteurs s'accordent sur une valeur entre 247 et 248 kJ.kg^{-1} [197]–[200], tandis que Jiang et al. [205] donnent une valeur de $L = 237,1 \text{ kJ.kg}^{-1}$. De son côté, le fournisseur de la RT35-HC (Rubitherm®) donne $L = 240 \text{ kJ.kg}^{-1}$, avec une barre d'erreur de 7,5% [193].

Afin d'observer les effets d'une déviation de quelques % de la valeur de L , on teste deux valeurs supplémentaires, à savoir $L = 234,0 \text{ kJ.kg}^{-1}$ et $L = 257,4 \text{ kJ.kg}^{-1}$, qui correspondent à une déviation de 5% de la valeur de départ. Pour ces simulations, les autres paramètres sont fixés à $A_{mush} = 10^4 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$, et $T_{liq} - T_{sol} = 2^\circ\text{C}$ (soit $T_{sol} = 33^\circ\text{C}$ et $T_{liq} = 35^\circ\text{C}$, l'intervalle de changement de phase étant toujours centré autour de 34°C). Ces deux essais numériques sont comparés à celui effectué avec les mêmes valeurs de A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$ lors de l'étude croisée de la section précédente, pour lequel $L = 245,7 \text{ kJ.kg}^{-1}$.

L'évolution transitoire de la température dans le MCP est représentée Figure 52 pour les trois valeurs de chaleur latente testées. La montée en température de la phase sensible solide, au début de la charge, est identique pour les trois essais. Le plateau de température caractéristique du changement de phase voit sa longueur augmenter avec la chaleur latente ; ainsi, la phase de chauffe de la phase sensible liquide commence d'autant plus tard que la valeur de la chaleur latente est élevée. Avant le début de cette phase, les plateaux de changement de phase sont confondus pour les trois simulations. Enfin, pour l'ensemble des points du MCP dont la température est tracée, l'évolution de température pendant la chauffe sensible liquide apparaît identique pour les trois essais numériques, avec un décalage temporel d'un essai à l'autre du fait de la durée variable du changement de phase. Ainsi, comme on pouvait logiquement s'y attendre, la valeur de la chaleur latente influence uniquement la durée du changement de phase : plus elle est élevée, plus l'énergie nécessaire pour fondre l'ensemble du MCP est importante, augmentant la durée du plateau de changement de phase. Les montées en température des phases sensibles du solide et du liquide ne sont pas affectées, de même que l'évolution transitoire de la température pendant le changement de phase.



(a)



(b)

Figure 52 : Evolution de la température du MCP pour le cas 2 selon la valeur de la chaleur latente Thermocouples A, C et E

(a) : Thermocouples proches du tube (-in) ; (b) : Thermocouples proches de la calandre (-out)

Au vu des courbes de température, les trois valeurs de chaleur latente pourraient sembler acceptables pour reproduire les résultats expérimentaux. En effet, c'est uniquement durant la montée en température de la phase sensible liquide que les températures des trois essais numériques ne sont pas égales. Comme on peut le voir sur la Figure 52, durant cette montée en température, les trois essais sont proches des résultats expérimentaux ; les trois courbes de température croisent celle de

l'expérience à un instant donné. Cependant, l'étude paramétrique de la section précédente a montré que la température du MCP n'était pas un critère suffisant pour la validation d'un essai numérique, d'autres grandeurs pouvant se montrer éloignées de l'expérience malgré l'accord sur la température (cf. section III.4.4).

Pour la simulation, la chaleur latente a essentiellement un effet sur la longueur du plateau de température qui caractérise le changement de phase. Cette longueur est directement liée au temps de fusion ; on peut donc s'attendre à ce que la chaleur latente ait une influence sur le temps de fusion, qui soit plus facile à quantifier que son influence sur la température. Afin d'évaluer l'effet de la chaleur latente sur le temps de fusion, le temps nécessaire pour atteindre une fraction fondue globale de 95% a été calculé pour chacune des trois valeurs. L'écart de température moyen et maximal avec l'expérience au cours du temps a été calculé également. Ces différentes données quantitatives sont rassemblées dans la Table 9. Les écarts de température présentés sont moyennés sur les 10 positions dans le plan (r, z) où des thermocouples sont situés dans la section d'essais (cf. Figure 33). Comme on peut le voir, la dépendance du temps de fusion à la chaleur latente se montre non négligeable. Une diminution ou une augmentation de la chaleur latente entraîne une évolution du temps de fusion dans le même sens ; pour une variation de 5% de la valeur de chaleur latente, la variation du temps de fusion est de 69 s, soit 3,5%. En revanche, les écarts de température varient très peu avec la chaleur latente. La variation de l'écart moyen est inférieure à 0,1°C sur les trois valeurs testées ; la valeur de cet écart est au maximum de 0,8°C, ce qui est inférieur à la précision des thermocouples utilisés sur les systèmes industriels. La variation de l'écart maximal est de 0,3°C ; sa valeur est identique pour les simulations avec $L = 245,7 \text{ kJ.kg}^{-1}$ et $L = 257,4 \text{ kJ.kg}^{-1}$.

$L \text{ (kJ.kg}^{-1}\text{)}$	$\tau_{95} \text{ (s)}$	Ecart de température avec l'expérience	
		Ecart moyen (°C)	Ecart maximal (°C)
234,0	1880	0,78	4,9
245,7	1949	0,69	4,6
257,4	2018	0,72	4,6

Table 9 : Temps de fusion et écart de température avec l'expérience selon la valeur de la chaleur latente (cas 2)

Ainsi, on retrouve avec la chaleur latente un effet que l'on avait constaté avec la constante de zone pâteuse et l'intervalle de changement de phase. Comme on pouvait s'y attendre, la chaleur latente a un impact non négligeable sur la fraction fondue, une variation de la valeur de chaleur latente induisant une variation du même ordre de grandeur sur le temps de fusion. En revanche, son influence sur la température est telle que la comparaison avec l'expérience ne permet pas de statuer sur une valeur qui optimiserait l'accord entre simulation et expérience. Déterminer expérimentalement avec précision l'instant où la fraction globale de MCP fondu atteint une certaine valeur ne semble pas possible à l'aide des relevés de température seuls. Il n'est donc pas possible de déterminer la valeur de chaleur latente sur la base du temps de fusion en se rapportant aux mesures expérimentales. Pour l'étude menée en section III.4 sur les autres paramètres du modèle, la valeur de $L = 234,0 \text{ kJ.kg}^{-1}$ est écartée car la température obtenue pour les thermocouples en position C et E est supérieure à la température expérimentale pendant la montée en température sensible de la phase liquide (cf. Figure 52). Parmi les deux valeurs restantes, c'est la valeur de $L = 245,7 \text{ kJ.kg}^{-1}$ qui est retenue, car elle plus en accord avec l'incertitude de $240 \pm 18 \text{ kJ.kg}^{-1}$ donnée par le fournisseur de la RT35-HC, et avec les mesures effectuées sur l'eicosane dans la littérature, présentées plus tôt dans cette section.

Le temps de fusion étant un indicateur de performance clé d'un système de stockage, les résultats obtenus appellent plusieurs commentaires. D'une part, l'impact du premier ordre de la chaleur latente sur le temps de fusion souligne l'importance de disposer d'une caractérisation précise du MCP pour la simulation d'un système de stockage. La qualité du dimensionnement d'un module de stockage, ou des autres composants et paramètres d'un procédé dans lequel celui-ci seraient intégrés, seront très sensibles à la précision avec laquelle la chaleur latente du MCP est connue. D'autre part, il convient ainsi de garder à l'esprit cette imprécision dans un contexte de dimensionnement ou de prédiction des performances. Connaissant l'incertitude sur la chaleur latente, l'incertitude associée sur le temps de fusion peut être déterminée en effectuant deux calculs avec les valeurs haute et basse de L , puis être prise comme une donnée pour le dimensionnement.

III.6. Synthèse du chapitre

Ce chapitre s'est attaché à étudier l'influence sur les résultats de simulation de trois paramètres du modèle enthalpie-porosité de Voller, à savoir la constante de zone pâteuse (A_{mush}), l'intervalle de température du changement de phase ($T_{liq} - T_{sol}$), et la chaleur latente (L). Il s'agit de paramètres fondamentaux du modèle, car ils sont en lien direct avec la phénoménologie du changement de phase. Les deux premiers paramètres ont été étudiés de manière croisée, sur deux cas d'étude présentant des caractéristiques différentes en termes de géométrie et de propriétés du MCP, permettant de mettre en évidence l'influence du cas d'étude sur la sensibilité du modèle à ses paramètres. Pour cette étude croisée, un total de 41 simulations a été effectué, à raison d'une vingtaine de simulations pour chaque cas. L'analyse des résultats s'est fondée sur plusieurs critères d'écart quantitatifs entre simulation et expérience ; cela a permis à la fois d'observer l'influence croisée des paramètres, et d'identifier les valeurs permettant le meilleur accord entre simulation et expérience. En outre, une étude paramétrique de la chaleur latente a été effectuée sur l'un des deux cas d'étude. Son effet sur le temps de fusion, et également sur l'évolution transitoire de la température du MCP et son écart avec l'expérience ont été mis en évidence.

Plusieurs constats sont à dégager de l'étude menée :

- La sensibilité des résultats de simulation à A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$ est fortement dépendante du cas d'étude. Lorsque les mouvements de convection naturelle du MCP fondu sont importants, les résultats se montrent très sensibles aux deux paramètres. A contrario, lorsque les mouvements liquides sont moindres, l'influence de A_{mush} devient pratiquement nulle, et celle de $T_{liq} - T_{sol}$ est également moins importante, bien qu'elle reste non négligeable.
- L'influence relative de ces deux paramètres est elle aussi dépendante du cas d'étude. Lorsque les mouvements de convection naturelle sont importants, A_{mush} est le paramètre le plus influent. Lorsqu'ils sont plus faibles, c'est au contraire la sensibilité à $T_{liq} - T_{sol}$ qui est plus importante. Malgré tout, l'influence de $T_{liq} - T_{sol}$ reste non négligeable pour les deux cas d'étude ; cela montre bien qu'il s'agit d'un paramètre fondamental du modèle.
- Il apparaît qu'il est possible de compenser une erreur ou une imprécision sur la valeur de A_{mush} ou de $T_{liq} - T_{sol}$ en faisant varier l'autre paramètre ; en effet, deux essais numériques ayant des valeurs différentes mais proches pour les deux paramètres peuvent aboutir à des résultats globalement similaires. Une conséquence de ce constat est qu'il n'existe pas un unique jeu de valeurs de A_{mush} et $T_{liq} - T_{sol}$ qui optimise l'accord avec l'expérience ; plusieurs jeux de valeurs optimales sont envisageables. Concernant plus spécifiquement l'optimum de A_{mush} , sur le cas

de la fusion de gallium dans une cavité, l'ensemble des valeurs situées au-delà d'une certaine valeur seuil de A_{mush} (dépendante de $T_{liq} - T_{sol}$) apparaît convenir pour minimiser l'accord avec l'expérience. Le temps de calcul augmentant avec A_{mush} , il est donc possible d'identifier une valeur optimale comme un compromis entre la précision des résultats et la durée du calcul.

- La chaleur latente a également une influence importante, une variation de sa valeur entraînant une variation du même ordre de grandeur sur le temps de fusion total. La sensibilité du modèle à la chaleur latente et à $T_{liq} - T_{sol}$ montre l'importance de la caractérisation du MCP dans la simulation du changement de *phase* solide-liquide.

Ayant constaté la sensibilité importante que le modèle peut avoir aux trois paramètres, et leurs effets croisés, l'identification précise des valeurs à leur donner pour une étude apparaît indispensable. Au vu des différents résultats, les préconisations générales suivantes seraient à dégager quant au choix des valeurs des paramètres.

T_{sol} , T_{liq} et la chaleur latente sont des données de caractérisation du MCP. Pour les deux cas étudiés ici, les valeurs de $T_{liq} - T_{sol}$ permettant le meilleur accord avec l'expérience sont cohérentes avec les informations dont on dispose sur le MCP. Pour le cas de la fusion de gallium dans une cavité, le gallium utilisé est quasi pur, et c'est $T_{liq} - T_{sol} = 0^{\circ}\text{C}$ qui donne le meilleur accord. Pour le cas de la fusion dans un système de stockage tube-calandre, les résultats de calorimétrie DSC montrent que le changement de phase de la paraffine utilisée s'effectue sur une large plage de température c'est ainsi la plus grande valeur de $T_{liq} - T_{sol}$ testée (4°C) qui donne les meilleurs résultats. Cependant, la répartition de l'absorption de chaleur sur cette plage n'étant pas uniforme, la forme des courbes de température au début du changement de phase n'est pas reproduite par la simulation. Comme évoqué, il peut être difficile de caractériser avec précision le comportement thermique d'un MCP pendant le changement de phase. Cependant, les résultats de la présente étude ne permettent pas de dégager de méthode ou de règle permettant de déterminer a priori des valeurs pour $T_{liq} - T_{sol}$ et pour la chaleur latente ; en effet, pour le cas du système de stockage tube-calandre, aucun essai numérique ne reproduit l'évolution de température au début de la fusion de manière pleinement satisfaisante (cf. Figure 48). Ainsi, les mesures calorimétriques restent l'unique moyen d'estimer des valeurs de ces paramètres, en dépit des incertitudes qui leurs sont associées.

Une perspective d'amélioration du modèle pourrait être de prendre en compte directement une fonction de capacité thermique équivalente en fonction de la température, mesurée par DSC. Les modèles avec capacité thermique équivalente, cités dans l'étude bibliographique du chapitre II, intègrent directement une telle fonction via la dépendance de la capacité thermique du MCP à la température, mais les modèles de ce type présentent l'inconvénient de nécessiter des pas de temps très faibles. Pour s'affranchir de ce défaut, une possibilité pourrait être de conserver l'écriture de l'enthalpie comme la somme d'une contribution sensible et d'une contribution latente, comme le fait le modèle enthalpie-porosité, et d'adopter une relation non linéaire entre la fraction liquide et la température. Rösler et Brügemann [109] présentent un modèle de ce type, dans lequel la relation fraction liquide – température prend la forme d'une fonction sigmoïde ; la formulation de l'équation de l'énergie et la résolution numérique du problème sont modifiés par rapport au modèle enthalpie-porosité sous sa forme classique, afin de tenir compte de ce changement. S'il est possible d'étendre leur approche à d'autres formes de fonctions, on pourrait alors choisir des températures de solidus et de liquidus qui encadrent la plage de température dans laquelle la courbe $c_p = f(T)$ du MCP effectue sa lente croissance jusqu'au point de fusion, et choisir la valeur de chaleur latente et la relation entre la fraction liquide et la température de manière à ce que l'enthalpie massique du MCP en fonction de sa

température soit conforme aux mesures effectuées par DSC. Un tel modèle, s'il est possible de le mettre en œuvre, permettrait de mieux reproduire l'évolution de la température pour un MCP changeant de phase sur une grande plage de température, tout en conservant les avantages du modèle enthalpie-porosité pour l'équation de l'énergie.

Concernant A_{mush} , il est bon de noter dans un premier temps que sa valeur n'a d'importance que lorsque les mouvements de convection naturelle du MCP liquide ont une contribution importante aux transferts de chaleur. Un système de stockage tubes-calandre de taille prototype ou industrielle sera très probablement dans ce cas-ci ; en effet, si les dimensions géométriques du système sont importantes, il y aura dans la calandre des grandes zones sans obstacles (ailettes ou inserts conducteurs) occupées par le MCP, dans lesquelles des boucles de convection pourront se développer. Dans le cas de fusion du gallium étudié ici, il existe une valeur seuil de A_{mush} au-delà de laquelle toute valeur semble convenir. Cependant, il n'est pas certain que ce résultat soit applicable pour tous les cas d'étude. En effet, dans leur étude numérique et expérimentale sur la fusion d'une paraffine dans un cylindre, Shmueli et al. [165] identifient une unique valeur optimale pour la constante (valant $A_{mush} = 10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$) ; les valeurs inférieures comme supérieures à cet optimum donnent des résultats plus éloignés de l'expérience. Ainsi, en l'absence de données plus générales sur l'influence de A_{mush} sur les résultats, il ne semble pas possible de prédire la valeur à donner à A_{mush} pour retrouver les résultats expérimentaux. Effectuer une étude paramétrique sur A_{mush} semble être la seule possibilité pour déterminer sa valeur, lorsque cela est possible ; en effet, si l'on ne dispose pas de résultats expérimentaux sur lesquels valider la simulation, déterminer A_{mush} ne semble pas possible. Pour étudier plus en profondeur l'influence de A_{mush} sur les résultats selon le cas d'étude, une perspective du présent travail pourrait être de faire une étude expérimentale croisée des facteurs influençant à priori l'impact de A_{mush} (dimensions géométriques, propriétés physiques du MCP, conditions aux limites, ...), sur une géométrie donnée, afin d'établir une méthode de prédiction de la valeur à donner à A_{mush} en fonction des paramètres du problème. Une telle méthode, s'il est possible de l'établir, permettrait de lever l'indétermination qui pèse sur A_{mush} , qui rend la validité de la simulation incertaine si l'on ne dispose pas de données expérimentales auxquelles la comparer.

Enfin, l'étude a permis de soulever un autre aspect important, à savoir la difficulté de valider un modèle de simulation sur la base des seuls relevés de température dans le MCP. Comparer uniquement la température entre simulation et expérience peut amener à valider des simulations pourtant très éloignées de l'expérience en termes de fraction fondue ou de position de l'interface. Ces deux grandeurs apparaissent comme plus pertinentes pour la validation. Toutefois, elles sont de manière générale plus difficiles à mesurer expérimentalement que la température, en particulier dans un système de stockage de grande taille, bien que l'observation du flux de chaleur à la paroi des tubes puisse être envisagée pour estimer la fraction fondue de manière approchée. Si l'on ne dispose que de mesures de température, la méthode de validation la plus fiable semble être de se baser sur l'écart maximal de température plutôt que sur l'écart moyen ; en effet, sur le cas de fusion du gallium dans une cavité, l'écart maximal suit la même tendance que ceux sur la fraction fondue et la position de l'interface, et présente des variations significatives d'un essai à l'autre. En pratique, cette comparaison quantitative pourra être faite après la comparaison graphique des courbes d'évolution de température dans le temps, plus qualitative, pour discriminer les éventuels essais donnant des relevés de température proches, comme ceux du cas du module de stockage tube-calandre étudié ici.

Chapitre IV. Modélisation multi-échelles

L'étude menée dans le précédent chapitre a permis d'identifier des bonnes pratiques pour l'utilisation et le paramétrage optimal du modèle enthalpie-porosité, pour la simulation 3D fine des phénomènes de changement de phase solide-liquide. Dans le présent travail, ce modèle CFD a vocation à être utilisé au sein d'un modèle multi-échelles d'un module de stockage de vapeur par MCP. La simulation fine de la fusion ou de la solidification du MCP doit permettre de dégager des lois sur les phénomènes physiques d'échelle fine dans la calandre du module de stockage, tels que la convection naturelle de la phase liquide, ou l'influence sur le transfert de chaleur des ailettes et des inserts conducteurs disposés dans le MCP. L'objectif est d'utiliser ces lois pour le dimensionnement et la prédiction des performances du module.

Dans ce chapitre, une approche de modélisation multi-échelles pour un module de stockage est proposée ; celle-ci s'appuie à la fois sur le modèle CFD étudié précédemment, et sur un modèle de dimensionnement à mailles plus grossières. L'idée directrice de la méthodologie de modélisation est d'abord exposée, puis le modèle de dimensionnement mis en place est présenté, ainsi que la méthode permettant d'utiliser ce modèle de manière conjointe avec le modèle CFD. Le modèle multi-échelles est ensuite testé sur un cas concret de tube à ailettes. Les tubes utilisés pour le test du modèle sont ceux d'un module de stockage de vapeur par MCP prototype, disponible au CEA Grenoble. Le modèle est testé pour le cas de la charge de vapeur uniquement, pendant laquelle de la vapeur se condense dans les tubes, et le MCP fond. Après avoir décrit le module prototype, et le modèle CFD mis en place pour le tube à ailettes, une étude est menée à l'aide du modèle CFD, permettant d'obtenir des informations sur les transferts de chaleur au sein du module. Les résultats du modèle de dimensionnement, tenant compte de ces informations, sont ensuite comparés à ceux du modèle CFD, afin de valider la pertinence de l'approche de modélisation multi-échelles proposée.

IV.1. Méthodologie de modélisation multi-échelles

On dit d'une méthodologie de simulation numérique qu'elle suit une *approche multi-échelles* lorsqu'elle fait intervenir plusieurs modèles de simulation ayant des résolutions spatiales ou temporelles différentes. Le recours à une approche multi-échelles est utile lorsque l'on cherche à résoudre numériquement un problème dans lequel l'échelle spatiale ou temporelle caractéristique des phénomènes physiques est très petite devant celle du domaine de l'espace, ou de la durée temporelle, sur lequel le problème est résolu.

Le problème de la simulation de la fusion ou de la solidification du MCP dans un système de stockage de vapeur par MCP est un problème de ce type, pour deux raisons. D'une part, un modèle de dimensionnement d'un module se doit de représenter avec précision la contribution des ailettes et inserts conducteurs disposés dans le MCP aux transferts de chaleur dans le module. En effet, cette contribution est à priori du premier ordre, car le rôle des ailettes et inserts est d'intensifier les transferts de chaleur au sein du MCP. Les dimensions des ailettes et des inserts (épaisseur, longueur, ...) sont souvent petites par rapport à celles du module, et leur géométrie peut être complexe. Pour simuler les transferts de chaleur avec une telle géométrie, il apparaît donc nécessaire de recourir à des simulations numériques à maille fine par rapport aux dimensions du module. D'autre part, comme les études numériques du chapitre précédent l'ont montré, les transferts thermiques au sein du MCP sont souvent

influencés par les mouvements de convection naturelle qui animent la phase liquide. Or, l'échelle caractéristique de ces mouvements est petite par rapport aux dimensions d'un module de stockage. En effet, comme expliqué en section III.1 (p. 63), les boucles de convection naturelle dans la phase liquide peuvent être de petite taille lorsqu'elles se développent dans des espaces géométriquement réduits, tels qu'une couche de MCP liquide suffisamment fine (début d'une fusion), ou bien entre des ailettes et des inserts rapprochés les uns des autres. Par ailleurs, la simulation numérique de boucles de convection naturelle requiert l'utilisation d'un modèle CFD à maille fine, afin de représenter de manière précise la structure de l'écoulement, et les transferts de chaleur qui y sont associés.

L'échelle d'un modèle de dimensionnement et de prédiction des performances est en revanche bien plus grande : il s'agit de celle des dimensions d'un module. En effet, dans un module de stockage, les transferts de chaleur peuvent ne pas être uniformes le long des tubes de vapeur, principalement du fait que le changement de phase de l'eau liquide / vapeur qui y circule (condensation lors d'une charge, ébullition lors d'une décharge) ne s'effectue pas toujours sur toute la hauteur du tube. D'une part, si de la vapeur surchauffée est injectée à l'entrée du tube en charge, la vapeur va se refroidir jusqu'à saturation sur une certaine longueur de tube avant de démarrer sa condensation. De même, si de l'eau liquide sous-refroidie est injectée en décharge, elle va se réchauffer sur une certaine longueur de tube avant que son ébullition ne commence. D'autre part, si le flux de chaleur échangé est suffisamment fort, la condensation ou l'ébullition sera terminée avant que l'écoulement de fluide caloporteur n'atteigne la sortie du tube : au-delà de la colonne où se produit la condensation ou l'ébullition, on aura une longueur de tube occupée uniquement par de l'eau liquide se refroidissant (en charge), ou de la vapeur se surchauffant (en décharge). Ces deux phénomènes sont représentés Figure 53, pour la charge (condensation) et pour la décharge (ébullition).

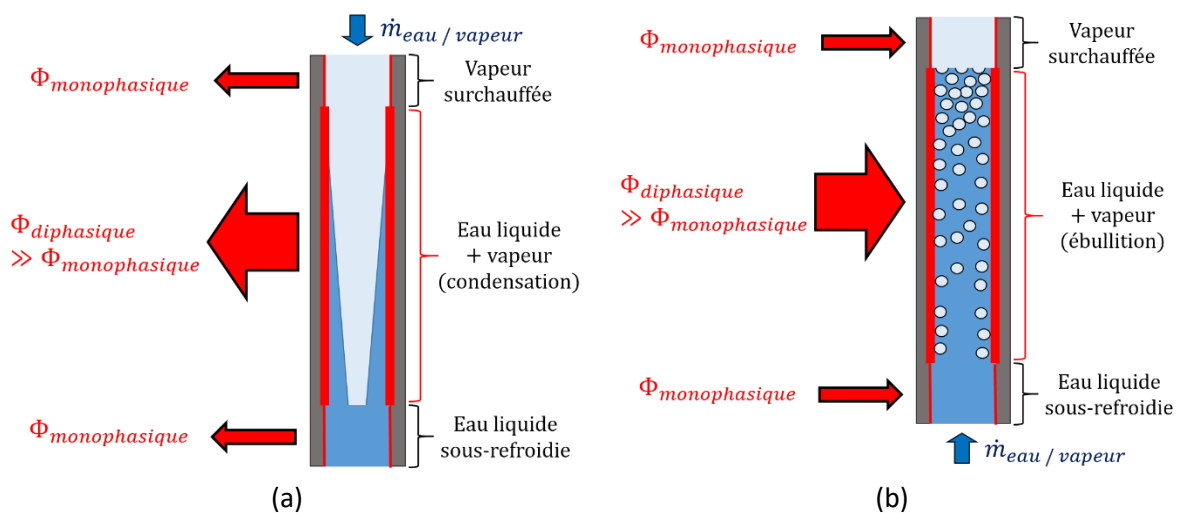


Figure 53 : Schéma de l'évolution de l'état du fluide caloporteur le long de son écoulement dans un tube
(a) : Charge (condensation) – (b) : Décharge (ébullition)

Or, le coefficient d'échange entre l'eau liquide / la vapeur et la paroi interne du tube est nettement plus élevé lorsque le fluide change de phase : pour un fluide circulant à l'intérieur d'une conduite, l'ordre de grandeur du coefficient d'échange est de $10^4 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ pour un fluide diphasique en condensation ou en ébullition, et de 10 ou $10^2 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ pour un fluide monophasique. Le flux de chaleur échangé avec le MCP va ainsi varier fortement selon l'abscisse le long du tube. Du fait de cette non-uniformité des transferts de chaleur, la prédiction précise des performances d'un module de stockage requiert de représenter l'ensemble de la hauteur du module dans le modèle utilisé. Il est

nécessaire de prédire le *niveau d'eau* d'un tube, qui correspond à la hauteur de la surface libre marquant la frontière entre la zone où s'effectue la condensation et la colonne d'eau liquide en charge, ou entre la zone où s'effectue l'ébullition et la colonne de vapeur pure en décharge.

Dans un modèle CFD, afin de représenter correctement un écoulement de convection naturelle entre deux ailettes ou au milieu d'inserts, le maillage des zones de l'espace dans lesquelles des boucles de convection sont susceptibles d'apparaître doit avoir une densité minimale relativement importante ; dans leur étude de la fusion de MCP dans une cavité carrée, Voller et Prakash [99] adoptent un maillage 2D de 40*40 cellules. L'échelle caractéristique nécessaire pour un modèle CFD du changement de phase est donc inférieure d'au moins un ordre de grandeur à la distance inter-ailettes, ou à la dimension caractéristique des inserts. Pour un modèle de dimensionnement, du fait de la nécessité de représenter toute la hauteur des tubes, utiliser un modèle CFD avec une telle finesse est inenvisageable : le calcul d'un point de conception pourrait prendre plusieurs jours à plusieurs semaines (selon le nombre de mailles, la durée simulée, et la puissance de calcul dont on dispose). Si l'on souhaite utiliser uniquement la simulation pour estimer les performances d'un module de stockage, ce qui est la seule possibilité en l'absence de données expérimentales auxquelles se référer, le recours à une approche multi-échelles apparaît ainsi comme indispensable pour la mise en place d'un modèle de dimensionnement.

L'approche de modélisation multi-échelles proposée dans le présent travail se fonde sur l'usage de deux modèles. D'une part, un modèle CFD est utilisé pour simuler à maille fine le changement de phase, les transferts de chaleur et l'écoulement de convection naturelle dans le MCP. Seul le domaine situé à l'extérieur de la paroi interne des tubes (MCP + ailettes / inserts + épaisseur des tubes) est représenté dans ce modèle CFD. D'autre part, un modèle de dimensionnement d'un module de stockage est mis en place ; ce modèle-ci représente l'ensemble du module (MCP + ailettes / inserts + épaisseur des tubes + fluide caloporteur eau liquide / vapeur), avec une taille de maille plus grossière que le modèle CFD. Dans la suite, ce modèle de dimensionnement est appelé *modèle système*. L'écoulement de l'eau liquide / vapeur dans les tubes y est représenté en 1D, à l'aide d'un modèle d'écoulement diphasique homogène (comme expliqué en section II.4, p. 60). Du côté du MCP, les transferts de chaleur y sont représentés à l'aide d'un modèle conductif pur : les mouvements de convection naturelle ne sont pas directement simulés. L'idée fondamentale de l'approche multi-échelles est d'extraire du modèle CFD des informations sur les transferts de chaleur entre la paroi interne du tube et le MCP, et de les intégrer au modèle système afin de retrouver l'échange de chaleur prédit par la CFD. Le modèle système peut de cette manière prédire de manière précise l'énergie absorbée (en charge) ou relâchée (en décharge) par le MCP au cours du temps, en tenant compte des différents phénomènes physiques fins que le modèle CFD simule, à savoir l'intensification des transferts de chaleur liée aux ailettes et aux inserts, et les échanges par convection naturelle entre le MCP et la paroi externe du tube, des ailettes et des inserts. Le modèle système étant à maille plus lâche et de complexité réduite, le temps de calcul est fortement réduit par rapport au modèle CFD. L'intérêt de l'approche est ainsi de construire un modèle système qui présente des temps de calculs compatibles avec les besoins de la conception ou du dimensionnement, tout en représentant les phénomènes physiques de petite échelle influant sur les transferts de chaleur.

L'un des aspects du travail de mise au point de l'approche multi-échelles est de trouver un moyen d'extraire des informations sur les transferts de chaleur entre la paroi du tube et le MCP, à partir d'un nombre limité de calculs CFD. Ces informations devront être sous une forme qui leur permettra d'être

exploitables par le modèle système. Il est proposé de représenter ces échanges de chaleur à l'aide d'une corrélation adimensionnelle. Les échanges de chaleur par convection naturelle sont classiquement décrits par une corrélation exprimant un nombre de Nusselt (noté ici Nu) en fonction d'un nombre de Rayleigh (noté ici Ra). Le nombre de Nusselt est proportionnel au flux de chaleur échangé. Le nombre de Rayleigh mesure l'importance des forces de flottabilité au sein du MCP liquide, qui sont le moteur des mouvements de convection naturelle. Pour l'échange entre le MCP et un tube de vapeur, on peut définir ces deux nombres adimensionnels de la manière suivante :

$$Nu = \frac{\Phi}{S_e(T_p - T_{MCP})} \frac{l_c}{\lambda_{MCP}} \quad (57)$$

$$Ra = g \left(\frac{\beta}{\nu D_{th}} \right)_{MCP} (T_p - T_{MCP}) l_c^3 \quad (58)$$

Plusieurs travaux sur des écoulements de convection naturelle mettent en évidence une corrélation de la forme suivante :

$$Nu = C Ra^n \quad (59)$$

où C et n sont deux paramètres qui dépendent du système étudié. Des corrélations de ce type peuvent être appliquées aussi bien à des écoulements ne mettant pas en jeu de changement de phase [206], [207], qu'à l'écoulement de la phase liquide d'un MCP en fusion ou en solidification [23]–[25], [28], [29], [208]. Comme on souhaite représenter les longueurs de tube occupées respectivement par du fluide diphasique et de l'eau liquide ou de la vapeur monophasique, le modèle système devra à minima être unidimensionnel dans la direction verticale (orientation des tubes). De ce fait, la corrélation extraite de calculs CFD devra être locale : le transfert de chaleur local doit pouvoir être prédit à une abscisse donnée le long d'un tube.

Dans l'équation (57), le flux de chaleur (en W) est noté Φ , il est rapporté à une surface d'échange S_e . Dans la différence de température qui intervient, T_p est la température de la paroi externe du tube, et T_{MCP} est une température représentative du MCP. l_c est une grandeur caractéristique côté MCP. Du fait que l'on recherche une corrélation 1D locale, T_p , T_{MCP} et l_c sont toutes trois à voir comme des grandeurs 1D, définies localement le long du tube. Plusieurs possibilités peuvent être envisagées pour les expressions de T_{MCP} et de l_c . Celles-ci dépendent à priori des grandeurs qui influencent le transfert de chaleur côté MCP : altitude le long du tube, rayon de l'espace annulaire entourant un tube, température et fraction liquide du MCP, etc. La question de la définition de T_{MCP} et de l_c est discutée plus en détail dans la suite de ce chapitre (section IV.4.1.1, p. 85).

La relation $Nu = f(Ra)$ est spécifique au module de stockage considéré : les transferts de chaleur sont influencés à priori par les dimensions géométriques du module (rayon du tube, distance entre deux tubes, ...), et également par la forme, les dimensions et la disposition des ailettes le long des tubes. En effet, le flux de chaleur augmente d'une part avec la surface d'échange entre le MCP et les ailettes. D'autre part, selon leur géométrie, les ailettes peuvent inhiber ou favoriser les mouvements de convection naturelle. Dans un module disposé verticalement, des ailettes circulaires de grand diamètre par rapport à la distance entre les tubes (comme celles du système de stockage de taille laboratoire étudié dans le chapitre III) pourront faire obstacle aux mouvements ascendants ou descendants du MCP liquide sous l'effet des forces de flottabilité. A l'inverse, si les ailettes ne bloquent pas les mouvements verticaux du liquide (comme dans le cas d'ailettes longitudinales, ou d'inserts extrudés

du type de ceux visibles sur la Figure 13-(a), section II.1.2.1.2, p. 22), ceux-ci seront plus importants, et la convection naturelle pourra alors avoir une contribution importante aux transferts de chaleur. Ainsi, à chaque fois que l'on souhaite modéliser une nouvelle géométrie à l'aide de l'approche multi-échelles, la première étape est de mener une étude à l'aide du modèle CFD, afin de déterminer une relation prédisant les transferts de chaleur pour le module de stockage étudié.

La Figure 54 récapitule l'approche de modélisation multi-échelles proposée, et le fonctionnement et l'utilisation des différents modèles qui la composent.

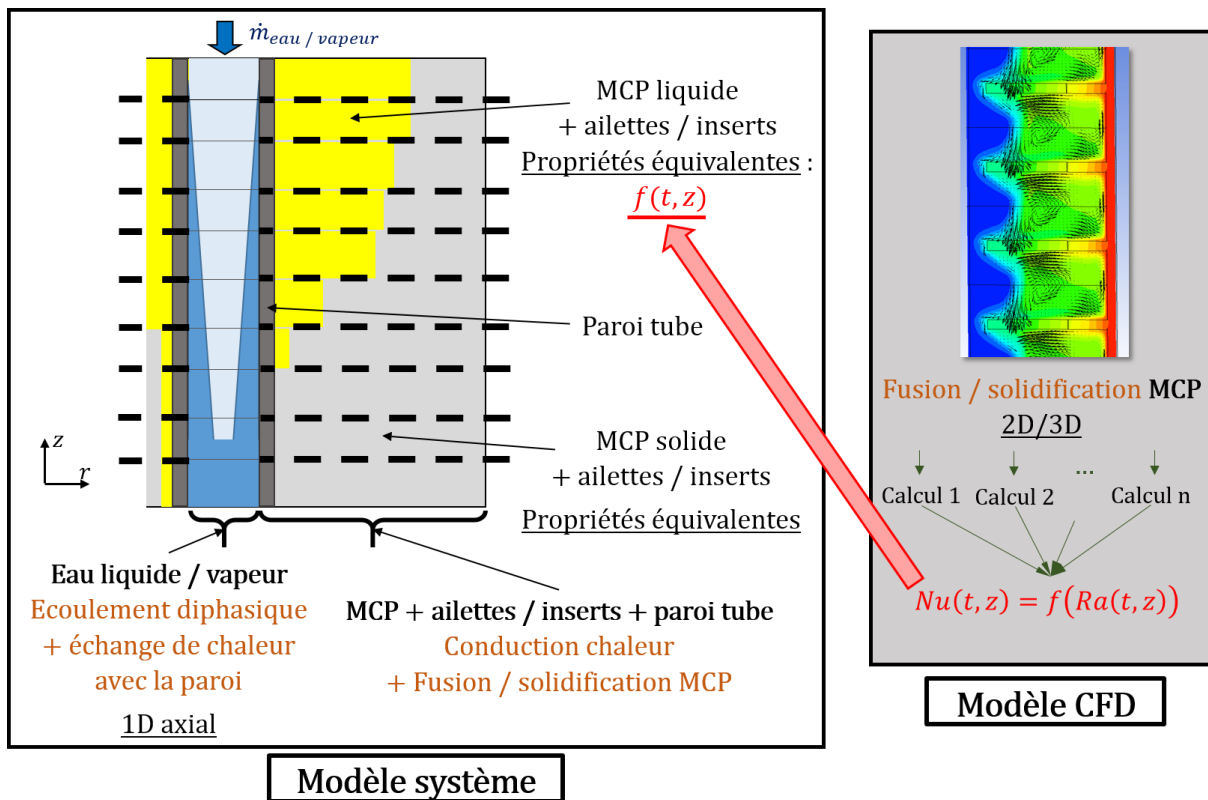


Figure 54 : Schéma récapitulatif de la méthodologie de modélisation multi-échelles

IV.2. Description du modèle

Dans cette section, l'approche de modélisation multi-échelles mise en place est décrite plus en détail. Après avoir présenté le fonctionnement détaillé du modèle système (équations constitutives, discrétisation, résolution numérique), la méthode utilisée pour y inclure les informations sur les transferts de chaleur entre la paroi interne du tube et le MCP, extraites de la CFD, est exposée.

IV.2.1. Modèle système

Le modèle système représente à la fois l'écoulement d'eau liquide de vapeur, les transferts de chaleur dans le tube, les ailettes et inserts et le MCP, et le changement de phase du MCP. La zone de l'espace représentée est celle associée à un unique tube de vapeur dans le module de stockage : le domaine géométrique est ainsi composé de l'intérieur d'un tube où circule l'eau liquide / vapeur, de ce tube, et d'une zone annulaire qui l'entoure où se trouve du MCP au milieu d'ailettes et d'inserts. Le modèle s'inspire de ceux utilisés par plusieurs études dans la littérature [19], [23]–[25], [28]–[31], qui simulent de manière couplée le fluide caloporteur et le MCP dans un module de stockage. [23]–[25], [28]–[30] appliquent des modélisations proches de celle utilisée ici au cas d'un fluide caloporteur monophasique, tandis que [19], [31] modélisent également un système de stockage de vapeur (avec fluide caloporteur diphasique).

Deux discrétisations différentes sont mises en œuvre pour la zone d'écoulement diphasique liquide / vapeur et le tube d'une part, et pour le domaine occupé par le MCP, les ailettes et les inserts d'autre part. L'intérieur du tube est discrétisé en 1D dans la direction de l'écoulement, appelée ici *direction axiale*. La même discrétisation verticale est appliquée au tube. A l'extérieur du tube, un unique matériau homogène représentant l'ensemble constitué par le MCP, les ailettes et les inserts occupe tout le domaine. Dans une maille de ce milieu homogène, le MCP et les ailettes et inserts sont supposés être à la même température. La discrétisation mise en œuvre dans ce domaine est particulière. On introduit un maillage qui s'étend dans la direction axiale et dans la direction perpendiculaire à celle-ci, dite *direction radiale* (géométrie 2D axisymétrique). Les échanges de chaleur dans la direction axiale sont négligés : il n'y a ainsi aucun échange de chaleur entre les mailles dans cette direction, ce qui est représenté par les traits en tirets épais sur la Figure 55. Le domaine est ainsi constitué d'un ensemble de sous-domaines indépendants disposés le long du tube, discrétisés en 1D dans la direction radiale ; on les appelle simplement *sous-domaines* par la suite. Le modèle ne peut ainsi pas être qualifié de modèle 2D, ni de modèle 1D, le domaine de calcul étant discrétisé dans deux directions ; la discrétisation mise en place est intermédiaire entre 1D et 2D. Les frontières entre volumes de contrôle sont prises aux mêmes abscisses le long du tube pour chacun des trois domaines (eau / vapeur ; tube ; MCP + ailettes / inserts) ; le flux de chaleur échangé par chaque sous-domaine de MCP avec la paroi provient ainsi de la maille de paroi qui lui est adjacente. La discrétisation du domaine de calcul est représentée Figure 55.

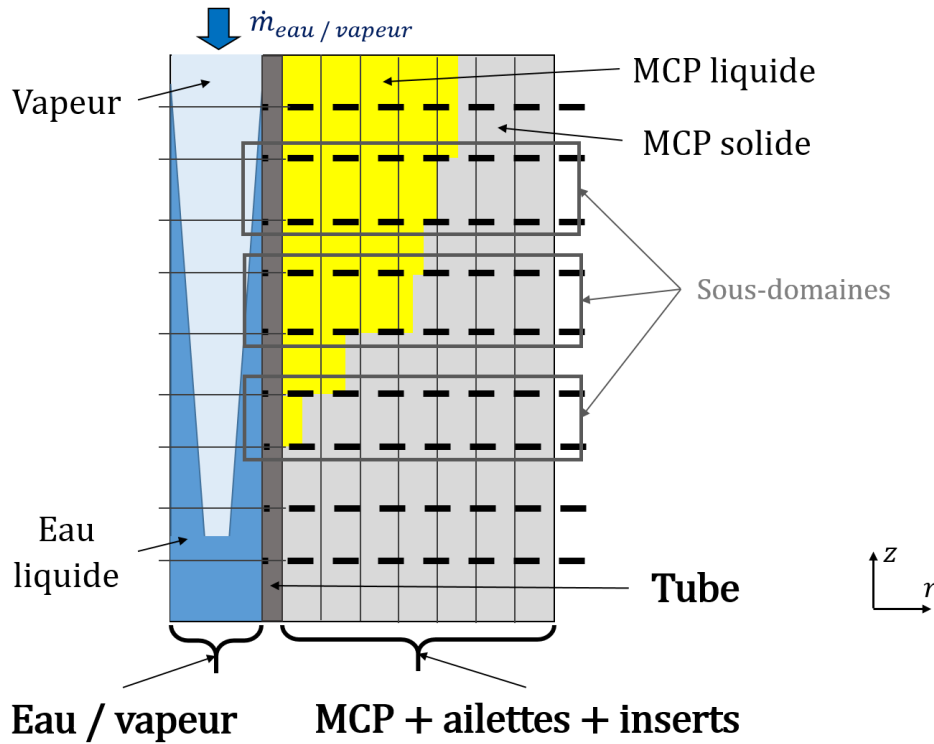


Figure 55 : Schéma de la géométrie axisymétrique et de la discrétisation du modèle système. Le sens d'écoulement et l'état du fluide caloporteur et du MCP sont représentés pour le cas de la charge.

L'écoulement d'eau liquide / vapeur est modélisé selon une approche homogène : les phases liquide et gazeuse sont supposées avoir dans chaque maille la même vitesse et la même température. Les transferts de chaleur axiaux, les effets de la gravité et de la viscosité, et les pertes de charge sont négligés. Ces trois dernières hypothèses permettent de représenter l'écoulement à l'aide de deux équations constitutives seulement, à savoir la conservation de la masse et de l'énergie, obtenues en moyennant les équations locales sur la section de passage :

$$S_{tint} \frac{\partial \rho_{calo}}{\partial t} + \frac{\partial (\dot{m})}{\partial z} = 0 \quad (60)$$

$$S_{tint} \frac{\partial (\rho h)_{calo}}{\partial t} + \frac{\partial (\dot{m} h_{calo})}{\partial z} - c_{tint} \phi_{tint} = 0 \quad (61)$$

Dans les équations (60) et (61), S_{tint} et c_{tint} sont respectivement la section et le périmètre de la conduite, qui sont constants pour notre application. La masse volumique ρ_{calo} est celle de la phase en présence (eau liquide ou vapeur) lorsque le fluide est monophasique à l'abscisse considérée le long du tube. Lorsque le fluide est diphasique, la masse volumique du mélange eau / liquide vapeur s'exprime par :

$$\rho_{calo} = \varepsilon \rho_{v,sat} + (1 - \varepsilon) \rho_{l,sat} \quad (62)$$

avec ε le taux de vide local.

Dans une maille d'indice i , le flux de chaleur par unité de surface $\varphi_{tint,i}$ à la paroi a pour expression :

$$\varphi_{tint,i} = \frac{T_{t,i} - T_{calo,i}}{\frac{R_{tint} \ln\left(\frac{1}{2} + \frac{R_{text}}{2R_{tint}}\right)}{\lambda_t} + \frac{1}{\alpha_{calo,i}}} \quad (63)$$

$T_{calo,i}$ est la température du fluide dans la maille considérée, et $T_{t,i}$ la température de la maille adjacente dans l'épaisseur du tube, que l'on suppose prise au centre de la maille. R_{tint} et R_{text} sont respectivement les rayons des parois interne et externe du tube, et $\alpha_{calo,i}$ est le coefficient d'échange intérieur tube.

Sur le module de stockage prototype utilisé pour valider le modèle (présenté plus loin en section IV.3.1), les pertes de charge mesurées expérimentalement entre l'entrée et la sortie d'un tube sont au maximum de 0,4 bar environ. La pression de l'eau / de la vapeur prend des valeurs allant de 60 à 120 bar environ. Pour ces niveaux de pression, une perte de charge de 0,4 bar induit une différence de 0,3°C environ sur la température de saturation de la vapeur, de 0,1 kg.m⁻³ au maximum sur la masse volumique de l'eau liquide (valeurs : entre 650 et 750 kg.m⁻³), et de 0,4 kg.m⁻³ au maximum sur la masse volumique de la vapeur (valeurs : entre 30 et 60 kg.m⁻³). Ces variations étant inférieures à 1% de la valeur de base, le choix de négliger les pertes de charge afin de simplifier le modèle semble raisonnable.

L'hypothèse d'égalité des vitesses n'est pas physiquement juste, aussi bien pour la condensation (cas de la charge) qui s'effectue selon un régime de condensation en film, que pour l'ébullition (cas de la décharge) pendant laquelle des bulles de vapeur peuvent se déplacer à une vitesse différente de celle de la phase liquide qui les entoure [128]. Cette différence de vitesse pourrait être prise en compte à l'aide d'une modélisation bi-fluide (cf. section II.2.2.1, p. 38) ; on choisit de ne pas la représenter afin de pouvoir utiliser un modèle homogène, plus simple et suffisant pour estimer le niveau d'eau liquide et les transferts thermiques à la paroi. Afin de tenir compte de l'effet du régime d'écoulement diphasique sur l'échange de chaleur avec la paroi, le coefficient d'échange intérieur tube α_{calo} est calculé à l'aide de corrélations adaptées, détaillées en Annexe 1 (p. 201) pour la condensation en film (le modèle étant ici testé sur le cas de la charge de vapeur uniquement).

La relation entre le taux de vide ε , qui intervient dans le calcul de la masse volumique (équation (62)), et les autres grandeurs de l'écoulement est également en théorie dépendante du régime d'écoulement diphasique [209]. Le taux de vide n'intervient pas dans les corrélations adoptées pour le coefficient d'échange intérieur tube en condensation en film ; il intervient uniquement dans le calcul de la masse volumique du fluide caloporteur. La prédiction des transferts de chaleur étant l'objectif principal du modèle (afin de pouvoir prédire le taux de fusion du MCP), il n'a de ce fait pas été jugé important de connaître la valeur du taux de vide avec une grande précision. L'expression adoptée est celle-ci-dessous ; il s'agit de l'expression du taux de vide que l'on obtient analytiquement en supposant égales les vitesses locales des phases liquide et vapeur.

$$\varepsilon = \frac{1}{1 + \frac{1 - x_{vap} \rho_{v,sat}}{x_{vap} \rho_{l,sat}}} \quad (64)$$

Dans cette équation, x_{vap} est le titre massique de vapeur. Dans un écoulement vertical descendant avec condensation en film, le taux de vide est élevé sur toute la hauteur de tube sur laquelle la condensation s'effectue. En effet, le film de liquide qui se forme à la paroi coule vers le niveau d'eau, laissant une place importante à la phase vapeur qui occupe le centre de la conduite (cet aspect de l'écoulement est représenté sur la Figure 24 de la section II.3.1, p. 50, régime « annular flow »). Selon l'équation (64), le taux de vide est une fonction croissante assez fortement concave du titre de vapeur x_{vap} . L'allure de cette fonction est représentée Figure 56, pour la plus haute et la plus basse pression rencontrées pour l'eau liquide / la vapeur sur le module de stockage prototype présenté plus loin, sur lequel le modèle multi-échelles a été validé. ϵ reste supérieur à 0,8 pour $x_{vap} > 0,15$ pour une pression de 60 bar, et pour $x_{vap} > 0,3$ pour une pression de 120 bar. On suppose ainsi qu'en utilisant l'équation (64), la valeur de ϵ devrait être suffisamment peu éloignée de sa valeur réelle pour la condensation en film sur une longueur de tube suffisante, pour ne pas compromettre la qualité des résultats du modèle.

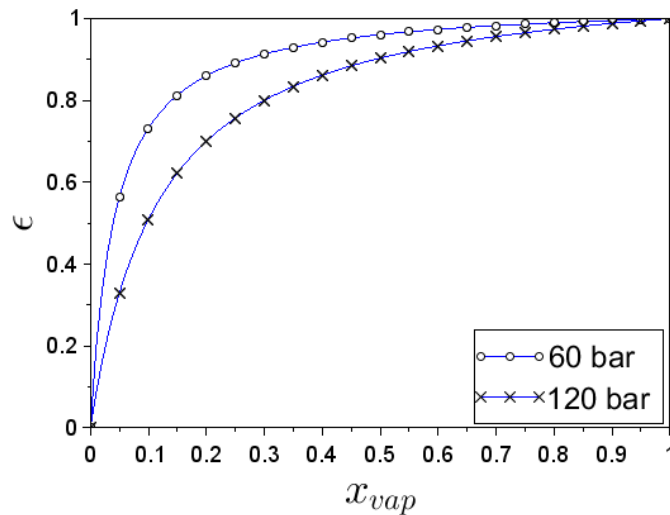


Figure 56 : Valeur du taux de vide ϵ en fonction du titre de vapeur x_{vap} selon l'équation (64), pour deux pressions différentes pour l'eau liquide / la vapeur.

Les deux inconnues résolues par le solveur sont l'enthalpie massique h_i associée à chaque maille, et le débit massique $\dot{m}_{i\pm 1/2}$ à l'interface entre les mailles. La masse volumique et la température du fluide sont déterminées à l'aide des tables de vapeur de l'IAPWS [210], en fonction de l'enthalpie massique et de la pression dans le tube. On utilise pour cela la librairie XSteam [211] qui implémente ces tables de vapeur.

Le **tube** est régi par l'équation de la chaleur classique, formulée en enthalpie :

$$S_t \rho_t \frac{\partial h_t}{\partial t} = S_t \lambda_t \frac{\partial^2 T_p}{\partial z^2} + c_{text} \varphi_{text} - c_{tint} \varphi_{tint} \quad (65)$$

Les échanges de chaleur dans la direction axiale ne sont pas négligés dans l'épaisseur du tube. Le facteur S_t est la section d'une coupe axiale du tube. Deux termes traduisant respectivement l'échange de chaleur (φ_{tint}) avec le fluide caloporteur et avec le milieu homogène MCP + ailettes / inserts (φ_{text}) sont présents. φ_{tint} est calculé dans chaque maille à l'aide de l'équation (45). φ_{text} désigne l'échange de

chaleur par unité de surface avec le milieu homogène ; le facteur c_{text} est le périmètre externe du tube. Dans une maille d'indice i , le flux de chaleur $\varphi_{text,i}$ est exprimé à l'aide de la différence de température $T_{t,i} - T_{h,i}$ entre le tube et le milieu homogène, de la conductivité $\lambda_{eq,i}$ de ce dernier, et de la taille Δr des mailles du milieu homogène dans la direction radiale :

$$\varphi_{text,i} = \frac{T_{h,i} - T_{t,i}}{R_{text} \left(\frac{\ln \left(\frac{2R_{text}}{R_{tint} + R_{text}} \right)}{\lambda_t} + \frac{\ln \left(1 + \frac{\Delta r}{R_{text}} \right)}{\lambda_{eq,i}} \right)} \quad (66)$$

Dans le **matériau homogène MCP + ailettes / inserts**, le problème de changement de phase solide – liquide est traité à l'aide de la méthode du terme source, décrite en section II.2.2.2.2 (p. 42). L'unique équation constitutive est l'équation de la chaleur formulée avec l'enthalpie sensible du milieu homogène, et comprenant un terme puits pour la chaleur latente du MCP. Les transferts de chaleur dans la direction axiale sont négligés ; l'équation est donc formulée en 1D dans la direction radiale :

$$\rho_h \frac{\partial h_{sens}}{\partial t} = \lambda_{eq} \left(\frac{\partial^2 T_h}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_h}{\partial r} \right) - \rho_{MCP} x_v L \frac{\partial Y_l}{\partial t} \quad (67)$$

Une partie du volume étant occupée par les ailettes et les inserts, le MCP occupe une fraction du volume seulement et non sa totalité. Afin d'en rendre compte dans (67), le terme latent est pondéré par la fraction volumique de MCP, notée x_v . Dans le modèle système, cette fraction volumique est supposée être uniforme dans tout le milieu homogène ; x_v est ainsi pris égal à la fraction volumique globale du MCP. Dans la réalité, la fraction du volume occupé par le MCP n'est pas constante avec le rayon : par exemple, dans le cas d'un tube à ailettes sans inserts, le MCP occupe tout l'espace situé au-delà de la longueur des ailettes (localement, $x_v = 1$). Cet aspect est pris en compte dans le calcul de la conductivité équivalente du milieu homogène lorsque le MCP est en phase solide (exposé en section IV.2.2), mais pas dans le bilan thermique que constitue l'équation (67).

Le changement de phase du MCP est supposé s'effectuer à une température fixe T_{cp} . Le changement de volume du MCP lors du changement de phase n'est pas représenté dans ce modèle. La masse volumique ρ_{MCP} du MCP est ainsi prise constante, égale à sa valeur dans la phase liquide. La conductivité thermique équivalente λ_{eq} du milieu homogène est déterminée à l'aide d'une corrélation sur les transferts de chaleur entre la paroi interne du tube et le MCP, issue de calculs CFD ; la méthode de calcul de λ_{eq} à partir de cette corrélation est détaillée dans la section suivante (IV.2.2). La masse volumique et la capacité thermique du milieu homogène sont calculées à l'aide de leurs valeurs dans le MCP et dans les ailettes et inserts, que l'on suppose faits du même matériau :

$$\rho_h = x_v \rho_{MCP} + (1 - x_v) \rho_{ail} \quad (68)$$

$$c_{p,h} = x_m c_{p,MCP} + (1 - x_m) c_{p,ail} \quad (69)$$

où x_m est la fraction massique de MCP dans le milieu homogène.

Les conditions aux limites du problème sont constituées d'une part par la pression du fluide caloporteur, et d'autre part par le débit et l'enthalpie du fluide caloporteur à l'injection, en haut du tube. A l'intérieur du domaine, les domaines du fluide caloporteur et du tube sont reliés par le transfert de chaleur à la paroi interne du tube, exprimé par l'équation (45). Le transfert de chaleur entre la paroi externe et le milieu homogène MCP + ailettes / inserts (66) apparaît directement dans l'équation de l'énergie pour le tube (3), et est une condition aux limites interne pour le problème dans le milieu homogène. A la frontière externe du domaine MCP + ailettes / inserts (à droite sur la Figure 55), le flux de chaleur échangé avec l'extérieur est supposé nul. Dans les systèmes de stockage par MCP de taille prototype ou industrielle, les tubes sont disposés dans la calandre sous la forme d'un faisceau de tubes régulièrement espacés, du type de celui représenté Figure 57. Cette hypothèse d'adiabaticité est alors vraie pour les tubes qui ne se trouvent pas sur la couronne extérieure du faisceau (entourés en bleu sur la Figure 57) : en effet, ces tubes étant entourés d'autres tubes, et les tubes étant disposés selon un motif régulier, la frontière externe peut ainsi être vue comme un plan de symétrie. Les tubes situés en périphérie sont entourés d'une épaisseur de MCP de forme et de volume différents de celles du MCP qui entoure les autres tubes. Le MCP associé aux tubes périphériques est sujet aux pertes thermiques avec l'extérieur, car il est en contact avec la paroi de la calandre. Ainsi, le modèle néglige les pertes thermiques du système de stockage, mais représente malgré cela de manière convenable les tubes des couronnes centrales et intermédiaires d'un faisceau de tubes, et le MCP qui entoure ces tubes. Le flux de chaleur est également supposé nul aux frontières hautes et basses du domaine MCP + ailettes / inserts et du tube. Pour une configuration industrielle, la calandre contient majoritairement des tubes de type internes. En conséquence, la non prise en compte des pertes thermiques impacte peu la prédiction du comportement global du stockage par le modèle.

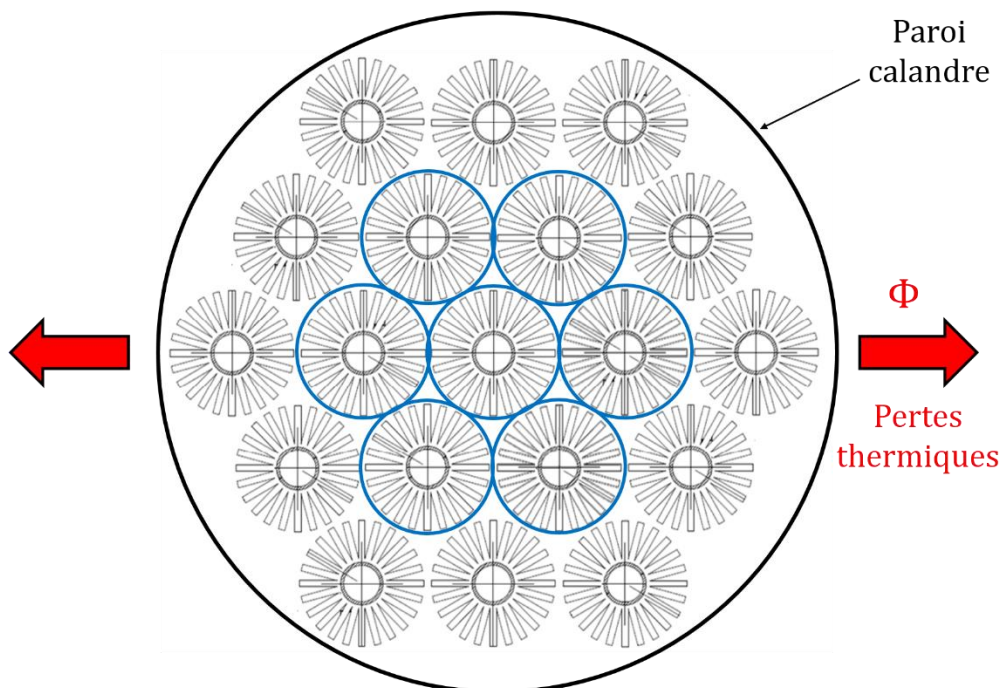


Figure 57 : Vue en coupe d'un faisceau de tubes à ailettes typiquement utilisé dans un système de stockage tubes-calandre par MCP

Le code de simulation est écrit dans le langage de programmation Scilab. Les équations (60), (61), (3) et (67) sont discrétisées selon la méthode des volumes finis ; on adopte un schéma temporel implicite. Le problème est résolu itérativement à chaque pas de temps, en deux blocs séparés : le problème côté eau liquide / vapeur est d'abord résolu isolément, puis on résout ensemble les équations de la chaleur pour la paroi et le milieu MCP + ailettes / inserts. Cette méthode de résolution par blocs est imposée par le fait que la méthode de résolution itérative utilisée n'est pas la même pour ces deux domaines. Du côté de l'eau liquide / la vapeur, le problème constitué par les équations (60) et (61) étant non linéaire, il est résolu à l'aide d'une méthode itérative de type Newton. Dans le domaine MCP + ailettes / inserts, le problème comporte une seule équation constitutive pour deux inconnues, à savoir l'enthalpie sensible h_{sens} et la fraction liquide Y_l . Du fait de cette spécificité, la résolution du problème nécessite une méthode spécifique. Elle est effectuée à l'aide de la méthode itérative proposée par Voller et al. [97] pour la résolution des problèmes de changement de phase solide-liquide avec terme source pour la chaleur latente.

Lors de la résolution du problème dans le fluide caloporteur, la température de l'épaisseur du tube à l'instant précédent est utilisée comme conditions aux limites dans (45). Le champ de température calculé dans le fluide caloporteur est ensuite utilisé comme conditions aux limites pour résoudre le problème dans le tube et le milieu MCP + ailettes / inserts. Les équations issues de la discrétisation des équations (60), (61), (3) et (67), ainsi que les détails de la résolution numériques des deux blocs, sont présentés en Annexe 2 (p. 203).

La convergence des méthodes itératives est vérifiée à chaque pas de temps, d'une manière différente pour chacun des deux blocs. Du côté du fluide caloporteur, les inconnues à déterminer à un pas de temps donné sont l'enthalpie massique $h_{calo,i}^{t+1}$ de chacune des mailles d'indice i , et le débit $\dot{m}_{i+\frac{1}{2}}^{t+1}$ à la frontière amont de chaque maille. En notant $(h_{calo,i}^{t+1})_k$ et $(\dot{m}_{i+\frac{1}{2}}^{t+1})_k$ leurs valeurs à l'itération $n^o k$, la méthode itérative est considérée convergée lorsque les variations relatives des inconnues d'une itération à l'autre deviennent inférieures à une certaine tolérance τ_{calo} :

$$\max_i \left(\left| \frac{(h_{calo,i}^{t+1})_{k+1}}{(h_{calo,i}^{t+1})_k} \right| ; \left| \frac{(\dot{m}_{i+\frac{1}{2}}^{t+1})_{k+1}}{(\dot{m}_{i+\frac{1}{2}}^{t+1})_k} \right| \right) < \tau_{calo} \quad (70)$$

Du côté du tube et du milieu homogène, le critère de convergence se fonde sur l'enthalpie massique totale $h_h = h_{sens} + x_m L Y_l$. A chaque itération de l'algorithme itératif, la variation de l'enthalpie totale $(h_{h,i}^{t+1})_{k+1}$ par rapport à sa valeur à l'itération précédente $(h_{h,i}^{t+1})_k$ est calculée dans chaque maille. Cette variation est sommée sur l'ensemble des mailles, puis elle est adimensionnée par $\frac{1}{2}(c_{p,h,s} + c_{p,h,l})T_{ini}$, où T_{ini} est la température initiale du milieu homogène. La convergence est considérée atteinte lorsque cette variation normalisée devient inférieure à une certaine tolérance τ_h :

$$\frac{\sum_i ((h_{h,i}^{t+1})_{k+1} - (h_{h,i}^{t+1})_k)}{\frac{1}{2}(c_{p,h,s} + c_{p,h,l})T_{ini}} < \tau_h \quad (71)$$

IV.2.2. Calcul de la conductivité équivalente du milieu MCP + ailettes / inserts

La conductivité λ_{eq} du milieu MCP – ailettes – inserts (équation (67)) est une conductivité équivalente qui intègre les effets de la convection naturelle du MCP liquide ainsi que des ailettes et inserts sur le transfert de chaleur dans le MCP. Ces effets étant prédits par le modèle CFD, la valeur de la conductivité équivalente est déterminée à l'aide d'une relation sur le flux de chaleur échangé entre le fluide caloporteur et le MCP, précédemment identifiée à l'aide de calculs CFD. On suppose que cette relation peut être mise sous la forme adimensionnelle de l'équation (1). Cette section présente la méthodologie utilisée pour calculer des valeurs de conductivité équivalente dans le milieu homogène, pour la fusion de MCP (charge de vapeur). Dans cette section, on représente cette relation sous la forme suivante, plus générale :

$$Nu = f(Ra) \quad (72)$$

Dans le modèle système, lors d'une fusion de MCP par un apport de chaleur à la paroi externe du tube, on peut distinguer dans le domaine MCP + ailettes / inserts une première épaisseur proche de la paroi du tube où le MCP est liquide, et une seconde épaisseur où le MCP est solide, proche de la frontière extérieure (comme illustré Figure 55). La méthode de calcul de la conductivité équivalente est différente pour ces deux couches.

L'épaisseur où le MCP est liquide reçoit directement le flux de chaleur arrivant de l'eau liquide / la vapeur, au niveau de la paroi externe du tube. Dans chaque sous-domaine du milieu MCP + ailettes / inserts disposé le long du tube, on attribue à cette épaisseur une conductivité $\lambda_{eq,l}$, uniforme sur le rayon, mais qui peut varier selon le sous-domaine considéré (ie. la position axiale) afin de représenter l'éventuelle non-uniformité du flux échangé le long du tube. Le flux de chaleur Φ reçu du tube peut alors être relié à l'épaisseur e_l de la couche, et aux températures aux extrémités de celle-ci (cf. Figure 58) :

$$\phi = 2\pi\Delta z\lambda_{eq,l} \frac{(T_{text} - T_{cp})}{\ln\left(1 + \frac{e_l}{R_{text}}\right)} \quad (73)$$

où T_{text} est la température à la paroi externe du tube, T_{cp} est la température de changement de phase du MCP (température du front de fusion), et Δz est la hauteur du sous-domaine considéré dans la direction axiale (pas d'espace du modèle système).

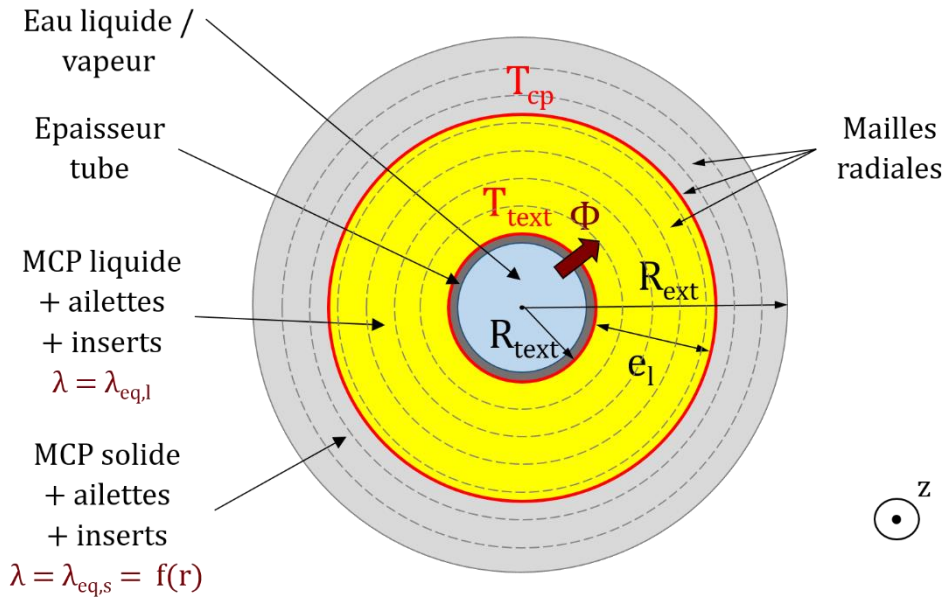


Figure 58 : Représentation des épaisseurs de MCP liquide et solide dans un sous-domaine MCP + ailettes / inserts vu en coupe, lors d'une fusion de MCP (charge du module de stockage)

On exprime l'épaisseur e_l en fonction de la fraction massique fondue moyenne dans le sous-domaine considéré, que l'on note \bar{Y}_l :

$$e_l = -R_{text} + \sqrt{R_{text}^2 + (R_{ext}^2 - R_{text}^2)\bar{Y}_l} \quad (74)$$

où R_{ext} est le rayon de la frontière extérieure du domaine de calcul. \bar{Y}_l est calculée en moyennant la fraction massique fondue $Y_{l,i}$ sur les mailles du sous-domaine, pondérée par la masse de MCP présente dans chaque maille :

$$\bar{Y}_l = \frac{\sum_{i=1}^{nb \text{ mailles}} Y_{l,i} \rho_{MCP} x_v V_i}{\sum_{i=1}^{nb \text{ mailles}} \rho_{MCP} x_v V_i} \quad (75)$$

$\lambda_{eq,l}$ est déterminé en reliant le flux Φ à la relation $Nu = f(Ra)$ obtenue via l'étude CFD effectuée au préalable. Cette relation fait intervenir des nombres de Nusselt et de Rayleigh locaux le long du tube, exprimés sous la forme suivante :

$$Nu(z) = \frac{\phi}{2\pi R_{text} \Delta z (T_{text}(z) - T_{MCP}(z))} \frac{l_c(z)}{\lambda_{MCP,l}} \quad (76)$$

$$Ra(z) = \frac{g \beta_{MCP}}{v_{MCP} D_{th,MCP}} (T_{text}(z) - T_{MCP}(z)) l_c(z)^3 \quad (77)$$

Ce nombre de Nusselt est relatif à l'échange de chaleur entre la paroi extérieure du tube, et le milieu homogène MCP + ailettes / inserts. T_{MCP} et l_c sont respectivement une température caractéristique du MCP et une longueur caractéristique du transfert de chaleur. Les définitions de ces deux grandeurs dépendent a priori du cas d'étude (géométrie d'ailettes et d'inserts, niveaux de température, ...) ; le choix de leur expression est à effectuer durant l'étude CFD préalable. Ce choix doit être fait de manière à avoir la meilleure corrélation possible entre les nombres de Nusselt et de Rayleigh locaux, afin que la relation $Nu = f(Ra)$ que l'on construit soit la plus représentative possible du flux de chaleur entre paroi

et MCP prédit par la CFD. Par ailleurs, comme l_c et T_{MCP} interviennent dans le calcul de $\lambda_{eq,l}$, il convient de choisir des définitions qui permettront de les calculer aussi bien à partir des données disponibles dans un calcul CFD que de celles disponibles dans un calcul système (c'est-à-dire à partir des champs de température et de fraction liquide dans les mailles du milieu MCP + ailettes / inserts).

En utilisant les équations (73), (74), (76), (77), et la relation $Nu = f(Ra)$, on aboutit à l'expression suivante pour $\lambda_{eq,l}$ à une abscisse z le long du tube:

$$\begin{aligned} \lambda_{eq,l}(z) = & \lambda_{MCP,l} \frac{T_{text}(z) - T_{MCP}(z)}{T_{text}(z) - T_{cp}} \frac{R_{text}}{l_c(z)} \\ & \times \ln \left(1 + \frac{-R_{text} + \sqrt{R_{ext}^2 + (R_{ext}^2 - R_{text}^2) \bar{Y}_l(z)}}{R_{te}} \right) \\ & \times f \left(\frac{g\beta_{MCP}}{\nu_{MCP} D_{MCP}} (T_{text}(z) - T_{MCP}(z)) l_c(z)^3 \right) \end{aligned} \quad (78)$$

Dans **l'épaisseur où le MCP est solide**, on calcule une conductivité équivalente qui rend compte uniquement de l'influence des ailettes et des inserts sur les transferts de chaleur au sein du solide. En général, les ailettes et inserts ne s'étendent pas sur tout le rayon dans le MCP : il y a alors une zone de MCP loin du tube non occupée par des ailettes et des inserts conducteurs, qui oppose ainsi une résistance plus grande au transfert de chaleur. Pour rendre compte de cet effet, la conductivité solide est calculée individuellement dans chaque maille, contrairement à la conductivité liquide qui est prise uniforme selon le rayon dans l'épaisseur où le MCP est liquide. Dans chaque maille, la conductivité solide $\lambda_{eq,s,j}$ est calculée en moyennant la conductivité du MCP pur et celles des ailettes et inserts (que l'on suppose identiques), pondérées par la fraction volumique locale de MCP $x_{v,j}$ dans la maille considérée :

$$\lambda_{eq,s,j} = x_{v,j} \lambda_{MCP,s} + (1 - x_{v,j}) \lambda_{ail} \quad (79)$$

La fraction volumique $x_{v,i}$ vaut 1 dans les mailles où aucune ailette ou aucun insert ne se situe : la conductivité est alors celle du MCP pur. Dans les autres mailles, $x_{v,i}$ peut varier localement selon la forme, les dimensions et le nombre des ailettes et des inserts. Cette fraction volumique locale ne doit pas être confondue avec la fraction volumique globale x_v qui apparaît dans l'équation de l'énergie du milieu homogène (67) et dans (75) : x_v est le rapport du volume de MCP sur le volume de métal dans l'ensemble du domaine MCP + ailettes / inserts, tandis que $x_{v,i}$ se rapport à une maille seulement.

Une valeur de $\lambda_{eq,l}$ et un champ de valeurs de $\lambda_{eq,s,j}$ doivent être calculés dans chaque sous-domaine du milieu MCP + ailettes / inserts, et à chaque itération du solveur lors d'un pas de temps d'un calcul transitoire. Avant chaque évaluation de $\lambda_{eq,l}$, les grandeurs l_c , T_{MCP} et \bar{Y}_l doivent être déterminées à l'aide des relations appropriées (équation (75) pour \bar{Y}_l), à partir des champs de température et de fraction liquide à l'itération précédente du solveur, ou bien au pas de temps précédent si l'itération en cours de calcul est la première d'un pas de temps.

Une fois les conductivités liquide et solide calculées, la conductivité équivalente de chaque maille du sous-domaine considéré est évaluée à l'aide de la fraction fondue massique locale $Y_{l,j}$. Cela permet d'effectuer une transition entre les valeurs solide et liquide de la conductivité équivalente, dans les mailles dans lesquelles $0 < Y_{l,j} < 1$:

$$\lambda_{eq,j} = Y_{l,j}\lambda_{eq,l} + (1 - Y_{l,j})\lambda_{eq,s,j} \quad (80)$$

IV.3. Cas d'application – Module de stockage prototype

La méthodologie de modélisation multi-échelles a été testée sur le cas de la charge d'un module de stockage de vapeur prototype, installé au centre CEA de Grenoble. Ce module est relié à une boucle de génération de vapeur haute température et haute pression, ce qui permet de faire des essais de charge avec de la vapeur ayant des niveaux de température et de pression représentatifs de ceux d'une centrale solaire thermique à Génération Directe de Vapeur (GDV), ou bien d'un effluent de vapeur que l'on pourrait rencontrer dans un procédé industriel réel. De plus, le module a une taille suffisante pour pouvoir observer les phénomènes à grande échelle que l'on peut rencontrer dans un module de taille industrielle. Après avoir décrit le module prototype, les paramètres des modèles CFD et systèmes pour la simulation de la charge du module sont détaillés dans cette section. L'étude CFD effectuée et la caractérisation des transferts de chaleur entre eau / vapeur et MCP obtenue à l'aide des calculs CFD sont ensuite exposées. Enfin, les résultats obtenus avec le modèle système, prenant en compte la relation sur les transferts de chaleur issue du modèle CFD, sont présentés et discutés.

IV.3.1. Description du module prototype

Le module prototype est constitué d'une calandre de 5,3m de haut et de 559 mm de diamètre, et d'un faisceau de 19 tubes à ailettes (photo Figure 59). Aucun insert n'est utilisé ; les ailettes sont le seul dispositif d'intensification des échanges thermiques. La calandre est fermée à ses extrémités inférieure et supérieure par deux plaques. Deux collecteurs sont également présents à ces deux extrémités, afin d'assurer la distribution de la vapeur dans les 19 tubes.



Figure 59 : Photographie du module prototype

Le MCP utilisé est du nitrate de sodium ; il s'agit d'un sel, de formule chimique NaNO_3 , dont la transition de phase solide-liquide s'effectue autour de 305°C . Le module contient environ 1700 kg de nitrate de sodium. Lorsque tout le sel est en phase solide, il occupe une hauteur de 3,672 m ; lorsque tout est liquide, la hauteur de sel est de 4,080 m. La température de changement de phase du nitrate de sodium le rend attractif pour l'application des centrales solaires thermiques GDV. En effet, pour assurer un échange thermique permettant de fondre le MCP en charge (resp. solidifier le MCP en décharge), il est nécessaire que la température de la vapeur soit de quelques degrés plus élevée en charge (resp. plus basse en décharge) que celle du changement de phase du MCP. Dans une centrale GDV, la vapeur est typiquement générée à une pression proche de 100 bar, ce qui correspond à une température de saturation de la vapeur de 310°C environ, soit justement quelques degrés de plus que le point de fusion du nitrate de sodium [212]. Cette différence de température permet de fondre le MCP en charge ; en décharge, le point de fusion du nitrate de sodium permet de décharger la vapeur à une pression supérieure à 80 bar. Du fait de l'attractivité du nitrate de sodium pour l'usage dans les centrales solaires GDV, ce matériau est aussi utilisé comme MCP dans le module prototype construit en Espagne par l'institut allemand DLR [40], et dans le module de taille pré-industrielle construit par le CEA sur le site de Cadarache [19] (présentés tous deux dans le chapitre II, section II.1.2.1.2, p. 22).

Les ailettes sont de forme rectangulaire et sont faites en acier. Elles sont disposées autour des tubes selon un motif hélicoïdal (ailettes segmentées), visible sur les photographies Figure 60 ; elles sont légèrement inclinées par rapport au plan normal à l'axe des tubes (11° environ). Le diamètre interne des tubes est de 27,17 mm et leur épaisseur est de 2,29 mm. Les ailettes ont une longueur de 20 mm et sont soudées à un ruban hélicoïdal qui parcourt le tube (dessin Figure 61-(a)), dont l'épaisseur (de la paroi du tube à l'extrémité du ruban) est de 10 mm ; la longueur ailetée autour d'un tube est ainsi de 30 mm. La distance séparant deux ailettes situées l'une en-dessous de l'autre est de 20 mm. Entre ces deux ailettes, le nombre d'ailettes disposées le long du périmètre du tube est de 16. Les 19 tubes du faisceau sont arrangés selon le motif représenté Figure 57 (cf. section IV.2.1 ci-dessus) : autour d'un tube central se trouvent une couronne intermédiaire de 6 tubes, puis une couronne externe de 12 tubes. Le motif est fait de telle sorte que la distance séparant un tube de chacun de ses voisins soit identique ; la distance entre les axes de deux tubes est de 97,2 mm. La disposition de trois tubes voisins est représentée Figure 61-(b), les distances étant représentées à l'échelle. Ce schéma permet de voir qu'une importante partie du volume de MCP se situe entre les ailettes. Les seules zones de MCP hors de portée des ailettes, se situent d'une part au centre des triangles équilatéraux formés par les groupes de trois tubes (dessinées en orange sur la Figure 61-(b)), et d'autre part à la périphérie de la calandre, au-delà de la couronne extérieure ; le MCP situé en périphérie est appelé *MCP passif*. La proportion de MCP effectivement utilisable pour le stockage de chaleur est ainsi maximisée. Dans le volume « utile », c'est-à-dire le volume non occupé par le MCP passif et par les tubes de vapeur, le MCP occupe 93,6% du volume, et les ailettes 6,4%.

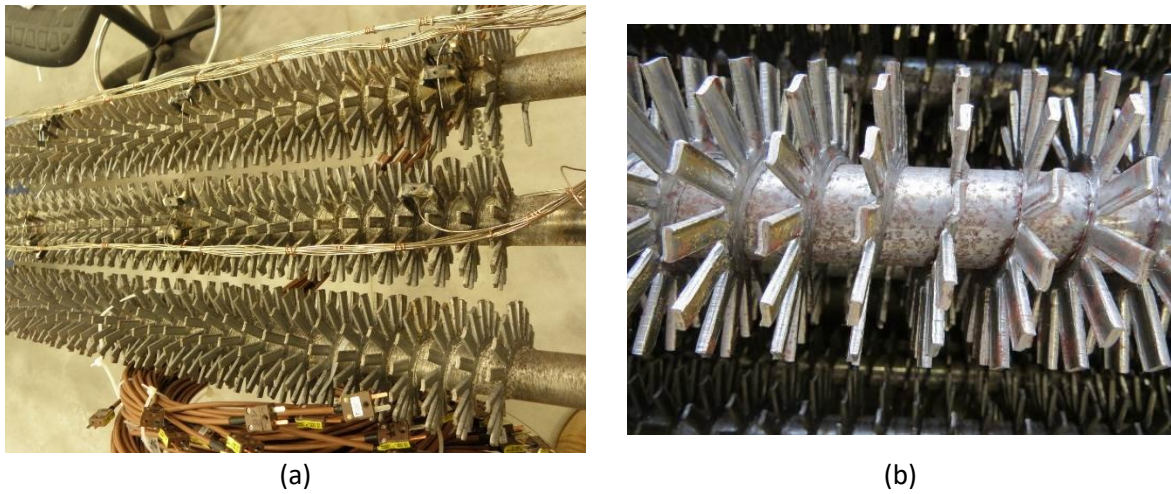


Figure 60 : (a) : Photographie des tubes à ailettes du module prototype
(b) : Photographie de près des ailettes segmentées

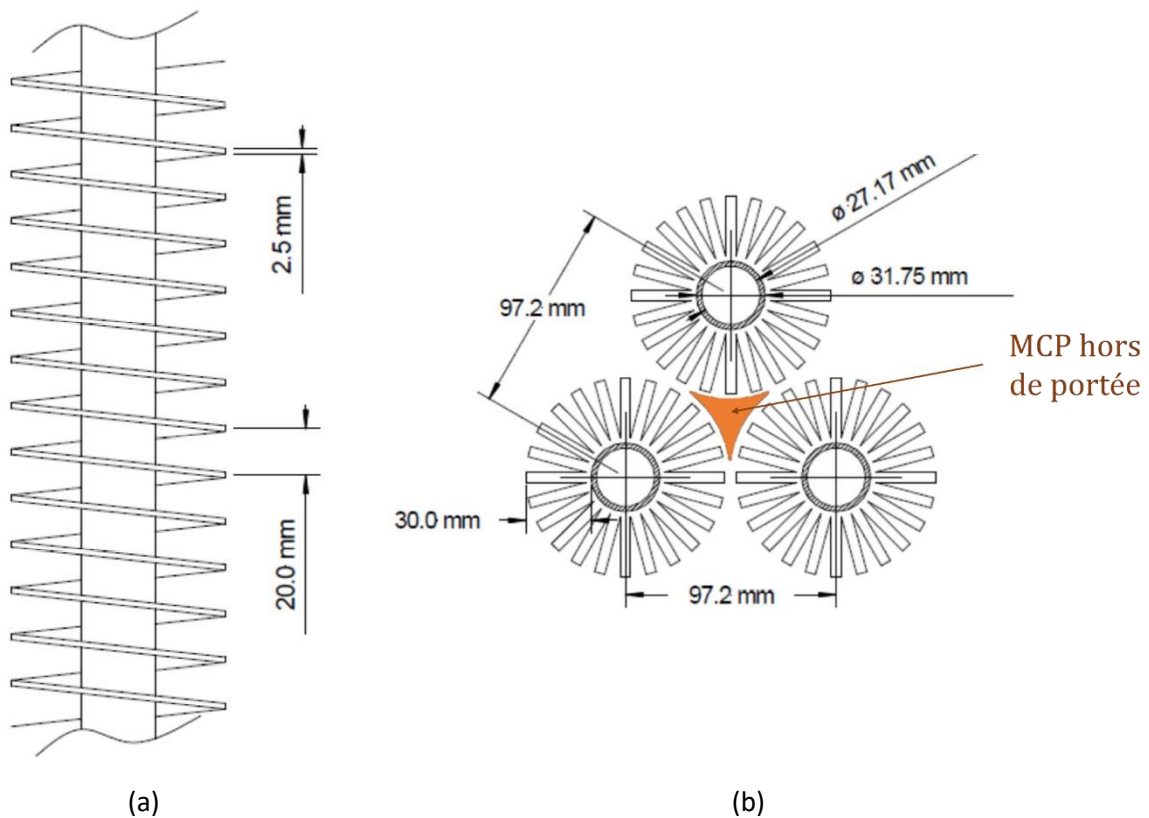


Figure 61 : (a) : Schéma du ruban situé à la base des ailettes
(b) : Schéma à l'échelle de la disposition de trois tubes voisins dans le faisceau de tubes.

Une boucle de génération de vapeur haute température et haute pression, reliée au module, permet de fournir de la vapeur saturée ou surchauffée au module pour faire fondre le MCP. La pression de la vapeur générée peut aller de 50 à 120 bar ; sa température peut atteindre un maximum de 335°C. Des essais de charge ont été effectués selon les deux stratégies de conduites envisagées pour l'opération d'un module de stockage dans un procédé industriel, à savoir la *pression glissante* et la *pression fixe* [52]. Dans le chapitre suivant, le modèle multi-échelles est comparé aux résultats d'essais menés selon ces deux stratégies de conduite.

Lors d'une charge en **pression glissante**, la pression de la vapeur injectée dans les tubes est augmentée au fur et à mesure de l'avancée de la fusion du MCP. La température de saturation de la vapeur est ainsi croissante au cours de la charge, ce qui permet de compenser l'augmentation progressive de la résistance thermique côté MCP ; cette résistance croissante est due à l'épaississement progressif de la couche de MCP liquide qui fait face à la paroi du tube, qui est chauffée à une température supérieure au point de fusion. Afin de maximiser l'échange thermique, la pression est régulée de manière à ce que la condensation de vapeur se fasse sur toute (ou quasiment toute) la longueur des tubes, afin d'avoir un coefficient d'échange intérieur tube élevé : le niveau d'eau dans les tubes est ainsi maintenu dans le bas des tubes, à une position stable également. Durant une charge en **pression fixe**, la pression de la vapeur est maintenue constante. L'échange thermique local le long des tubes diminue progressivement, du fait de l'augmentation progressive de la résistance thermique côté MCP. De ce fait, le niveau liquide dans les tubes se déplace au cours du temps. Au début de la charge, l'échange thermique local important dans le haut des tubes fait que toute la vapeur se condense sur une relativement faible longueur de tube : on a ainsi dans les tubes une colonne d'eau liquide, surplombée par une colonne où la vapeur se condense. A mesure que l'échange thermique local décroît, la longueur de tube sur laquelle la condensation s'effectue augmente : le niveau d'eau dans les tubes se déplace ainsi du haut vers le bas.

De nombreuses mesures de température sont effectuées dans le module à l'aide de thermocouples (de type K), disposés à plusieurs endroits. Des thermocouples sont placés dans le MCP, autour du tube central et des tubes des deux couronnes, à plusieurs altitudes dans le module. Tous ces thermocouples se situent sur sept plans horizontaux (nommés *niveaux*), situés respectivement à 180, 720, 1260, 1800, 2340, 2880 et 3420 mm de la paroi inférieure du module. La position axiale des différents niveaux est représentée Figure 62. Les niveaux des thermocouples placés dans le MCP sont numérotés de N1 à N7 (en bleu), les autres indications de position se rapportent à d'autres thermocouples non exploités pour l'analyse. Sur chaque niveau, les thermocouples sont placés à mi-hauteur entre deux ailettes. La distance qui les sépare de la paroi externe du tube peut être de 5, 15, 25 ou 40,2 mm, comme représenté sur le schéma de la Figure 63. Comme on peut le voir sur ce schéma, les thermocouples situés à 40,2 mm sont au-delà de la longueur ailetée : ils sont situés dans les zones de MCP passif représentées en orange sur la Figure 61-(b), tandis que les autres thermocouples se trouvent dans le MCP actif. Plusieurs thermocouples peuvent être placés à des positions angulaires différentes autour d'un même tube, pour un même niveau et une même distance au tube. Le nombre total de thermocouples dans le MCP est de 123. La position des divers thermocouples présents dans le MCP et leur nomenclature de nommage, sont détaillées en Annexe 3 (p. 207). Pour la comparaison des mesures aux résultats de simulation, seules les mesures faites pour le tube central et les tubes de la couronne intermédiaire sont exploitées (le MCP assigné à ces tubes n'étant sujet à aucune perte thermique directe, comme supposé par le modèle système ; cf. section IV.2.1, p. 113). Les échanges thermiques étant a priori identiques pour ces sept tubes, les mesures des thermocouples situés à un niveau et à une distance à la paroi des tubes donnés sont moyennées pour l'exploitation et l'analyse des résultats expérimentaux (chapitre suivant).

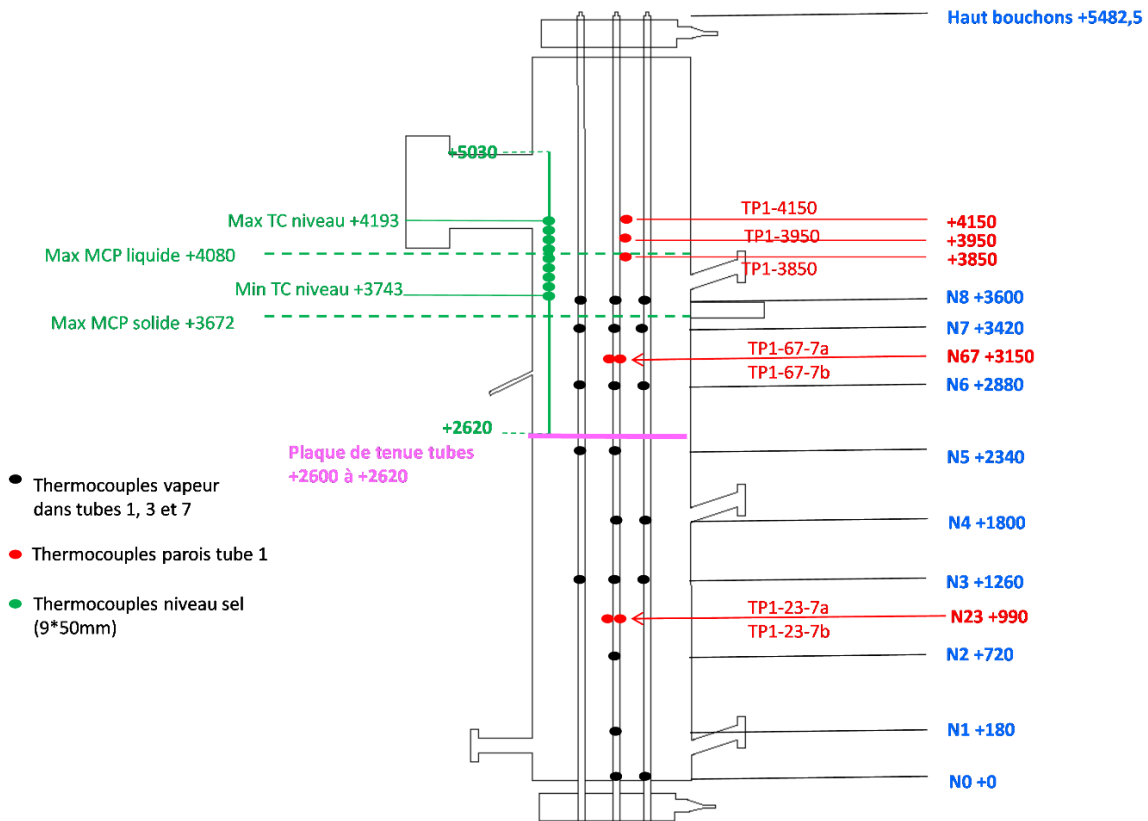


Figure 62 : Schéma des positions axiales (de N1 à N7) où sont placés les thermocouples dans le MCP du module prototype

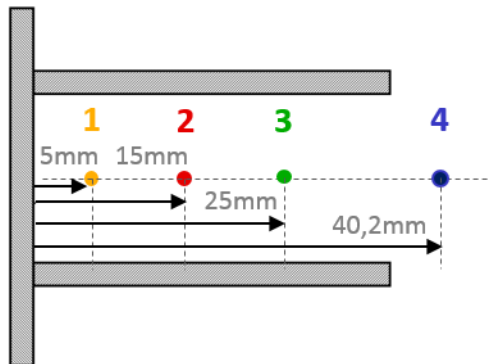


Figure 63 : Schéma de la position des thermocouples disposés dans le MCP du module prototype, à un niveau et autour d'un tube donné

D'autres thermocouples mesurent la température du fluide caloporteur eau liquide / vapeur à l'entrée et à la sortie du module ; ces mesures servent à évaluer l'énergie accumulée par le module au cours du temps. Des mesures de température du fluide caloporteur sont également faites à l'intérieur du tube central et de deux tubes de la couronne intermédiaire, aux mêmes niveaux que les mesures de température effectuées dans le MCP (niveaux N1 à N7 de la Figure 62). De la même manière que pour les mesures du MCP, les mesures faites à une même hauteur dans les différents tubes sont moyennées pour l'exploitation et l'analyse des résultats. La pression du fluide caloporteur est également mesurée. La température de la paroi externe du tube central du faisceau est mesurée à deux positions, situées respectivement entre les niveaux 2 et 3, et entre les niveaux 6 et 7 (positions N23 et N67 sur la Figure

62). Ces mesures sont utilisées pour fixer les conditions aux limites de certains calculs CFD effectués. Enfin, des mesures de température sont effectuées à la paroi externe de la calandre, sur les deux plaques métalliques qui ferment la calandre à ses extrémités, et sur les deux collecteurs qui distribuent le fluide caloporteur dans le faisceau de tubes. Ces mesures-ci servent à évaluer les pertes thermiques. Pour tous les thermocouples utilisés dans la section d'essais, la précision des mesures est de $\pm 1^\circ\text{C}$.

La boucle d'essais dispose d'un condenseur qui est utilisé pour mesurer le taux de vapeur du fluide caloporteur en sortie du module. Lorsque le fluide en sortie est diphasique, cette mesure permet de déterminer son enthalpie, qui est fonction de son taux de vapeur et de sa pression. Autrement, si le fluide en sortie est de l'eau liquide pure, son enthalpie est déterminée à l'aide de sa température et de sa pression. L'enthalpie du fluide en entrée du module est déterminée également à partir de sa température et de sa pression ; lors d'une charge, la vapeur est supposée surchauffée à l'injection. La différence d'enthalpie entre entrée et sortie permet de calculer la puissance thermique transmise au module.

Le module prototype est équipé de cordons chauffants, dits cordons de traçage, disposés sur la paroi de la calandre du module (paroi externe). Ces cordons, qui émettent de la chaleur en dissipant de l'énergie électrique par effet Joule, permettent de chauffer le MCP et le module sans faire circuler de vapeur dans les tubes. Ils sont ici utilisés afin de mesurer les pertes thermiques du module vers l'environnement extérieur ; malgré le fait que la paroi externe du module soit calorifugée, des pertes thermiques non négligeables sont présentes du fait de la forte différence de température entre la paroi de la calandre (de 250 à 330°C) et l'air de la halle d'essais qui est à température ambiante. Des essais spécifiques ont été menés afin de mesurer ces pertes thermiques. Lors de ces essais, l'ensemble du module est maintenu en température grâce à une régulation de la puissance électrique dissipée. Une fois un régime permanent atteint (température constante et uniforme), la puissance thermique perdue vers l'extérieur est égale à la puissance électrique nécessaire pour le maintien en température. Pour l'ensemble du module, un coefficient de pertes thermiques de $\alpha_{\text{pertes}} = 11,5 \text{ W.K}^{-1}$ a pu être déterminé ; pour ce coefficient, la différence de température considérée est celle qu'il y a entre la paroi de la calandre et l'air extérieur. Les pertes de charge sont négligées par les modèles CFD et système, mais sont prises en compte dans l'analyse des résultats de simulation de charges du module prototype (chapitre suivant).

IV.3.2. Description des modèles CFD et système du module prototype

IV.3.2.1. Modèle CFD

IV.3.2.1.1. Géométrie et maillage

Le modèle CFD 3D du module prototype se doit de représenter une hauteur minimale du module, afin de pouvoir simuler les éventuelles boucles de convection naturelle du MCP liquide qui s'étendent sur une hauteur importante le long des tubes. Afin de réduire la taille du domaine, et donc le temps de calcul, on représente un unique tube, et une seule ailette sur les 16 ailettes présentes sur une circonférence du tube. Le domaine de calcul est ainsi un secteur angulaire de $22,5^\circ$, centré autour d'une ailette segmentée. Les ailettes sont supposées alignées verticalement le long du tube. La légère inclinaison des ailettes par rapport au plan normal à l'axe du tube est représentée. Le domaine de calcul est donc constitué d'une rangée verticale d'ailettes alignées, comme représenté Figure 64. Sa hauteur est de 0,54m, ce qui correspond à un total de 27 ailettes ; cette hauteur est environ 7 à 8 fois plus petite que la longueur de tube immergée dans le MCP dans le module prototype.

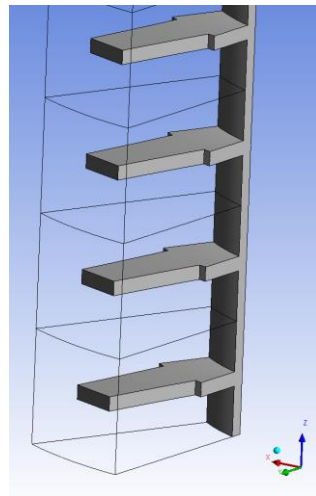


Figure 64 : Bas du domaine de calcul du modèle CFD

Le domaine a la forme d'un secteur angulaire d'un cylindre à base circulaire ; comme on peut le voir sur la Figure 64, la frontière extérieure du domaine est circulaire. Du côté de l'intérieur du tube, la frontière du domaine est prise au niveau de la paroi interne du tube. On souhaite prendre en compte dans le modèle CFD le MCP situé entre les tubes (en orange sur la Figure 61-(b)), afin de rendre compte des effets de sa présence sur les transferts de chaleur. Le rayon extérieur du domaine de calcul ne peut donc pas être simplement égal à celui des domaines circulaires centrés autour des tubes représentés Figure 57, car ces domaines-ci ne prennent pas en compte ce MCP entre les tubes. Ainsi, un pavage du MCP constitué d'hexagones centrés autour des tubes est défini (Figure 65) ; ce pavage permet d'associer un volume de MCP à chaque tube, en répartissant équitablement le MCP entre les 7 tubes du centre et la couronne intermédiaire, et en prenant bien en compte le MCP passif entre les tubes. Dans le modèle CFD, le rayon externe est calculé de telle sorte que le volume du domaine de calcul soit égal à 1/16 (soit $22,5^\circ/360^\circ$) de celui des domaines cylindriques à base hexagonale que l'on introduit pour chaque tube. Le rayon externe ainsi obtenu est de 51,0 mm ; en comparaison, le rayon des domaines cylindriques à base circulaire de la Figure 57 est de 48,6 mm.

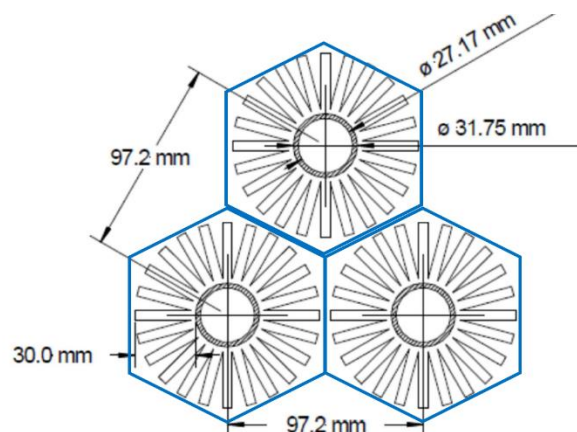


Figure 65 : Dessin du pavage d'hexagones utilisé pour associer des zones de MCP aux différents tubes (vue en coupe)

Le maillage adopté est représenté Figure 66 ; il comporte 539046 cellules. La taille moyenne des mailles est de 0,83 mm ; il y a ainsi 3 mailles sur l'épaisseur d'une ailette (2,5 mm), et 22 mailles sur la hauteur inter-ailettes (17,5 mm). Le maillage est majoritairement constitué de cellules hexaédriques ; seul

l'intérieur des ailettes est maillé à l'aide de cellules tétraédriques. Les valeurs des critères de qualité usuellement utilisés pour évaluer la qualité d'un maillage pour la CFD sont donnés Table 10 ; d'après les recommandations données par l'éditeur du code CFD utilisé (ANSYS Fluent® v. 17.2), les valeurs obtenues pour le maillage sont acceptables. Le pas de temps adopté est de 0,025s ou 0,05s selon les calculs. L'indépendance des résultats aux pas d'espace et de temps a été vérifiée en comparant les résultats de certains des calculs effectués à ceux obtenus avec un pas de temps deux fois plus faible, et ceux obtenus avec un maillage plus fin composé de 774098 cellules, pour lequel la taille moyenne des cellules est de 0,63 mm.

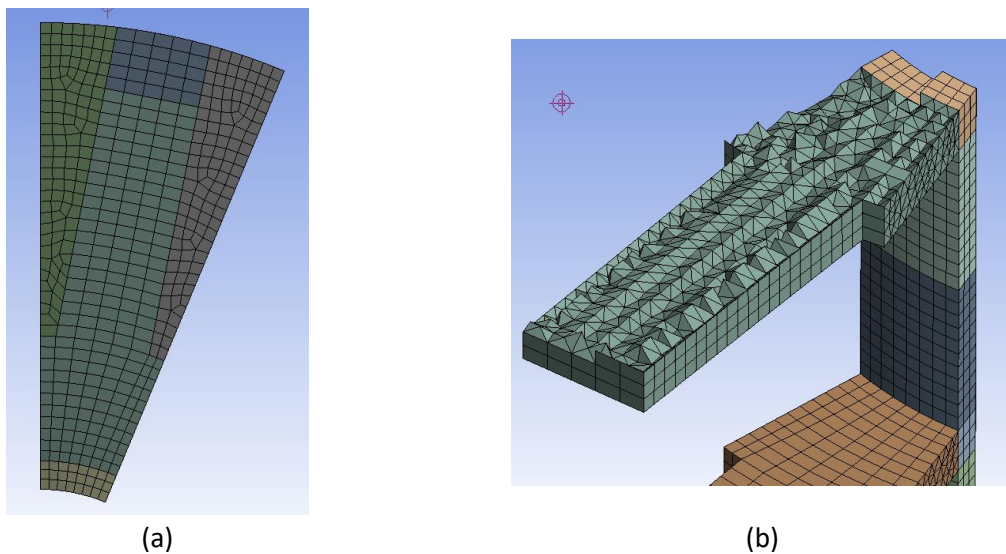


Figure 66 : Détail du maillage adopté pour le modèle CFD
(a) : Coupe vue du dessus – (b) : Maillage du tube et de l'intérieur des ailettes

Critère de qualité	Qualité orthogonale minimale	Inclinaison maximale	Rapport d'aspect maximal
Valeur	0,098	0,81	26
Recommandations d'ANSYS®	> 0,1	< 0,95	--

Table 10 : Critères de qualité du maillage adopté pour le modèle CFD

IV.3.2.1.2. Conditions aux limites et paramètres du modèle

Lors d'une charge, la chaleur transmise au MCP par le fluide caloporteur (vapeur en condensation) arrive dans le domaine par la paroi interne du tube. A la frontière du domaine qui correspond à cette paroi (Figure 67), la condition aux limites qui est appliquée permet cet apport de chaleur. La température de la paroi peut être fixée, ou bien on peut appliquer une condition aux limites convective, de la forme suivante :

$$\varphi = \alpha(T_i - T_{ext}) \quad (81)$$

où φ est le flux de chaleur à la paroi, et T_i est la température d'une maille située à la frontière du domaine. Une condition aux limites de température fixée correspond à la présence de fluide caloporteur diphasique de l'autre côté de la paroi, localement au point considéré. Du fait du fort

échange thermique intérieur tube lors de la condensation, la résistance thermique du côté du fluide caloporteur peut être considérée comme négligeable devant la résistance côté MCP : la température de la paroi interne est alors égale à celle du fluide caloporteur. Dans le cas d'une condition d'échange convectif, la température T_{ext} est la température du fluide caloporteur à l'abscisse considérée, et α est le coefficient d'échange intérieur tube, qui n'est cette fois-ci pas considéré comme infini. Une condition de ce type est appliquée pour représenter l'échange avec un fluide caloporteur monophasique (vapeur surchauffée ou eau liquide sous-refroidie pure) localement de l'autre côté de la paroi.

Le flux de chaleur et la composante normale de la vitesse sont pris nuls aux frontières gauche et droite du domaine. La même condition est appliquée à la frontière extérieure. (Figure 68-(a)) En effet, ce sont les tubes du centre ou de la couronne intermédiaire du faisceau que l'on modélise ; le volume de MCP associé à ces tubes fait face à d'autres volumes identiques. Au niveau des frontières haute et basse du domaine (Figure 68-(b)), le flux de chaleur et la vitesse sont supposés nuls (condition de type paroi).

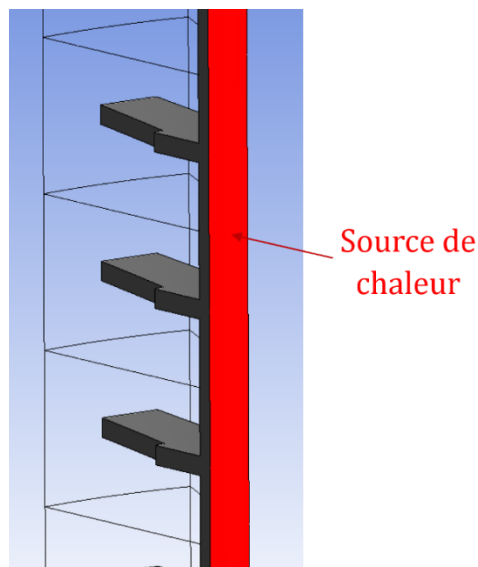


Figure 67 : Paroi interne du tube, où est appliquée la condition aux limites de température imposée ou d'échange convectif

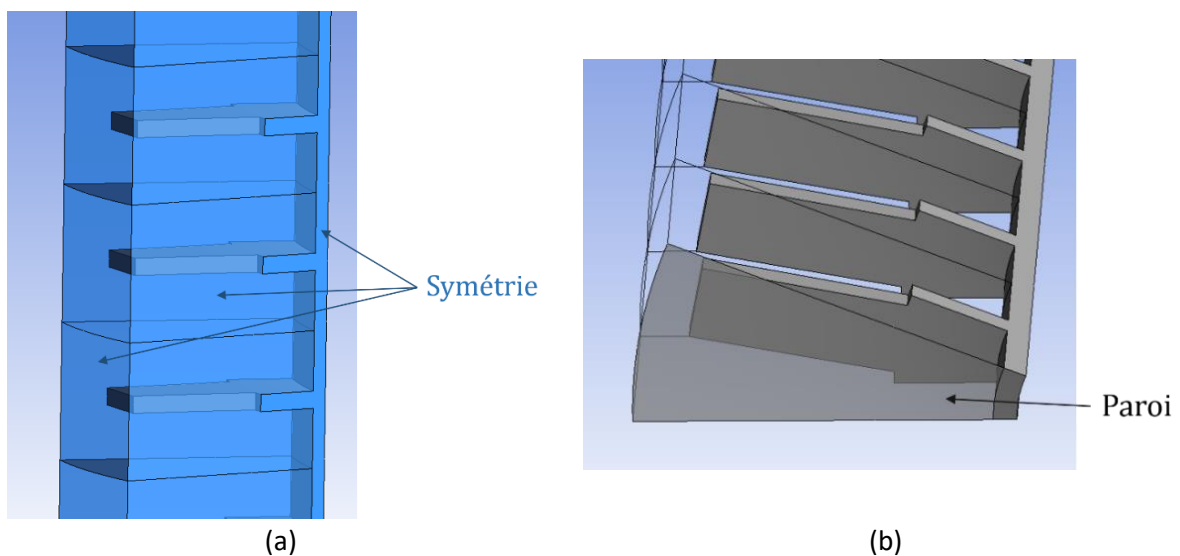


Figure 68 : Conditions aux limites appliquées aux autres frontières du domaine
(a) : Frontières latérales et extérieure – (b) : Frontières haute et basse

Le modèle enthalpie-porosité est utilisé pour modéliser le changement de phase et les mouvements de convection naturelle dans le MCP liquide, comme dans l'étude menée dans le chapitre précédent. Le modèle et ses équations constitutives sont détaillés en section III.2.1 (p. 64). La température de référence $T_{ref,b}$ de l'approximation de Boussinesq (équation (46), section III.2.1) est prise égale à $T_{ref,b} = 309^\circ\text{C}$. Le terme b qui apparaît dans le terme de pénalisation de la vitesse (équation (48), section III.2.1) est pris égal à $b = 10^{-3}$. Le transfert de chaleur dans le tube et dans les ailettes est décrit par l'équation de la chaleur (équation (55), section III.3.2.2, p. 75). Comme précédemment, le code CFD utilisé est ANSYS Fluent® v. 17.2. A chaque pas de temps du calcul, la convergence du solveur est considérée atteinte lorsque les résidus de chacune des équations constitutives (masse, quantité de mouvement selon les trois directions de l'espace, énergie) ont déchu de trois ordres de grandeur (critère de convergence relatif).

Les valeurs des propriétés physiques adoptées pour le MCP (nitrate de sodium) et pour l'acier du tube et des ailettes sont rassemblées dans la Table 11. Le changement de volume n'étant pas représenté, la masse volumique du MCP est prise égale à sa valeur en phase liquide. La chaleur latente, la température de solidus et la température de liquidus proviennent de l'étude de Lomonaco et al. [213], qui ont effectué une caractérisation du grade de nitrate de sodium utilisé dans le module prototype (fourni par la société SQM). Leur caractérisation montre qu'en dépit de la grande pureté du matériau annoncée par le fournisseur (99,5%), le changement de phase s'effectue sur une courte plage de température, s'étendant sur 2 à 4°C. La valeur de la viscosité dynamique de la phase liquide provient de Nunes et al. [214]. Les valeurs des autres propriétés physiques du nitrate de sodium, ainsi que de celles de l'acier, proviennent respectivement de mesures effectuées au LaTEP et de données rassemblées par le CEA lors de précédents projets. Le tube et les ailettes sont supposés être faits du même acier.

Matériau	NaNO ₃	Acier
ρ (kg.m ⁻³)	1927	7764
β (K ⁻¹)	3,8x10 ⁻⁴	--
c_p (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	Variable	542,8
λ (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)	Variable	50,33
μ (Pa.s)	2,8x10 ⁻³	--
L (kJ.kg ⁻¹)	173,3	--
T_{sol} (°C)	303,3	--
T_{liq} (°C)	306,6	--

Table 11 : Valeurs des propriétés physiques des matériaux adoptées dans le modèle CFD

La capacité thermique sensible et la conductivité thermique du nitrate de sodium sont prises variables avec la température. Les évolutions de ces deux grandeurs avec la température, issues des mesures effectuées par le LaTEP, sont représentées Figure 69 et Figure 70, avec les fonctions de la température mises en place dans Fluent® pour les représenter (fonctions linéaires par morceaux). Les mesures de capacité thermique font apparaître un pic endothermique vers 275°C, qui est dû à une transition de phase solide-solide [215]. Le second pic que l'on observe sur la courbe expérimentale après 300°C correspond à la transition solide-liquide, qui est prise en compte via la chaleur latente L du modèle enthalpie-porosité. La capacité thermique sensible est ainsi maintenue à une valeur constante dans la gamme de températures où ce second pic est mesuré. La conductivité thermique prend des valeurs relativement éloignées l'une de l'autre dans les phases solide et liquide (entre 0,7 et 0,75 W.m⁻¹.K⁻¹ dans le solide, et entre 0,5 et 0,52 W.m⁻¹.K⁻¹ dans le liquide). La transition entre ces deux valeurs est

effectuée entre $T_{sol} = 303,3^{\circ}\text{C}$ et $T_{liq} = 306,6^{\circ}\text{C}$, en interpolant linéairement entre les valeurs solide et liquide près du point de fusion.

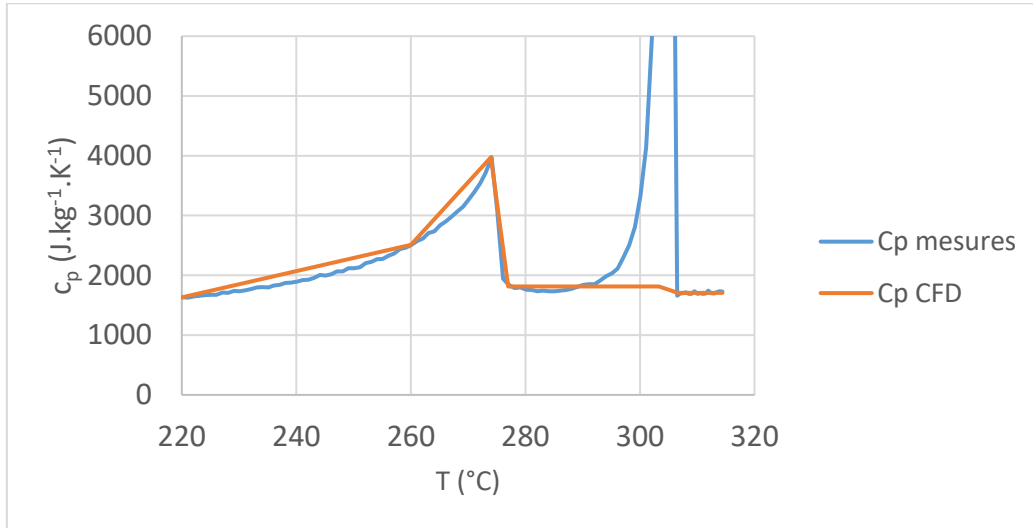


Figure 69 : Capacité thermique sensible du nitrate de sodium, mesurée, et telle qu'utilisée dans le modèle CFD

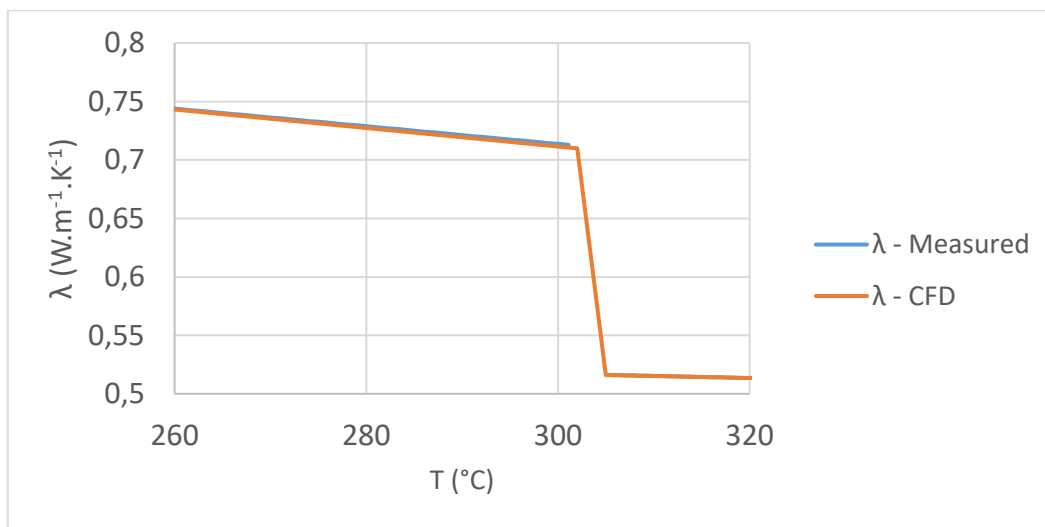


Figure 70 : Conductivité thermique du nitrate de sodium, mesurée, et telle qu'utilisée dans le modèle CFD

La valeur de la constante de zone pâteuse A_{mush} ne peut pas être déterminée a priori, comme l'a montré l'étude menée dans le chapitre III. Disposant de résultats expérimentaux du module prototype auxquels se rapporter, ce paramètre est donc utilisé pour caler le modèle sur l'expérience. Afin de déterminer la valeur de A_{mush} , le modèle CFD est utilisé pour simuler un essai de charge en pression glissante effectué sur le module prototype, lors d'une campagne d'essais menée dans le cadre d'un précédent projet. Lors de cet essai, les mesures de température effectuées dans les tubes de vapeur montrent que le niveau d'eau y est très stable au cours du temps : le niveau se situe dans le bas des tubes pendant toute la durée de l'essai, la hauteur de la colonne d'eau étant estimée à environ 3% de la hauteur totale des tubes. Ce même essai étant utilisé pour valider le modèle système et l'approche multi-échelles, ses caractéristiques sont détaillées dans le chapitre suivant (section V.1, p. 153). La stabilité du niveau dans le bas des tubes permet d'appliquer dans le modèle CFD une condition aux

limites uniforme sur la hauteur, à la paroi interne du tube. La moyenne des deux mesures de température effectuées à la paroi externe du tube, entre les niveaux 2 et 3 et les niveaux 6 et 7, est appliquée en tant que condition aux limites de température imposée (le fluide caloporteur est supposé diphasique sur toute la hauteur du tube). Cette condition aux limites est uniforme mais non constante dans le temps ; en effet, l'essai étant effectué en pression glissante, la température de saturation de la vapeur croît au cours du temps, à mesure que sa pression augmente.

Des calculs ont été effectués pour trois valeurs de la constante de zone pâteuse, à savoir $A_{mush} = 10^5$, 10^7 et $10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$. Parmi ces valeurs, celle de $10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ donne les résultats le plus en accord avec l'expérience. L'évolution de la température dans le MCP selon la distance au tube est tracée sur la Figure 71, pour l'expérience et pour le calcul CFD avec $10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$. Les quatre positions indiquées dans la légende se réfèrent aux différentes distances au tube décrites précédemment en section IV.3.1 (cf. Figure 63, p. 122). Pour l'expérience, les températures représentées sont des moyennes des mesures faites aux niveaux 3, 4, 5 et 6. Pour la simulation, la température est prise entre deux ailettes à une distance de 180 mm du bas du domaine. En prenant $A_{mush} = 10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$, le modèle CFD reproduit de manière satisfaisante la montée en température sensible du MCP en phase solide et la longueur du plateau de température caractéristique du changement de phase.

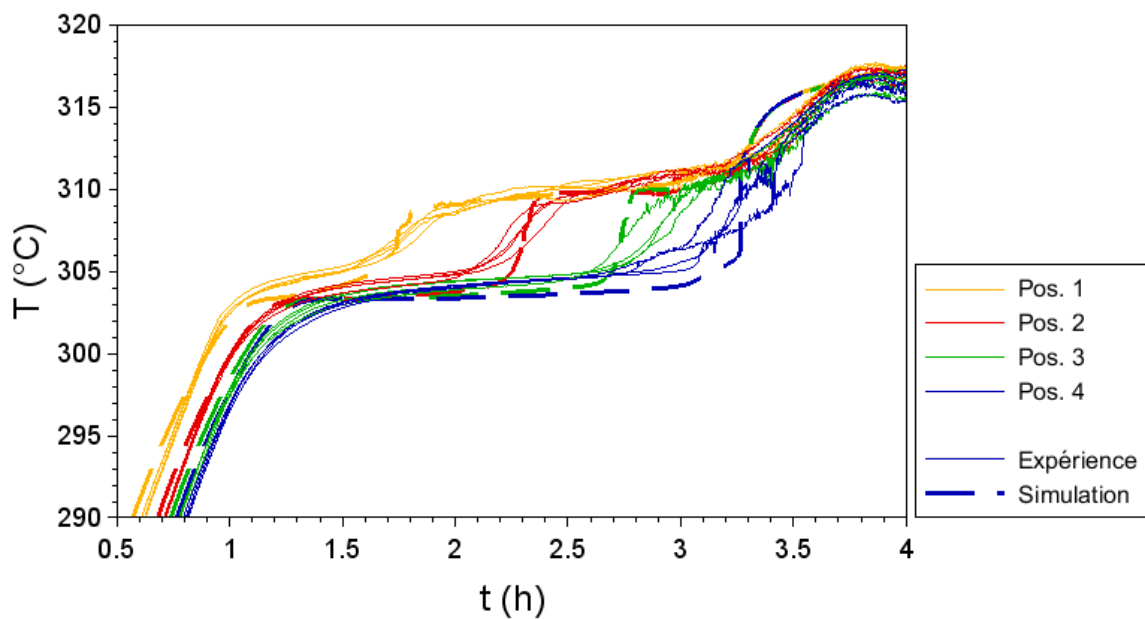


Figure 71 : Evolution des températures dans le MCP expérimentalement et dans le modèle CFD, pour l'essai en pression glissante

Afin d'illustrer les résultats obtenus avec d'autres valeurs de A_{mush} , l'évolution des températures calculées est représentée Figure 72 pour les trois valeurs testées. On peut voir que la valeur de A_{mush} impacte principalement la durée de plateau de température au changement de phase, qui est d'autant plus long que A_{mush} est élevée. Ceci est cohérent avec les observations faites dans le chapitre précédent sur les effets de cette constante. La constante a également un effet sur la température à laquelle le MCP liquide se stabilise, une fois la fusion terminée localement au point considéré mais pas encore dans son ensemble. Si peu de différences sont à constater entre les calculs menés avec $A_{mush} = 10^7$ et $10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ (environ $0,5^\circ\text{C}$ d'écart sur cette température), cette température est nettement inférieure pour $A_{mush} = 10^5 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$, avec environ 3°C de différence avec $A_{mush} = 10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$. Les profils de

température obtenus avec $A_{mush} = 10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ s'avèrent être en bon accord avec l'expérience sur tous leurs aspects, la durée de la fusion et la température de stabilisation du liquide après la fusion étant tous les deux prédits de manière satisfaisante. Cette valeur de A_{mush} doit ainsi traduire le mieux l'écoulement de liquide et les transferts de chaleur dans la zone de fusion du nitrate de sodium, dans la calandre du module prototype.

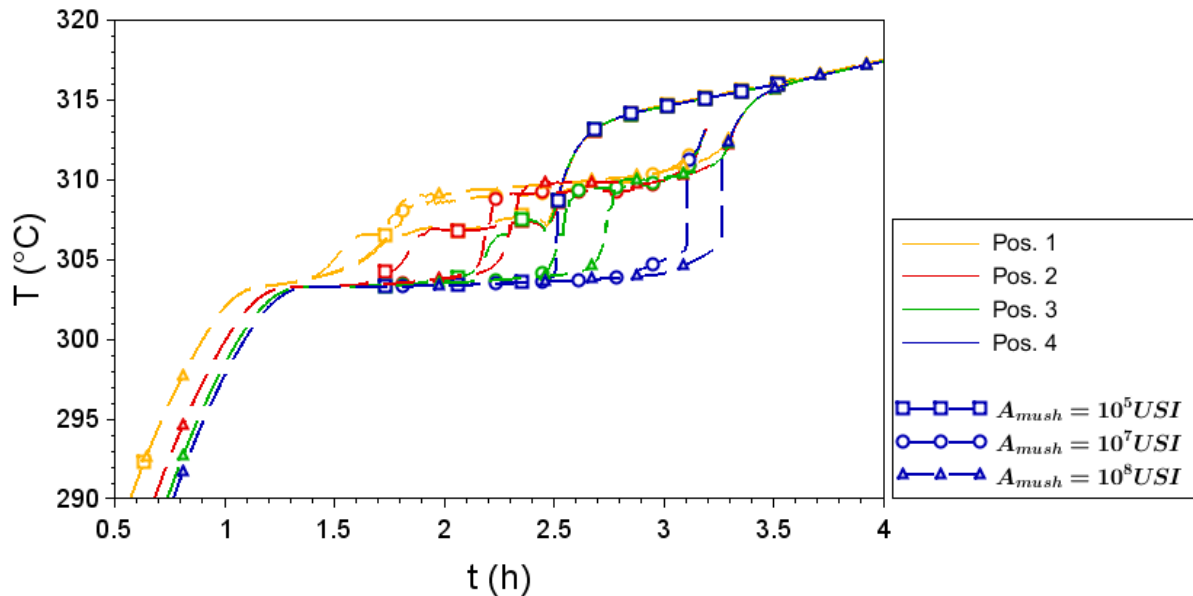


Figure 72 : Evolution des températures dans le MCP prédites par le modèle CFD selon la valeur de A_{mush} , pour le calcul avec les conditions de l'essai en pression glissante

IV.3.2.2. Modèle système

Pour décrire une géométrie de tubes à ailettes donnée, les données d'entrée à fournir au modèle système sont d'une part les dimensions géométriques du tube, et d'autre part des informations sur la fraction volumique et massique occupée par les ailettes dans le MCP, selon le rayon.

Les dimensions géométriques importantes du domaine de calcul pour le module prototype sont rassemblées dans la Table 12. Le rayon externe du domaine de calcul (cylindrique) est le même que pour le modèle CFD, afin de prendre là aussi en compte le MCP situé au centre des motifs triangulaires formés par les tubes (en orange Figure 61-(b)). Afin de tenir compte du fait que le volume occupé par les ailettes dans le MCP peut varier selon la distance au tube, et que certaines mailles peuvent être occupées uniquement par du MCP (ailettes absentes), il est nécessaire de connaître la fraction volumique x_v occupée par le MCP en fonction du rayon. Pour les ailettes segmentées du module prototype, trois zones sont à considérer le long du rayon :

- 1) $R_{text} < r < R_{text} + 10 \text{ mm}$: cette première zone près du tube est occupée par le ruban hélicoïdal qui parcourt le tube, à l'extrémité duquel sont soudées les ailettes. L'épaisseur du ruban dans la direction axiale est de 2,5 mm, soit 1/8 de la distance inter-ailettes. Dans cette zone, on a donc :

$$x_v(R_{text} < r < R_{text} + 10 \text{ mm}) = \frac{7}{8} \quad (82)$$

- 2) $R_{text} + 10 \text{ mm} < r < R_{text} + 30 \text{ mm}$: cette seconde zone est occupée par les ailettes segmentées. Les ailettes ont la forme de parallépipèdes de longueur 20 mm (direction radiale), de largeur 8 mm (direction circonférentielle), et de hauteur 2,5 mm (direction axiale). A un rayon r donné, x_v est calculé en rapportant la section dans le plan (θ, z) des 16 ailettes occupant une circonférence du tube, à la surface d'une coque cylindrique de rayon r , et de hauteur égale à la distance inter-ailettes (20 mm) :

$$\begin{aligned} x_v(R_{text} + 10 \text{ mm} < r < R_{text} + 30 \text{ mm}) \\ = 1 - \frac{16 \times 0,008 \times 0,0025}{2\pi \times r \times 0,02} = 1 - \frac{2,55 \times 10^{-3}}{r} \end{aligned} \quad (83)$$

- 3) $r > R_{text} + 30 \text{ mm}$: cette dernière zone se trouve au-delà de l'extrémité des ailettes. Elle est occupée par du MCP seul, d'où :

$$x_v(r > R_{text} + 30 \text{ mm}) = 1 \quad (84)$$

La fonction $x_v(r)$ ainsi définie est utilisée pour calculer la conductivité équivalente $\lambda_{eq,s}$ du milieu homogène lorsque le MCP est en phase solide (équation (79)). Dans une maille donnée d'indice j , la fraction volumique locale $x_{v,j}$ qui intervient dans l'équation (79) est calculée en évaluant la fonction $x_v(r)$ au centre de la maille. Les valeurs de conductivités équivalentes ainsi obtenues dans chacune des trois zones sont indiquées dans la Table 12.

La masse volumique ρ_h et la capacité thermique sensible $c_{p,h}$ du milieu homogène MCP + ailettes sont prises uniforme dans tout le domaine. Leurs valeurs sont déterminées à l'aide des équations (68) et (69), à partir des fractions volumique et massiques moyennes du MCP sur l'ensemble du domaine de calcul ; ces deux fractions valent respectivement $x_v = 0,936$ et $x_m = 0,785$. Les valeurs des masses volumiques de l'acier, du MCP solide et du MCP liquide, et la valeur de la capacité thermique de l'acier sont celles indiquées dans la Table 11. Pour la capacité thermique sensible du MCP, on adopte les valeurs mesurées dans les phases solide et liquide respectivement juste avant et après la transition de phase solide-liquide (cf. Figure 69), soit $c_{p,s} = 1813 \text{ J.kg}^{-1}$, et $c_{p,l} = 1704 \text{ J.kg}^{-1}$. Les valeurs obtenues pour la masse volumique et la capacité thermique sensible du milieu homogène sont rassemblées dans la Table 12. La fraction volumique globale x_v intervient également par ailleurs dans l'équation d'énergie du milieu homogène (équation (67)), où elle pondère le terme de chaleur latente, pour tenir compte du fait que le MCP occupe une fraction du volume seulement.

Pour toutes les simulations effectuées, le domaine de calcul est divisé en 10 mailles dans la direction axiale, avec un pas d'espace Δz uniforme. Le domaine MCP + ailettes est divisé en 9 mailles dans la direction radiale, avec un pas d'espace Δr uniforme également. En tenant compte de l'épaisseur du tube (qui est discrétisée uniquement dans la direction axiale), le modèle numérique comporte au global 110 mailles. Différentes valeurs du pas de temps Δt ont été adoptées pour les différents calculs présentés dans la suite de ce chapitre. Dans tous les calculs effectués, les valeurs des tolérances pour la convergence numérique (équations (70) et (71)) sont fixées à $\tau_{calo} = 10^{-12}$ pour le fluide caloporteur, et $\tau_h = 10^{-8}$ pour le bloc constitué par le tube et le milieu homogène.

La Table 12 rassemble l'ensemble des paramètres spécifiques du modèle système pour la simulation du module prototype. Les valeurs des autres propriétés physiques du nitrate de sodium (chaleur latente ; viscosité cinématique et coefficient de dilatation thermique en phase liquide), et de celles de l'acier du tube et des ailettes peuvent être trouvées dans la Table 11 (p. 127).

Propriété	Valeur	
Géométrie		
Rayon interne tube	$R_{tint} = 13,59 \text{ mm}$	
Rayon externe tube	$R_{text} = 15,88 \text{ mm}$	
Rayon externe du domaine de calcul	$R_{ext} = 51,0 \text{ mm}$	
Fraction volumique MCP	Equations (82)-(84)	
Propriétés matériaux		
Température de changement de phase du MCP	$T_{cp} = 305^\circ\text{C}$	
Fraction volumique MCP globale	$x_v = 0,936$	
Fraction massique MCP globale	$x_m = 0,785$	
Masse volumique milieu homogène	$\rho_h = 2299 \text{ kg.m}^{-3}$	
Capacité thermique sensible milieu homogène	MCP solide	$c_{p,h,s} = 1540 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
	MCP liquide	$c_{p,h,l} = 1454 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Conductivité thermique MCP	Solide	$\lambda_{MCP,s} = 0,720 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
	Liquide	$\lambda_{MCP,l} = 0,515 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Conductivité thermique milieu homogène lorsque le MCP est en phase solide	$R_{text} < r < R_{text} + 10 \text{ mm}$	$\lambda_{eq,s} = 6,92 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
	$R_{text} + 10 \text{ mm} < r < R_{text} + 30 \text{ mm}$	$3,48 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ < $\lambda_{eq,s}(r)$ < $5,61 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
	$r > R_{text} + 30 \text{ mm}$	$\lambda_{eq,s} = \lambda_{MCP,s} = 0,720 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Paramètres numériques		
Nombre de mailles	Direction axiale	10
	Direction radiale (milieu homogène)	9
	Nombre total de mailles	110
Tolérances pour convergence	Fluide caloporteur	$\tau_{calo} = 10^{-12}$
	Épaisseur du tube + milieu homogène	$\tau_h = 10^{-8}$

Table 12 : Paramètres du modèle système pour la simulation du module prototype

IV.4. Résultats d'application au module de stockage prototype

IV.4.1. Étude CFD – Caractérisation des transferts thermiques

IV.4.1.1. Méthodologie

Deux questions se posent quant à l'application de la méthodologie de modélisation multi-échelles présentée au début du chapitre (section IV.1) au prototype considéré. La première question concerne la manière d'exploiter les résultats 3D à maillage fin (champs de température, de fraction liquide, ...) issus des calculs CFD afin d'aboutir à une relation $Nu = f(Ra)$ qui soit 1D le long du tube. Du fait de la géométrie des ailettes du module prototype que l'on souhaite ici modéliser, on peut s'attendre à ce que le flux échangé à une abscisse donnée le long du tube varie selon que l'abscisse considérée se trouve au niveau d'une ailette ou bien entre deux ailettes. La relation 1D sur le flux de chaleur connaît

probablement des variations périodiques dans l'espace, dont la période serait la distance inter-aillettes (20 mm). Dans le modèle système, la quantité de mailles nécessaire dans la direction axiale est de l'ordre de quelques dizaines. En effet, pour les besoins du dimensionnement du module ou du procédé dans lequel il est intégré, il n'apparaît pas nécessaire de prédire le niveau d'eau dans le tube avec une précision supérieure. La longueur ailetée étant de 4 m, la taille des mailles dans la direction axiale sera donc de l'ordre de quelques dizaines à quelques centaines de mm. Il n'est donc pas nécessaire de tenir compte des variations du second ordre du flux de chaleur, ayant une période spatiale de 20 mm: lors de l'utilisation de la relation $Nu = f(Ra)$ par le modèle système, ces variations spatiales devraient être moyennées sur la hauteur d'une maille.

Pour cette raison, la relation $Nu = f(Ra)$ est recherchée en moyennant les résultats 3D du modèle CFD autour de *sous-volumes représentatifs* autour des ailettes. Ces sous-volumes prennent la forme de tronçons du domaine de calcul le long de la direction verticale, centrés autour d'une ailette. La hauteur de chaque sous-volume représentatif est égale à la distance inter-aillettes, soit 20 mm ; chacun d'entre eux est ainsi associé à une ailette individuelle. Les frontières entre les volumes sont visibles sur la Figure 63, la Figure 65 et la Figure 67. A chaque instant de calcul, un nombre de Rayleigh et un nombre de Nusselt sont calculés pour chaque volume représentatif, sur la base de moyennes des champs de température et de fraction liquide sur ce volume. C'est entre les nombres adimensionnels définis de cette manière que la corrélation est recherchée. Cette méthodologie permet de moyennner l'influence très locale de la proximité ou non d'une ailette à l'abscisse considérée le long du tube. La corrélation obtenue peut ainsi être utilisée directement par le modèle système.

La seconde question qui se pose concerne la définition des nombres de Rayleigh et de Nusselt. Comme souligné en section IV.1, ces deux nombres font intervenir une température T_{MCP} caractéristique du MCP, ainsi qu'une longueur caractéristique l_c , dont il faut choisir la définition. Le choix des expressions de ces deux grandeurs n'est pas immédiat, car plusieurs possibilités peuvent être envisagées. Dans la littérature, plusieurs études représentant la convection naturelle dans du MCP liquide par une relation de la forme $Nu = f(Ra)$ prennent T_{MCP} égal à la température de changement de phase [25], [28], [29], [208]. On pourrait aussi envisager d'utiliser la température moyenne de l'ensemble du MCP contenu dans le volume représentatif considéré, ou bien de la phase liquide uniquement (du fait que lors d'une fusion, le tube et les ailettes sont en contact avec du MCP liquide, tant que leur température est supérieure à la température de changement de phase). Pour l_c , la question qui se pose est celle des dimensions de l'espace dont cette longueur doit dépendre. Dans le plan (r, z) , les transferts de chaleur peuvent à priori dépendre de l'altitude z , du fait du transport de chaleur vertical au sein du MCP liquide par les mouvements de convection naturelle, mais également de l'état de fusion local du MCP, qui peut être décrit par une distance selon r séparant le front de fusion du tube et des ailettes.

Pour le module prototype, des corrélations entre les nombres de Rayleigh et de Nusselt ont été recherchées avec plusieurs définitions de T_{MCP} et de l_c . Cela permet d'identifier les grandeurs physiques les plus influentes sur le transfert de chaleur entre l'eau / la vapeur et le MCP, et d'être certain d'obtenir une corrélation aussi précise que possible. Trois définitions de T_{MCP} et quatre définitions différentes de l_c ont été testées, ce qui donne 12 possibilités pour la définition des deux nombres adimensionnels. Parmi ces 12 combinaisons, celle pour lesquelles la corrélation entre les nombres de Rayleigh et de Nusselt est la meilleure est retenue.

Les trois définitions testées pour T_{MCP} sont les suivantes :

- 1) Température de changement de phase :

$$T_{MCP} = T_{cp} = \frac{1}{2}(T_{sol} + T_{liq}) \quad (85)$$

- 2) Température moyenne de la phase liquide dans le volume représentatif considéré.
 Cette température est calculée en divisant l'enthalpie du MCP liquide contenu dans l'ensemble des mailles du sous-volume représentatif, par la capacité thermique de ce MCP. En notant i une maille générique du volume représentatif, elle s'exprime de la manière suivante :

$$T_{MCP} = \frac{\sum_{i=1}^{nb. \text{ mailles MCP}} c_{p,i} T_i Y_{l,i} V_i}{\sum_{i=1}^{nb. \text{ mailles MCP}} c_{p,i} Y_{l,i} V_i} \quad (86)$$

- 3) Température des premières mailles près de la paroi du tube.

Pour calculer cette température, la température de six mailles de MCP et d'une maille d'ailette adjacentes à la paroi ont été prises en compte (positions des mesures montrées Figure 73). Ces températures sont moyennées, en pondérant celles du MCP par un facteur 7/8, et celle de l'ailette par un facteur 1/8, du fait que l'épaisseur d'une ailette soit égale à 1/8 de la hauteur des volumes représentatifs (distance inter-ailettes).

$$T_{MCP} = \frac{7}{8} \frac{\sum T_{i,MCP}}{6} + \frac{1}{8} T_{i,ail} \quad (87)$$

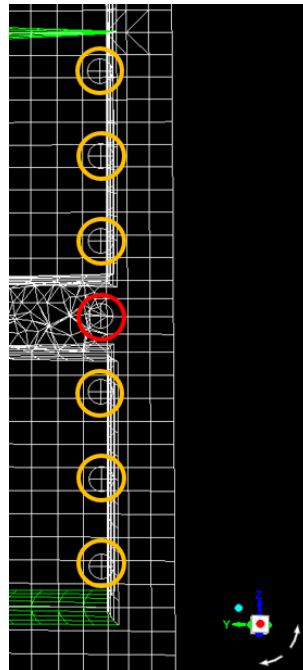


Figure 73 : Mesures des températures des mailles adjacentes à la paroi, dans le modèle CFD
 Jaune : mailles dans le MCP. Rouge : maille dans l'ailette.

Pour la longueur l_c , les quatre définitions testées sont les suivantes :

- 1) Altitude :

$$l_c = z \quad (88)$$

L'altitude adoptée pour un sous-volume représentatif donné est celle de son centre.

- 2) Largeur de l'espace annulaire de MCP :

$$l_c = R_{ext} - R_{text} \quad (89)$$

- 3) Epaisseur de la couche de MCP liquide :

$$l_c = -R_{ext} + \sqrt{R_{ext}^2 + (R_{text}^2 - R_{ext}^2) * \bar{Y}_l} \quad (90)$$

avec \bar{Y}_l la fraction fondue moyenne dans le sous-volume représentatif considéré, calculée en rapportant la masse de MCP liquide par la masse totale de MCP dans ce sous-volume :

$$\bar{Y}_l = \frac{\sum_{i=1}^{nb. \text{ mailles MCP}} \rho_i Y_{l,i} V_i}{\sum_{i=1}^{nb. \text{ mailles MCP}} \rho_i V_i} \quad (91)$$

- 4) Epaisseur moyenne de la couche de MCP liquide :

$$l_c = -R_{ext} + \sqrt{R_{ext}^2 + (R_{text}^2 - R_{ext}^2) (\bar{Y}_l)_{glob}} \quad (92)$$

où $(\bar{Y}_l)_{glob}$ est calculé de la même manière que \bar{Y}_l (équation (91)), mais en moyennant la fraction liquide sur l'ensemble du MCP du domaine de calcul, et non uniquement celui contenu dans le sous-volume représentatif considéré.

La recherche de corrélation a été effectuée sur la base de trois calculs CFD, pour lesquels la condition aux limites à la paroi interne du tube est une condition de température imposée. La température de la paroi du tube est prise uniforme le long du tube et constante dans le temps ; les valeurs adoptées pour les trois calculs sont de $T_p = 310^\circ\text{C}$, 318°C et 328°C respectivement. Ces trois valeurs de température ont été choisies afin qu'elles soient réparties régulièrement entre la température de changement de phase du MCP (305°C), et la température de vapeur maximale relevée lors des essais de charge du module prototype, à savoir 330°C environ. La température initiale est prise uniformément égale à 290°C , dans le MCP, le tube et les ailettes. Le pas de temps adopté est de $\Delta t = 0,05\text{s}$ pour les calculs avec $T_p = 310^\circ\text{C}$ et 318°C , et de $\Delta t = 0,025\text{s}$ pour le calcul avec $T_p = 328^\circ\text{C}$. Les calculs ont été effectués sur un temps physique suffisamment long pour pouvoir fondre totalement le MCP, afin de pouvoir observer l'évolution du flux de chaleur sur toute la durée de la fusion. Le temps physique nécessaire pour fondre totalement le MCP est de 18300s ($\approx 5\text{h}$) pour $T_p = 310^\circ\text{C}$, 6900s ($\approx 2\text{h}$) pour $T_p = 318^\circ\text{C}$, et 3900s ($\approx 1\text{h}$) pour $T_p = 328^\circ\text{C}$.

Une température uniforme et constante au cours du temps n'est pas représentative des conditions d'une charge réelle. En effet, lors d'une charge en pression glissante, la température à la paroi n'est pas constante dans le temps, et lors d'une charge en pression fixe, elle n'est ni uniforme le long du

tube, ni constante à une altitude donnée le long du tube. Cette condition aux limites a cependant été adoptée pour la recherche de corrélation du fait de sa plus grande simplicité de mise en œuvre. La validité de la corrélation obtenue a par la suite été vérifiée sur d'autres calculs CFD avec des conditions aux limites à la paroi plus représentatives de charges réelles ; cette validation à posteriori est exposée dans le chapitre suivant.

Une fois les trois calculs effectués, la méthodologie suivie pour déterminer une relation $Nu = f(Ra)$ est la suivante :

1. Un certain nombre d'instants de calcul transitoires sont sélectionnés pour chacun des trois calculs. A ces instants, un nombre de Rayleigh et un nombre de Nusselt sont calculés pour chacun des sous-volumes représentatifs du domaine de calcul, pour chaque combinaison de définitions envisagée pour l_c et T_{MCP} .
Les instants de calcul où ce traitement est effectué sont au nombre de 40 pour chacun des trois calculs CFD. Ces instants sont répartis de manière uniforme dans le temps entre le début de la fusion, et le moment où tout le MCP est fondu.
2. Pour chacune des combinaisons de définitions traitées pour l_c et T_{MCP} (12 au total), le nuage de points constitué de l'ensemble des points (Ra, Nu) obtenus est tracé. Ces graphes rassemblent les points issus des trois calculs CFD et de tous les instants de calcul considérés.
3. Si un choix de définitions pour l_c et T_{MCP} permet de corréler les nombres de Nusselt et de Rayleigh, une ou plusieurs courbes distinctes apparaissent dans le nuage de points (Ra, Nu) correspondant. Au vu des nuages de points tracés, les définitions de l_c et T_{MCP} aboutissant visuellement à la meilleure corrélation sont sélectionnées.
4. Une loi de la forme $Nu = C Ra^n$ est ajustée à la (ou aux) courbe(s) se dégageant du nuage de points (Ra, Nu) sélectionné. Si plusieurs courbes apparaissent, les résultats CFD sont analysés plus en détail pour identifier d'éventuels critères permettant de prédire laquelle des lois se dégageant le flux de chaleur suit, à une altitude et un instant donné.

IV.4.1.2. Résultats

Les nuages de points (Ra, Nu) pour les 12 combinaisons testées pour les définitions de l_c et T_{MCP} sont rassemblés dans la Table 13 et la Table 14 ; un numéro est attribué à chacun d'entre eux, en-dessous de chaque graphe. Sur les différents graphes, les points en bleu correspondent au début de la fusion, et les points en vert à la fin de la fusion. Les points correspondant à diverses altitudes le long du tube (volumes représentatifs), pour un calcul CFD et un instant de calcul donnés, sont reliés sur les graphes.

Certaines définitions des nombres de Rayleigh et de Nusselt conduisent à des nuages de points desquels aucune tendance particulière ne se dégage. C'est le cas lorsque $l_c = z$ (nuages n°1, n°2, n°3 ; Table 13) : ces nuages de points font apparaître un faisceau de courbes, balayant une gamme de nombre de Nusselt très large (de 0 à 1400). On peut voir sur les nuages n°1, n°2 et n°3 qu'à un instant donné, les points (Ra, Nu) pour différentes altitudes forment une courbe, qui change à chaque instant de calcul (elle se déplace au cours du temps vers les plus faibles valeurs du nombre de Nusselt, le flux de chaleur diminuant). Cela montre que d'autres paramètres physiques, non pris en compte par les

nombre adimensionnel définis de cette manière, ont une influence sur le transfert de chaleur. Les nuages de points pour $T_{MCP} = T_{cp}$ (n°1, n°4, n°7, n°10) ne font eux aussi se dégager aucune tendance identifiable. Les définitions des nombres de Rayleigh et de Nusselt correspondantes ne sont donc pas adaptées pour la corrélation recherchée.

Les autres nuages de points font apparaître des tendances plus nettes, avec une plus grande indépendance à l'instant de calcul et à la température de paroi. Sur les nuages n°5 et n°6, pour lesquels $l_c = R_{ext} - R_{t_{ext}}$, les points tendent à se rassembler autour d'une courbe. Cependant, des groupes de points (en bleu sur les graphes) se détachent de ces courbes, et semblent suivre une tendance différente. Ces points correspondent à des instants de calcul du début de la fusion. Pour les deux nuages, trois groupes de points sont en dehors de la tendance principale, et chacun d'entre eux est issu de l'un des trois calculs CFD effectués ; la tendance de ces points-ci est ainsi dépendante de la température de paroi. Les nuages de points n°9 et n°12, pour lesquels l_c est proportionnel au volume de MCP fondu, font également apparaître plusieurs tendances. A la fin de la fusion (points verts), les points se rassemblent autour d'une unique courbe plutôt nette. Cependant, selon cette courbe, le nombre de Nusselt décroît avec le nombre de Rayleigh, ce qui est contre-intuitif. En effet, le nombre de Rayleigh croît avec la longueur caractéristique l_c de la convection naturelle, et avec la différence de température entre la paroi et le MCP ; ces deux facteurs devraient favoriser l'échange thermique et non le diminuer. Par ailleurs, lorsque la fusion est moins avancée (points bleus), les points se rassemblent autour de plusieurs courbes, selon le calcul CFD considéré. Ici aussi, la tendance suivie en début de fusion apparaît dépendante de la température de paroi.

Les nuages de points n°8 et n°11 apparaissent comme les plus intéressants. Pour ces deux nuages de points, T_{MCP} est pris égal à la température moyenne de la couche de MCP liquide, et l_c est proportionnel au volume fondu. La majorité des points se rassemble autour de deux courbes plutôt nettes, et une partie des points se trouve entre ces deux courbes. Une interprétation de cette allure du nuage de points pourrait être que les deux courbes correspondent à deux régimes de transfert de chaleur différents, et que les points qui se situent entre les deux courbes se trouvent dans un état de transition entre ces deux régimes. Par ailleurs, en dehors des points situés entre les deux courbes, aucune tendance secondaire importante n'apparaît pour certaines températures de paroi ou certains instants de calcul, comme c'est le cas pour les autres nuages de points commentés dans le paragraphe précédent.

Adopter l'un de ces deux nuages de points pour la recherche de corrélation apparaît comme le meilleur choix. En effet, si les deux courbes correspondent effectivement à des régimes de transfert de chaleur entre les parois et le MCP, il doit être possible de mettre en évidence un critère permettant de déterminer le régime qui s'applique à une altitude et à un instant donné, et donc de prédire laquelle des deux courbes exploiter pour prédire le flux de chaleur.

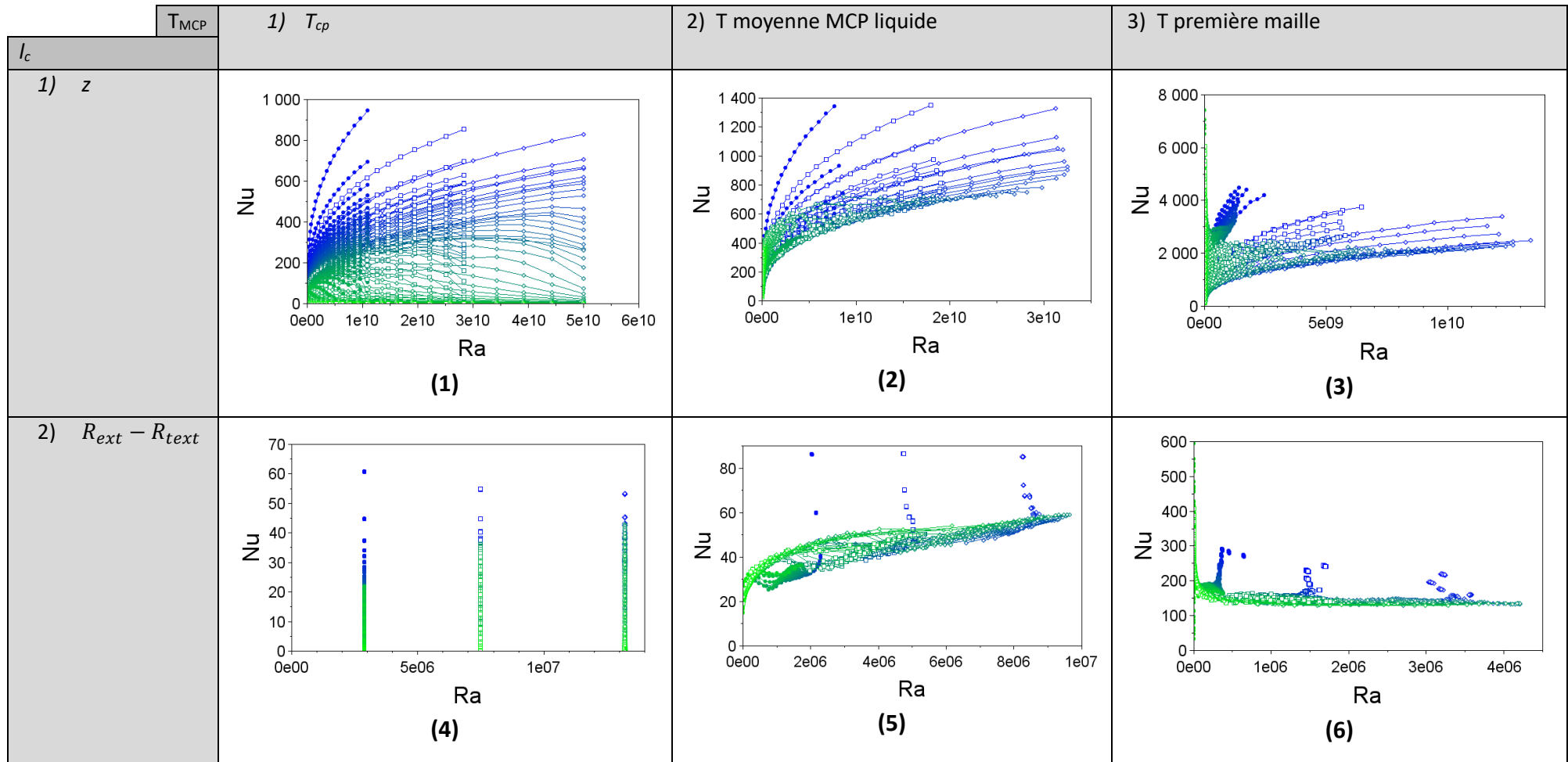


Table 13 : Nuages de points (Ra, Nu) obtenus pour plusieurs définitions de l_c et T_{MCP} (partie 1)

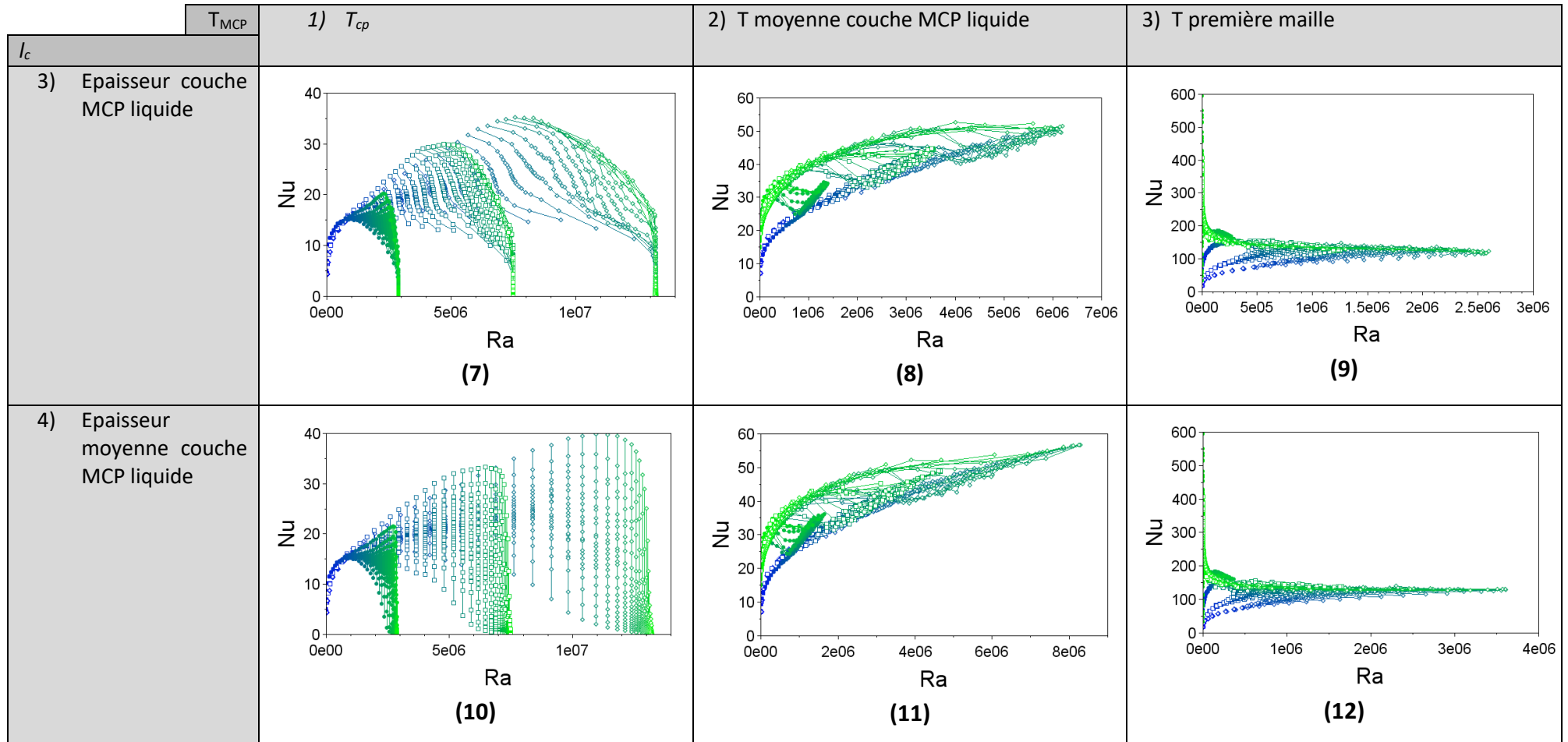


Table 14 : Nuages de points (Ra , Nu) obtenus pour plusieurs définitions de l_c et T_{MCP} (partie 2)

Parmi les nuages n°8 et n°11, c'est le n°8 qui est retenu pour la suite ; les deux courbes qui se dégagent y sont en effet légèrement plus distinctes. La définition de l_c correspondante est $l_c = -R_{ext} + \sqrt{R_{ext}^2 + (R_{text}^2 - R_{ext}^2)\overline{Y}_l}$ (n°3), et T_{MCP} y est égal à la température moyenne de la couche liquide (n°2).

Un autre argument pour appuyer le choix du nuage de points n°8 est que la seule différence entre les nuages n°8 et n°11 est que le premier utilise pour calculer l_c un volume fondu local (celui du sous-volume représentatif considéré), et le second un volume fondu global sur tout le domaine. Pour les trois calculs CFD effectués, la fusion s'avère très uniforme sur la hauteur, la température de paroi étant elle-même uniforme ; c'est seulement à la fin de la fusion que des différences le long du tube apparaissent, lorsque les mouvements verticaux du liquide deviennent importants. Les volumes fondus local et global sont ainsi pratiquement égaux pendant toute la durée de la fusion, d'où le peu de différences observé entre les deux nuages de points. Pour une fusion moins uniforme sur la hauteur, typiquement lors d'une charge en pression fixe, les nombres de Rayleigh et de Nusselt définis avec le volume fondu global (nuage n°11) pourraient en revanche ne plus être bien corrélés. En effet, le volume fondu global sera alors plus éloigné du volume fondu local sur le sous-volume représentatif considéré, au cours de la fusion. Comme le volume fondu local influence à priori plus directement le transfert de chaleur local, le préférer au volume fondu global devrait donc permettre de garder une certaine généralité dans la corrélation dégagée.

Le nuage de points (Ra , Nu) pour les définitions de l_c et T_{MCP} retenues est tracé Figure 74, sur un plus grand graphe que dans la Table 14. Une relation de la forme $Nu = C Ra^n$ a été ajustée sur chacune des deux courbes autour desquelles les points se rassemblent ; ces deux relations sont représentées également sur la Figure 74. Pour la courbe avec les plus petits nombres de Nusselt (début de fusion ; courbe 1), la relation reliant ce nombre au nombre de Rayleigh est la suivante :

$$Nu = 0,402Ra^{0,306} \quad (93)$$

Pour la courbe avec les plus grands nombres de Nusselt (fin de fusion ; courbe 2), la relation est la suivante :

$$Nu = 2,614Ra^{0,196} \quad (94)$$

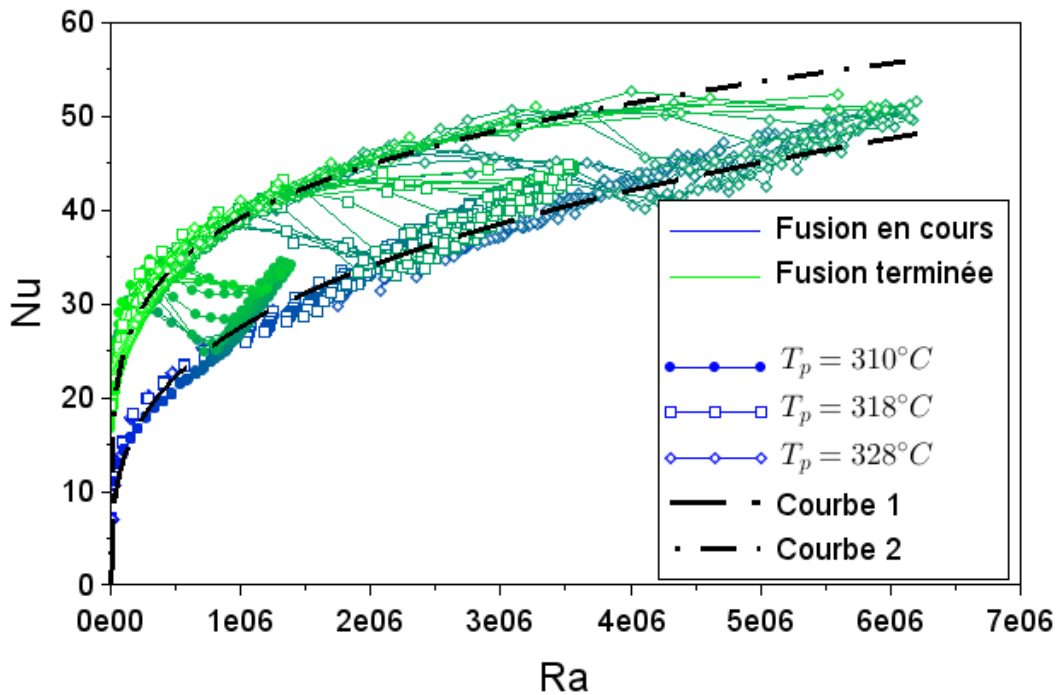


Figure 74 : Nuage de points (Ra, Nu) pour les définitions de l_c et T_{MCP} retenues

Pour pouvoir prédire le flux de chaleur local le long du tube à l'aide de ces deux relations, il faut disposer d'un critère permettant de déterminer à laquelle de ces deux lois le flux de chaleur va obéir, à un instant donné et à une abscisse donnée le long du tube. Pour identifier ce critère, un instant de calcul de l'un des trois calculs CFD menés a été isolé, pour lequel un groupe d'ailettes dans le milieu du domaine de calcul n'obéit à aucune des deux relations, comme expliqué plus haut. L'instant choisi est $t = 2390s$, pour le calcul avec $T_p = 328^\circ C$. Les points (Ra, Nu) à cet instant-ci pour les 27 ailettes du domaine de calcul sont représentés Figure 75. Comme pour les nuages de points de la Table 13, la Table 14 et la Figure 74, les points sont reliés dans l'ordre de la position des ailettes, de haut en bas pour Ra décroissant.

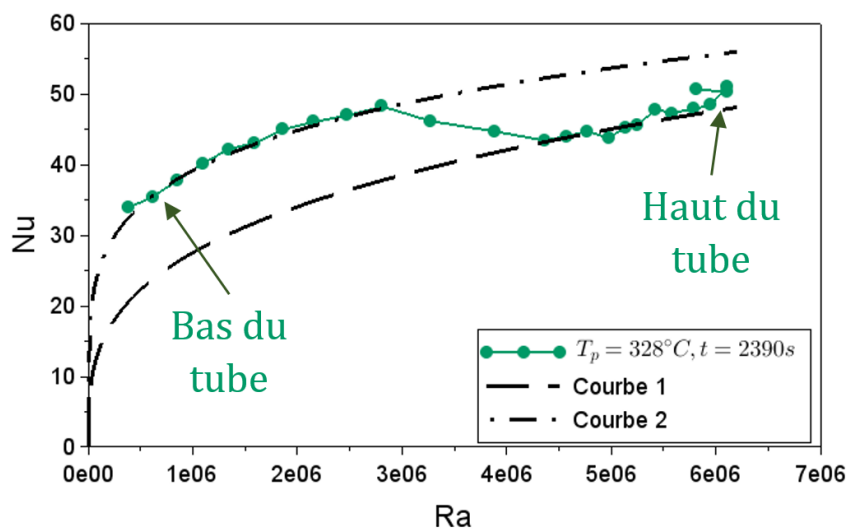


Figure 75 : Points (Ra, Nu) pour les volumes représentatifs du domaine de calcul à l'instant $t = 2390s$, pour $T_p = 328^\circ C$.

Sur les 27 sous-volumes représentatifs, les points (Ra, Nu) de deux d'entre eux se situent entre les deux courbes. Les points situés sur la courbe 1 sont associées à des volumes représentatifs qui se trouvent en-dessous des deux sous-volumes de transition, tandis que les volumes qui se trouvent au-dessus sont tous sur la courbe 2. Afin d'identifier pourquoi une transition semble se faire d'une loi à une autre le long du tube, les champs de vitesse et de température pour des sous-volumes associés à chacune des deux courbes sont représentés Figure 76. Le plan dans lequel ces champs sont représentés est vertical, et ne coupe pas les ailettes segmentées (il est proche de l'une des frontières latérales du domaine).

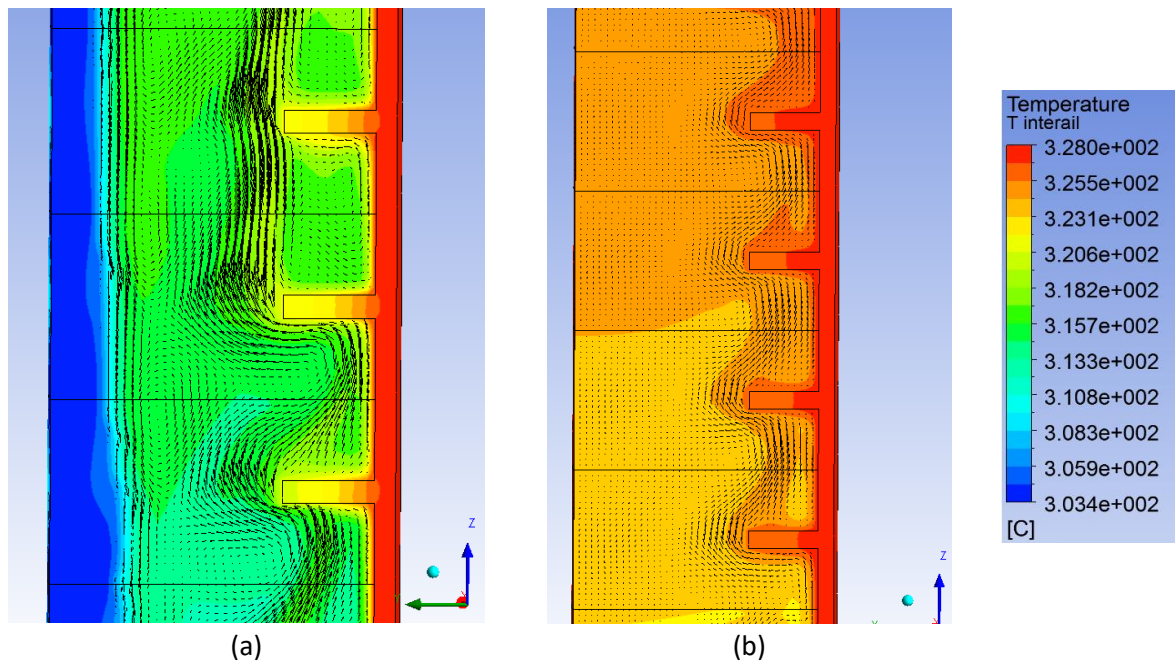


Figure 76 : Champs de vitesse et de température dans le MCP, l'épaisseur de paroi et le ruban des ailettes, à $t = 2390s$ pour $T_p = 328^\circ C$

(a) : Ailettes situées en-dessous du point de transition entre les deux lois $Nu = C \times Ra^n$

(b) : Ailettes situées au-dessus du point de transition entre les deux lois $Nu = C \times Ra^n$

Il apparaît que, dans les volumes représentatifs obéissant à la première loi, la fusion n'est pas terminée. Dans ces volumes (Figure 76-(a)), une couche de MCP liquide ($T > 308^\circ C$) animée de mouvements de convection naturelle occupe une assez importante épaisseur entre le tube et la frontière extérieure (à gauche sur la Figure 76-(a)). Entre cette couche liquide et la frontière extérieure se trouve une couche de MCP non totalement fondu ($0 < Y_l < 1$), qui n'est animée d'aucun mouvement. Dans les volumes obéissant à la seconde loi, la fusion est en revanche terminée localement. Comme on peut le voir sur la Figure 76-(b), tout le MCP est liquide dans ces volumes (sa température est supérieure à la température de liquidus $T_{liq} = 306,6^\circ C$).

En outre, l'écoulement de convection naturelle du MCP liquide n'est pas le même selon que la fusion est terminée ou non localement. Dans la zone où elle ne l'est pas (courbe 1), une grande boucle de convection naturelle qui traverse plusieurs volumes représentatifs est en place (cf. Figure 76-(a)). Un flux de liquide ascendant circule près de l'extrémité du tube et du ruban auquel les ailettes sont soudées; un flux descendant lui fait face près du front de fusion. A l'instant de calcul représenté, la vitesse atteint un maximum de $17 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$. Dans la zone où la fusion est terminée (courbe 2), un flux de liquide ascendant circule le long du tube et du ruban, mais la vitesse du flux descendant qui lui fait face près de la frontière du domaine est nettement moindre (cf. Figure 76-(b)). Ainsi, l'écoulement

ascendant amène le liquide chaud vers le haut, sans qu'aucun écoulement descendant important ne ramène de chaleur vers le bas ; cela explique le fait qu'une stratification de la température sur la hauteur puisse être observée dans cette zone. Dans la zone où la fusion est en cours, une stratification de température est visible également, mais elle est nettement moindre du fait du flux de liquide descendant bien plus important. En outre, la vitesse de l'écoulement de liquide est très différente dans les deux zones. Dans la zone où la fusion n'est pas terminée, la vitesse atteint un maximum de 17 mm.s^{-1} à l'instant de calcul choisi. Dans la zone où la fusion est terminée, la vitesse du liquide diminue avec l'altitude, à mesure que la température augmente ; la vitesse maximale dans le flux de liquide ascendant est atteinte près du point le long du tube où se fait la transition entre les deux lois $Nu = C Ra^n$; elle est de 9 mm.s^{-1} environ.

Ces différences dans les champs de température et de vitesse peuvent expliquer le fait que le transfert de chaleur obéisse à une loi différente selon que la fusion est localement terminée ou non. Lorsque la fusion est en cours, la paroi du tube et les ailettes chaudes font face au front de fusion, dont la température se maintient dans la plage de changement de phase du MCP ($T_{sol} < T < T_{liq}$) pendant toute la durée de la fusion. Un fort gradient de température horizontal est ainsi présent entre le front de fusion, et le tube et les ailettes, ce qui explique les plus forts mouvements de convection naturelle. La situation est ainsi assimilable à de la convection naturelle dans une cavité avec deux extrémités maintenues en température, d'épaisseur croissante. Lorsque la fusion est terminée, la paroi à température fixe que le front de fusion constitue n'est plus présente : le tube et les ailettes font face à la frontière extérieure du domaine de calcul, au niveau de laquelle le flux de chaleur est nul. La vitesse de l'écoulement du MCP liquide diminue, et une stratification thermique plus marquée se met en place. La situation est alors celle d'un écoulement de convection naturelle dans une cavité dont une paroi maintenue en température et l'autre paroi est isolée, d'épaisseur fixe. Deux situations de transfert de chaleur très différentes, avec leurs propres structures d'écoulement de convection naturelle, sont ainsi présentes selon que la fusion est en cours ou terminée. Cela pourrait expliquer le fait que le transfert de chaleur obéisse à une loi différente selon l'état de fusion local du MCP.

Afin d'identifier pourquoi deux volumes représentatifs donnent des points (Ra , Nu) situés entre les courbes des deux lois (cf. Figure 75), les champs de fraction liquide et de vitesse ont été tracés pour ces deux volumes et ceux qui leur sont adjacents, Figure 77-(b). Comme pour la Figure 76, ces champs sont tracés dans un plan vertical qui ne traverse pas les ailettes segmentées (seulement le ruban). Les flèches sur la Figure 77 indiquent les points sur le graphe (Ra , Nu) (Figure 77-(a)) qui correspondent aux différents volumes représentatifs montrés. La Figure 77-(b) ne fait pas apparaître visuellement beaucoup de différences entre les volumes où s'effectue la transition (flèches oranges), et ceux associés à la première loi (flèche bleue). L'épaisseur de MCP non encore totalement fondu disparaît dans le haut du volume représentatif de transition situé au-dessus ; l'autre volume de transition ne peut pas être discerné de ceux qui suivent la première loi au vu de la Figure 77-(b). Afin d'avoir une meilleure idée du champ de fraction liquide 3D, celui-ci est tracé sur la frontière extérieure du domaine, Figure 78. Ici, on peut voir que pour les deux volumes où s'effectue la transition (entourés en orange), le MCP situé contre la frontière extérieure est partiellement fondu ($Y_l < 1$) sur une partie de la surface, et totalement fondu ($Y_l = 1$) sur une autre partie de la surface de la frontière. Pour les volumes situés en-dessous, qui suivent la première loi, le MCP situé contre la frontière est en revanche entièrement dans un état non complètement fondu ($Y_l < 1$).

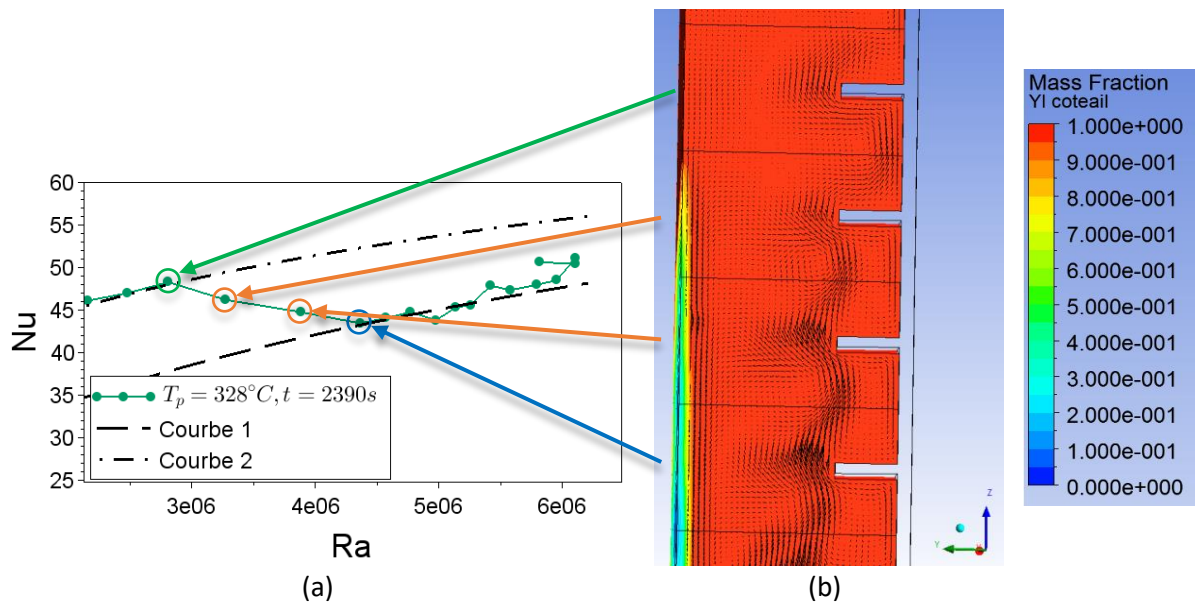


Figure 77 : (a) : Zoom sur les points (Ra, Nu) où s'effectue la transition entre les deux lois $Nu = C \times Ra^n$, pour le calcul avec $T_p = 328^\circ\text{C}$, à $t = 2390\text{s}$

(b) : Champs de fraction liquide et de température dans le MCP pour les volumes représentatifs où s'effectue la transition

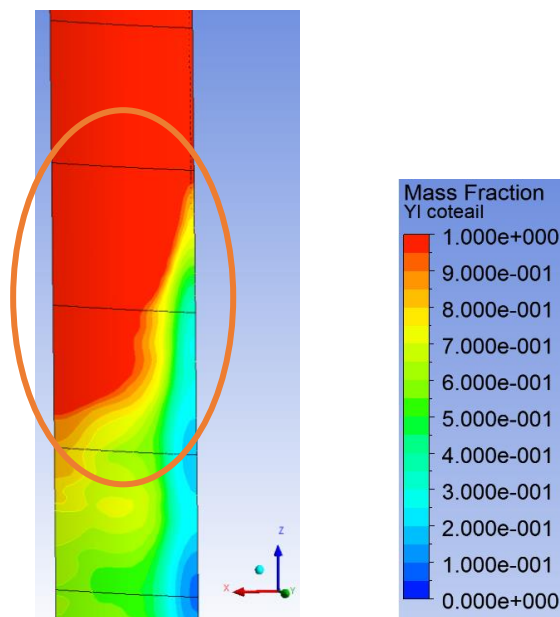


Figure 78 : Champ de fraction liquide sur la frontière extérieure du domaine, pour le calcul avec $T_p = 328^\circ\text{C}$, à $t = 2390\text{s}$
Volumes représentatifs entourés en orange : transition entre les deux lois $C \times Ra^n$

Il apparait ainsi que le critère qui détermine la loi $Nu = C Ra^n$ suivie est l'état de fusion du MCP sur la frontière extérieure. Ce constat est cohérent avec l'analyse des deux régimes de transfert de chaleur associés effectuée plus haut, qui montre que la loi suivie est déterminée par le type de paroi auquel fait face la couche de MCP liquide en écoulement, du côté opposé à la paroi du tube et des ailettes. Lorsqu'une partie seulement du MCP situé contre la frontière extérieure est entièrement fondue ($Y_l = 1$), le tube et les ailettes font face en partie au front de fusion à température fixe (courbe 1), et en partie à la frontière extérieure, à laquelle le flux de chaleur est nul (courbe 2). Il semble ainsi logique que les points du graphe (Ra, Nu) correspondant à cette situation se situent entre les deux courbes.

Pour l'utilisation des deux lois dans le modèle système, prédire l'état de fusion du MCP à la frontière extérieure du domaine n'est pas possible directement. En effet, la fraction liquide est calculée par le modèle système au centre des mailles ; le maillage étant bien plus lâche que dans le modèle CFD, assimiler la fraction liquide sur la frontière extérieure à celle au centre de la maille située au plus près de cette frontière semble trop imprécis. A la place, la transition entre les deux lois se fait, de manière arbitraire, lorsque la fraction liquide moyenne dans les mailles situées à une abscisse donnée le long du tube (notée $\overline{Y}_{l,i}$ dans l'équation (95)) dépasse la valeur de 0,98 ; autrement dit, on fait l'hypothèse qu'une zone de MCP entièrement fondu commence à apparaître sur la frontière extérieure à ce moment-ci. Au final, la relation $Nu = f(Ra)$ adoptée pour le modèle système est donc la suivante :

$$\begin{cases} Nu_i = 0.402Ra_i^{0.306}, & 0 < \overline{Y}_{l,i} < 0.98 \\ Nu_i = \frac{\overline{Y}_{l,i} - 0.98}{0.02} (2.614Ra_i^{0.196}) + \frac{1 - \overline{Y}_{l,i}}{0.02} (0.402Ra_i^{0.306}), & 0.98 < \overline{Y}_{l,i} < 1 \\ Nu_i = 2.614Ra_i^{0.196}, & \overline{Y}_{l,i} = 1 \end{cases} \quad (95)$$

IV.4.2. Modèle système

Une relation $Nu = f(Ra)$ caractéristique du module prototype ayant été mise en évidence, celle-ci a été implémentée dans le modèle système. Dans cette section, les résultats du modèle système sont comparés à ceux du modèle CFD, afin de s'assurer que les deux modèles aboutissent bien au même résultat, comme attendu. Cette étape de validation du modèle système sur le modèle CFD permet de valider la démarche de modélisation multi-échelles, avant de comparer les résultats du modèle système à des résultats d'essais menés sur le module prototype (présenté dans le chapitre suivantes).

Pour pouvoir utiliser la corrélation établie sur le flux de chaleur (équation (95)), il faut pouvoir calculer la longueur caractéristique l_c et la température T_{MCP} qui interviennent dans les deux nombres adimensionnels, à partir des données disponibles dans les mailles du modèle système. Les mailles contiennent à la fois du MCP et du métal (ailettes) ; ainsi, l_c et T_{MCP} sont calculés selon les mêmes formules que l'équation (90) et l'équation (86) respectivement, en pondérant la fraction liquide et la température sur la masse du MCP contenu dans les mailles. Pour chaque groupe de mailles du milieu homogène MCP + ailettes situé à une abscisse donnée le long du tube (rangées horizontales de mailles de la Figure 55), des valeurs de $l_{c,i}$ et $T_{MCP,i}$ associées à cette abscisse sont calculées de la manière suivante :

$$l_{c,i} = -R_{ext} + \sqrt{R_{ext}^2 + (R_{text}^2 - R_{ext}^2) * \overline{Y}_{l,i}} \quad (96)$$

$$\overline{Y}_{l,i} = \frac{\sum_{j=1}^{nb. \text{ mailles milieu homogène}} \rho_{MCP} Y_{l,i,j} x_{v,j} V_{i,j}}{\sum_{j=1}^{nb. \text{ mailles milieu homogène}} \rho_{MCP} x_{v,j} V_{i,j}} \quad (97)$$

$$T_{MCP,i} = \frac{\sum_{j=1}^{nb. \text{ mailles milieu homogène}} \rho_{MCP} c_{p,MCP} T_{i,j} Y_{l,i,j} x_{v,j} V_{i,j}}{\sum_{j=1}^{nb. \text{ mailles milieu homogène}} \rho_{MCP} c_{p,MCP} Y_{l,i,j} x_{v,j} V_{i,j}} \quad (98)$$

Trois calculs ont été effectués avec le modèle système, sur la même configuration que les trois calculs CFD effectués. La longueur de tube simulée est ainsi de 0,54 m. Afin de représenter dans le modèle système la condition de température imposée à la paroi interne du tube, le fluide caloporteur est injecté (par le haut du tube) à une pression telle que sa température de saturation soit égale à la

température souhaitée à la paroi interne. De la vapeur surchauffée est injectée par le haut, à une température supérieure de 0,1°C à la température de saturation. Le débit d'injection du fluide caloporteur est arbitrairement pris égal à 0,05 kg.s⁻¹. Ainsi, le fluide caloporteur est diphasique sur toute la longueur du tube, ce qui permet de maintenir la température de paroi interne à une valeur uniforme sur toute sa longueur, et stable dans le temps. Afin de s'assurer que la paroi est maintenue à la température de saturation de l'eau, comme souhaité, le coefficient d'échange intérieur tube α_{calo} (équation (45)) est pris constant et égal à une valeur très grande pour ces calculs ($\alpha_{calo} = 10^6$ W.m⁻².K⁻¹ ; les corrélations présentées en Annexe 1 (p. 201) ne sont pas utilisées). Les paramètres principaux des calculs système sont rassemblés dans la Table 15.

Longueur de tube (m)	Nombre de mailles	Pas d'espace	Pas de temps (s)
0,54	Dir. axiale : 10 Dir. radiale : 9 (milieu homogène)	Dir. axiale : $\Delta z = 54,0$ mm Dir. radiale : $\Delta r = 1,85$ mm	0,025
Pression fluide caloporteur (bar)	Température d'injection (°C)	Débit d'injection (kg.s ⁻¹)	Température initiale (°C)
$T_p = 328^\circ\text{C} : 125,3$ $T_p = 318^\circ\text{C} : 109,9$ $T_p = 310^\circ\text{C} : 98,65$	$T_p = 328^\circ\text{C} : 328,1$ $T_p = 318^\circ\text{C} : 318,1$ $T_p = 310^\circ\text{C} : 310,1$	0,05	290

Table 15 : Paramètres des calculs système pour la comparaison des modèles système et CFD

Une comparaison de l'énergie totale accumulée au cours du temps par le MCP, le du tube et les ailettes est effectuée Figure 79. Dans le modèle CFD, cette énergie est définie à un instant donné t de la manière suivante dans le tube et dans les ailettes :

$$H_{tube/ailettes}(t) = 16 \left(\sum_{i=1}^{nb.mailles\ tube/ailettes} \rho_p V_i \int_{T_{ini}}^{T_i(t)} c_{p,p}(T) dT \right) \quad (99)$$

avec $T_{ini} = 290^\circ\text{C}$ la température initiale. L'énergie du MCP prend en compte la chaleur latente de changement de phase :

$$H_{MCP}(t) = 16 \left(\sum_{i=1}^{nb.mailles\ MCP} \rho_{MCP} V_i \left(\int_{T_{ini}}^{T_i(t)} c_{p,sens,MCP}(T) dT + Y_{L,i}(t)L \right) \right) \quad (100)$$

Le facteur 16 dans les équations (99) et (100) est là pour tenir compte du fait que le modèle CFD représente 1/16 de la circonférence du tube : pour comparer l'énergie accumulée au modèle système, les résultats doivent être multipliés par 16.

Dans le modèle système, l'énergie est calculée directement à l'aide de l'enthalpie massique h_i de chaque maille, qui est un résultat de calcul direct du solveur. Dans le milieu homogène MCP + ailettes, la masse volumique considérée est celle du milieu homogène (définie par les équations (68) et (69)) :

$$H(t) = \left(\sum_{i=1}^{nb.mailles\ tube} \rho_{tube} V_i h_i(t) \right) + \left(\sum_{i=1}^{nb.mailles\ MCP+ail} \rho_h V_i h_i(t) \right) \quad (101)$$

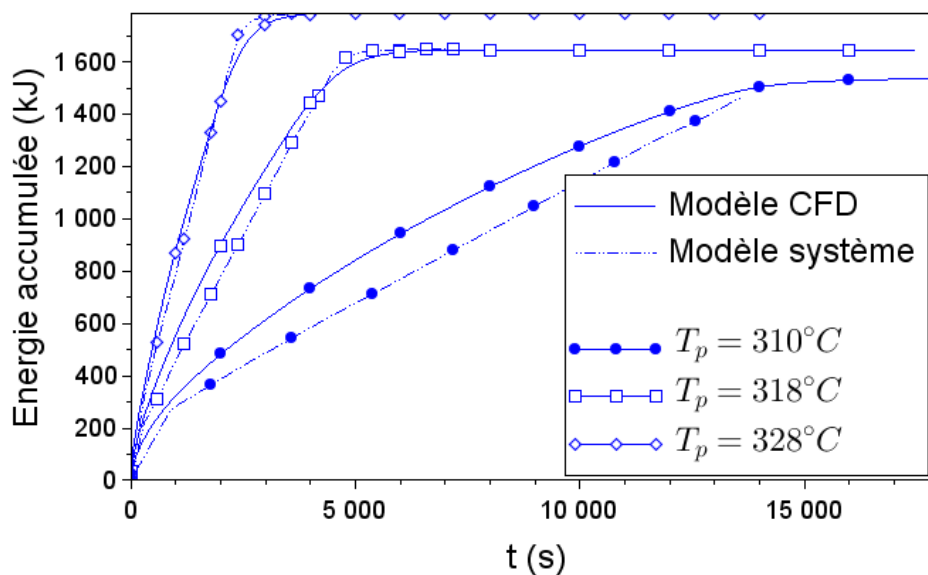


Figure 79 : Comparaison de l'énergie totale accumulée dans le MCP, l'épaisseur du tube et les ailettes au cours de trois fusions à température de paroi constante et uniforme

Les résultats des deux modèles sont globalement en bon accord. Pour chacun des trois calculs, le modèle système reproduit de manière satisfaisante l'évolution dans le temps de l'énergie accumulée par le milieu de stockage, telle que le modèle CFD la prédit.

L'énergie accumulée prédite par le modèle système se montre légèrement inférieure à celle du modèle CFD, et ce d'autant plus que T_p diminue : sur l'ensemble de la durée du calcul, l'écart relatif moyen entre les prédictions des deux modèles est de 4,8% pour $T_p = 328^\circ\text{C}$, 6,8% pour $T_p = 318^\circ\text{C}$, et 14% pour $T_p = 310^\circ\text{C}$. Pour ce dernier cas, la prédiction du modèle système est moins satisfaisante. La Figure 79 montre que l'écart entre les deux modèles est assez important pendant la majeure partie de la durée de la charge ; entre $t = 2000\text{s}$ et $t = 5500\text{s}$ environ, l'écart relatif est de 20%. Un tel écart relatif n'est jamais atteint pour $T_p = 328^\circ\text{C}$ (l'écart maximal est de 11%), et il n'est atteint que ponctuellement au début de la charge pour $T_p = 318^\circ\text{C}$.

La baisse de la qualité de la prédiction lorsque T_p diminue pourrait être à relier à l'épaisseur de la zone pâteuse dans le MCP. La zone pâteuse, dans laquelle le MCP est en partie solide et en partie liquide ($0 < Y_l < 1$), occupe la zone de l'espace dans laquelle la température locale se trouve entre les températures de solidus et de liquidus, T_{sol} et T_{liq} . Lorsque T_p diminue, le rapport de la largeur de l'intervalle de changement de phase ($T_{liq} - T_{sol}$) sur la gamme des températures locales dans le MCP augmente. En conséquence, la place occupée par la zone pâteuse augmente également : elle s'épaissit. Cet effet est illustré sur la Figure 80 : le tracé des champs de fraction liquide pour un avancement de la

fusion donné permet d'observer clairement l'épaississement de la zone pâteuse pour les plus petites valeurs de T_p .

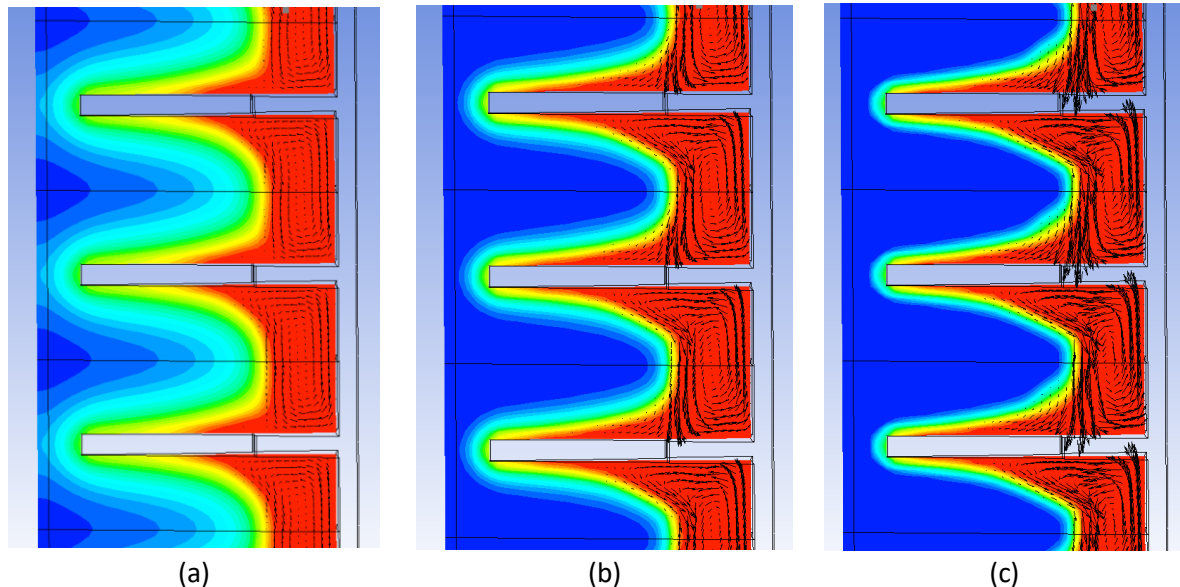


Figure 80 : Champs de fraction liquide et de vitesse pour les trois calculs CFD au début de la fusion, pour un même volume fondu global, dans un plan vertical qui coupe les ailettes en leur centre
(a) : $T_p = 310^\circ\text{C}$, $t = 3609\text{s}$; (b) : $T_p = 318^\circ\text{C}$, $t = 1192\text{s}$; (c) : $T_p = 328^\circ\text{C}$, $t = 590\text{s}$

Pour une zone pâteuse plus épaisse, il est possible que la corrélation établie sur le flux de chaleur perde en précision. En effet, la longueur l_c et la température T_{MCP} caractéristiques du transfert de chaleur sont déterminées en moyennant respectivement la fraction liquide et la température de l'ensemble du MCP en phase liquide dans le domaine de calcul, y compris celui situé dans la zone pâteuse. La Figure 80 montre que l'écoulement du MCP liquide est freiné très rapidement dans la zone pâteuse : la vitesse est déjà nulle là où la fraction liquide est de 0,75 (en jaune sur la Figure 80). Ce constat est probablement dû à la valeur assez importante adoptée pour la constante de zone pâteuse ($A_{mush} = 10^8 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$). Ainsi, si la zone pâteuse est fine, la zone considérée pour le calcul de l_c et T_{MCP} contient majoritairement du liquide pur, animé de mouvements de convection naturelle. Si la zone pâteuse a une épaisseur importante, cette zone contient une fraction non négligeable voire importante (comme c'est le cas pour $T_p = 310^\circ\text{C}$, cf. Figure 80-(a)) de MCP non totalement fondu ($0 < Y_l < 1$), donc immobile. Dans ce cas, l'écoulement de convection naturelle ne peut pas être simplement représenté par une couche de liquide dont l'épaisseur est définie par l'équation (90), comme on le suppose en définissant de cette manière la longueur caractéristique l_c qui intervient dans les nombres de Rayleigh et de Nusselt. Cette hypothèse est étayée par la présence, sur le nuage de points (Ra , Nu) obtenu à l'aide des calculs CFD (Figure 74), d'un groupe de points sur l'intervalle $10^6 < Ra < 1,5 \cdot 10^6$ pour lesquels la fusion n'est pas terminée localement, et qui sont pourtant au-dessus de la courbe de la première loi $Nu = C \cdot Ra^n$ identifiée. Ces points, entourés en rouge sur la Figure 81, proviennent tous du calcul CFD avec $T_p = 310^\circ\text{C}$. Le nombre de Nusselt prédit par le modèle CFD pour ces points est supérieur à celui donné par cette loi : la loi va donc sous-estimer le flux de chaleur par rapport au modèle CFD, ce qui est cohérent avec le fait que le modèle système sous-estime la vitesse à laquelle le MCP accumule de la chaleur, comme on l'observe pour $T_p = 310^\circ\text{C}$ (Figure 79).

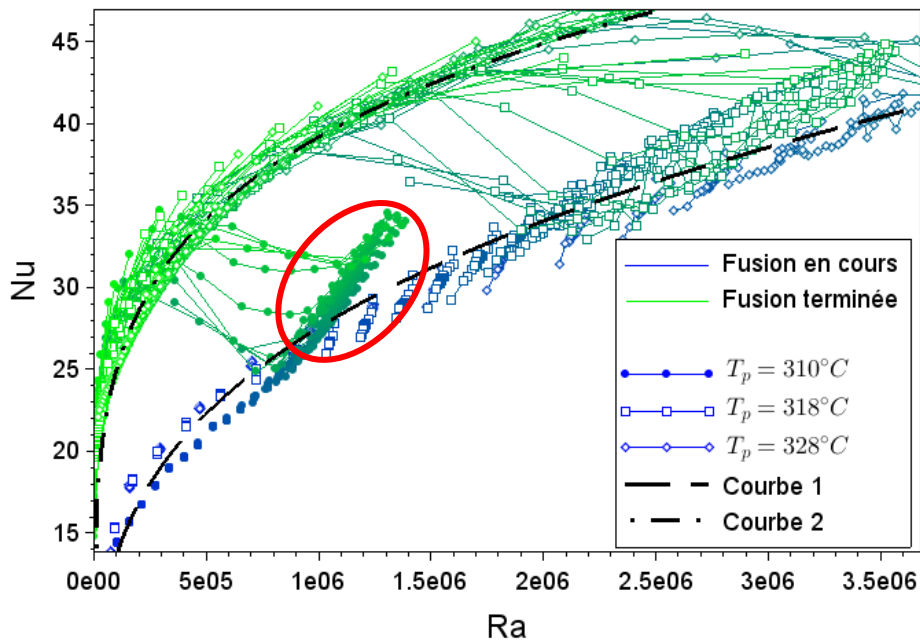


Figure 81 : Zoom dans le nuage de points (Ra , Nu) sur les points mal prédits par la première loi pour le calcul $T_p = 310^\circ C$ (entourés en rouge)

Ainsi, la corrélation établie sur le flux de chaleur n'est pas pleinement capable de prédire le flux de chaleur lorsque l'ensemble du MCP liquide n'est pas en mouvement. Une piste d'amélioration de cette corrélation serait de considérer uniquement les zones de l'espace où le MCP liquide est en mouvement pour la définition de l_c et de T_{MCP} . Les résultats restant malgré tout globalement bons, la corrélation établie (équation (95)) a tout de même été conservée pour la comparaison du modèle système à l'expérience.

Afin de comparer la prédiction locale du volume fondu le long du tube, la position du front de fusion sur toute la hauteur du domaine de calcul est représentée Figure 82 pour les deux modèles, pour le cas $T_p = 328^\circ C$, à deux instants de calcul. Le front de fusion est défini comme l'ensemble des points pour lesquels $Y_l = 0,5$. Pour le modèle système, sa position est déterminée en interpolant le champ de fraction liquide entre les mailles. Pour le modèle CFD, trois courbes sont représentées sur la Figure 82 : la courbe en trait plein représente la position du front dans un plan vertical qui coupe les ailettes en leur centre (même plan que pour la Figure 80), et les deux courbes avec tirets représentent le front dans des plans verticaux situés entre les ailettes (même plan que la Figure 76), près des deux frontières latérales du domaine de calcul.

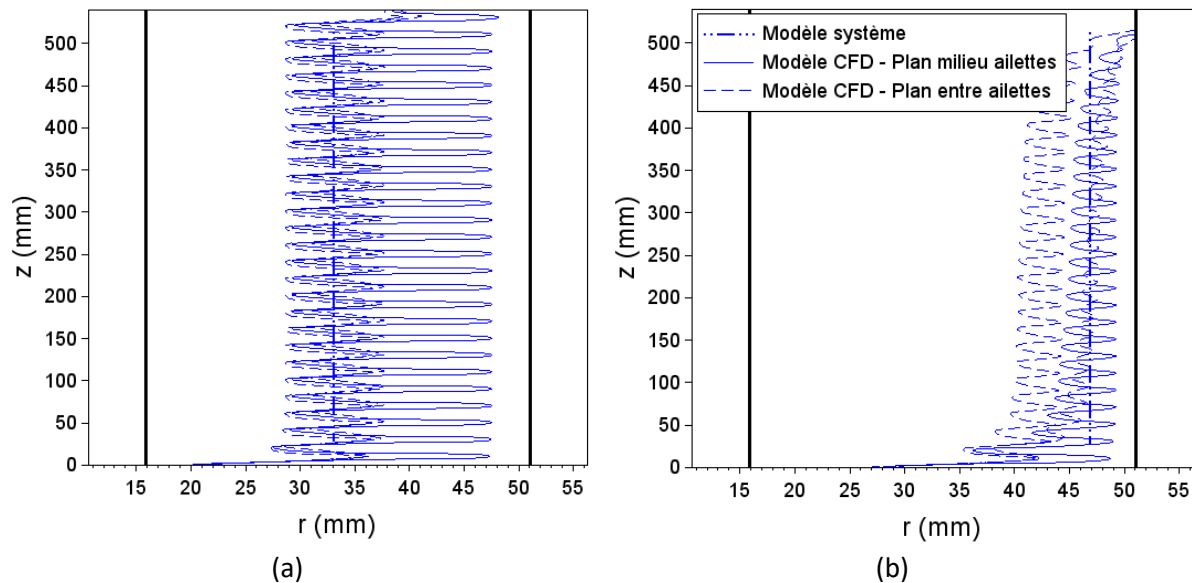


Figure 82 : Tracé du front de fusion le long du tube pour les modèles CFD et système, pour le cas $T_p = 328^\circ\text{C}$
(a) : $t = 900s$; (b) : $t = 1800s$

Au milieu de la fusion (Figure 82-(a)), le modèle système est en bon accord avec le modèle CFD. L'état de fusion du MCP prédit par la CFD est très uniforme sur la hauteur pendant une grande partie de la durée de la fusion. Comme évoqué plus haut en section IV.4.1.2, cette uniformité est due au fait que la température de paroi soit elle-même uniforme. Le front de fusion prédit par le modèle système est bien uniforme également, et sa position est conforme à celle prédite par le modèle CFD. A noter que pour le plan qui coupe le milieu des ailettes (trait plein), l'extension du front de fusion près de la frontière extérieure est due à la présence des ailettes, qui conduisent la chaleur jusqu'à leur extrémité.

Lorsqu'on se rapproche de la fin de la fusion (Figure 82-(b)), la position moyenne du front est toujours bien prédite par le modèle système. Dans le modèle CFD, le front dans l'un des deux plans entre les ailettes est plus reculé que dans le modèle système et dans les deux autres plans. Les mouvements de convection naturelle du MCP liquide sont en effet plus faibles dans ce plan que dans celui qui se trouve près de l'autre frontière latérale du domaine, ce qui est probablement lié à la légère inclinaison des ailettes dans le plan (θ, z) . Le modèle système ne reproduit pas en revanche le fait que le front de fusion ne soit ici plus uniforme sur la hauteur. Cette non-uniformité prédite par le modèle CFD est à expliquer par le fait qu'à cet instant de calcul, l'importante épaisseur de MCP liquide permet le développement d'importantes boucles de convection naturelle qui occupent toute la hauteur du domaine. Du liquide chaud est ainsi transporté vers le haut, et du liquide froid vers le bas du tube (cf. Figure 83-(b)), qui accélère la fusion dans le haut, et la ralentit dans le bas. A $t = 900s$, ce phénomène de stratification thermique n'est pas présent, malgré la présence de flux de liquide qui parcourent la hauteur du domaine : en effet, la vitesse de l'écoulement est moins importante, du fait de la zone de l'espace plus réduite occupée par le liquide (cf. Figure 83-(a)). Le modèle système ne tient pas compte des transferts de chaleur verticaux par l'écoulement de liquide ; de ce fait, la température de paroi étant uniforme, il prédit un front de fusion uniforme durant toute la fusion. Ainsi, le phénomène de stratification thermique du MCP liquide par les mouvements de convection naturelle ne peut pas être reproduit par le modèle système.

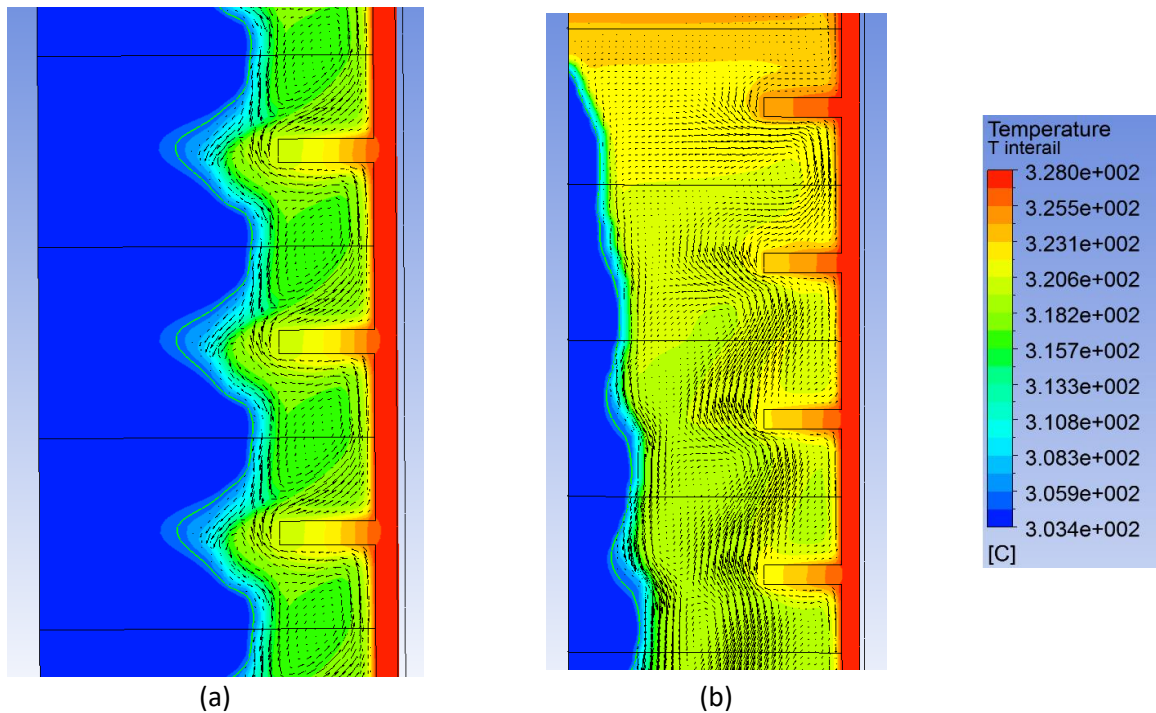


Figure 83 : Champs de température et de vitesse dans le haut du tube, dans un plan vertical situé entre les ailettes, pour $T_p = 328^\circ\text{C}$
 (a) : $t = 900\text{s}$; (b) : $t = 1800\text{s}$

Au global, le modèle système reproduit malgré cela de manière satisfaisante les résultats du calcul CFD. L'énergie accumulée est reproduite avec une erreur non négligeable mais raisonnable la plupart du temps, pour un temps de calcul divisé d'un facteur 10 à 40 par rapport au modèle CFD, selon les cas (cf. Table 16). L'important gain en temps de calcul pour la faible dégradation de la précision des résultats montre que l'approche présentée est pertinente pour construire un modèle système d'un module de stockage, qui puisse tenir compte des effets de la convection naturelle du MCP liquide et de la présence d'ailettes sur le transfert de chaleur.

Modèle	$T_p = 310^\circ\text{C}$	$T_p = 318^\circ\text{C}$	$T_p = 328^\circ\text{C}$
Modèle CFD	289h (≈ 12 jours)	132h (5,5 jours)	158h (≈ 7 jours)
Modèle système	29h	8h	4h

Table 16 : Temps de calcul des différents calculs CFD et système

IV.5. Synthèse du chapitre

Dans ce chapitre, un modèle système générique d'un module de stockage de vapeur par MCP a été mis en place. Il s'agit d'un modèle à mailles grossières, qui représente à la fois en 1D l'écoulement diphasique d'eau liquide / de vapeur dans les tubes, et les transferts de chaleur et le changement de phase dans le MCP, dans les ailettes qui entourent le tube, et dans les éventuels inserts conducteurs qui sont disposés dans le MCP. Une conductivité thermique équivalente est attribuée au milieu MCP + ailettes / inserts ; celle-ci est paramétrée à l'aide de résultats issus d'un modèle CFD 3D fin du changement de phase, des transferts de chaleur et des écoulements de convection naturelle dans le MCP. Cette méthodologie de modélisation multi-échelles a été appliquée sur une géométrie de tubes à ailettes segmentées, issue d'un module de stockage prototype disponible au CEA Grenoble. L'étude de ce module par CFD a permis de mettre en évidence une relation adimensionnelle sur le flux de chaleur échangé entre l'eau liquide / la vapeur et le MCP. Cette relation permet de déterminer au cours du temps des valeurs de conductivité équivalente pour le modèle système.

Le modèle système ainsi paramétré reproduit l'évolution dans le temps de l'énergie accumulée dans le MCP, les ailettes et l'épaisseur du tube que prédit le modèle CFD, avec une erreur de 4 à 14% selon la température du fluide caloporteur. Les effets de la convection naturelle du MCP liquide, et de la présence des ailettes sur le transfert de chaleur sont ainsi correctement pris en compte par le modèle système. Sur les différents calculs effectués, les temps de calcul du modèle système sont 10 à 40 fois plus faibles que ceux du modèle CFD ; un calcul système transitoire de l'ensemble de la charge nécessite de 4 à 30h. Ces temps de calcul permettent d'envisager l'utilisation du modèle système pour le dimensionnement d'un module de stockage, ou d'un procédé dans lequel il serait intégré. Le fait que le modèle système puisse reproduire les résultats CFD, et l'importante réduction du temps de calcul, confirment la pertinence et montrent l'intérêt de la méthode de modélisation multi-échelles proposée pour construire un modèle de dimensionnement d'un module de stockage, qui tienne compte des phénomènes physiques fins.

La comparaison du volume fondu local le long du tube a montré que le modèle système avait pour limitation de ne pas pouvoir simuler la stratification thermique qui peut se mettre en place dans le MCP liquide. Cela est dû au fait que le modèle système ne tient pas compte des transferts de chaleur verticaux par l'écoulement de convection naturelle du liquide. Sur les cas d'étude présentés ici, l'influence de ces transferts verticaux est moindre du fait que la température de paroi soit uniforme, ce qui permet à la fusion du MCP d'être quasiment uniforme sur la hauteur ; les résultats du modèle système restent ainsi en plutôt bon accord avec les résultats CFD. Pour la simulation d'une charge réelle, le modèle devrait ainsi pouvoir simuler correctement une charge en pression glissante, la température de l'eau / la vapeur étant maintenue autant que possible uniforme le long du tube lors d'une charge de ce type. Pour une charge à pression fixe, lors de laquelle la fusion du MCP est a priori moins uniforme, les transferts verticaux pourraient avoir un impact plus important sur les transferts de chaleur globaux ; la précision de ces transferts globaux par le modèle pourrait s'en retrouver dégradée. Dans le chapitre suivant, des charges en pression glissante et en pression fixe sont simulées, afin d'observer le comportement du modèle système pour ces deux types de conditions réelles, et pour confirmer ou infirmer les hypothèses faites ici.

Chapitre V. Comparaison des résultats de modélisation multi-échelles à des résultats expérimentaux

L'étape suivante de la validation de l'approche de modélisation multi-échelles est de simuler des cas de charges réels, afin de comparer les résultats du modèle à des résultats expérimentaux. Dans ce chapitre, deux essais de charge de vapeur du module prototype présenté dans le chapitre précédent sont analysés. Ces deux essais ont été effectués sur le module prototype avant la thèse, dans le cadre d'un précédent projet. Les essais sont simulés à l'aide du modèle CFD et du modèle système mis en place. Cela permet d'une part de s'assurer de la robustesse de la relation adimensionnelle sur le transfert de chaleur (équation (95), p. 145) déterminée précédemment à l'aide de trois calculs CFD, et d'autre part de valider le modèle système sur les résultats expérimentaux.

Comme expliqué dans le chapitre précédent, deux grandes stratégies de conduite sont envisagées pour la charge d'un module de stockage de vapeur par MCP, à savoir la pression glissante et la pression fixe. Ces deux stratégies sont caractérisées par des conditions très différentes dans le fluide caloporteur, et donc dans le MCP également. Les deux essais expérimentaux présentés sont effectués selon ces deux stratégies de conduite, afin d'évaluer les prédictions du modèle système pour ces deux grands types de charges, envisagés pour l'exploitation d'un module de stockage industriel.

Les résultats obtenus pour les deux essais sont présentés l'un après l'autre. Pour chaque essai, après avoir présenté ses caractéristiques et les conditions aux limites appliquées aux modèles CFD et système, les prédictions du flux de chaleur entre fluide caloporteur et MCP faites par le modèle CFD sont comparées à celles de la relation adimensionnelle déterminée au chapitre précédent (95). Cela permet de vérifier sa validité pour les conditions des deux essais, plus représentatives de la réalité que celles des calculs CFD effectués dans le chapitre précédent. La prédiction par le modèle système de l'énergie accumulée dans le module est ensuite comparée aux résultats expérimentaux ; les différences observées entre modèle et expérience sont expliquées et commentées. Enfin, la forme du front de fusion le long des tubes est évaluée à l'aide des mesures de température expérimentales dans le MCP ; le front expérimental est comparé à celui prédit par le modèle système afin d'évaluer la prédiction locale du transfert de chaleur qu'effectue le modèle.

V.1. Charge en pression glissante

Le premier cas de charge sur lequel le modèle est évalué est une charge en pression glissante. L'essai du module prototype que l'on simule est celui utilisé dans le chapitre précédent pour valider le modèle CFD, et caler la valeur de la constante de zone pâteuse (section IV.3.2.1.2).

Au cours de cette charge, la pression P du fluide caloporteur augmente graduellement d'une valeur initiale de 60,8 bar jusqu'à une valeur maximale de 112 bar, avant de se stabiliser autour de cette valeur après 3,5h environ. De la vapeur surchauffée est injectée en haut du tube, à un débit de 20 g.s^{-1} , et à une température T_{in} supérieure de 1°C en moyenne à la température de saturation. Cette dernière augmentant au cours de l'essai du fait de l'augmentation de la pression, la température d'injection est croissante également ; son évolution dans le temps suit un profil similaire à celui de la pression. Les

profils $P = f(t)$ et $T_{in} = f(t)$ de la vapeur à l'injection ont été ajustés par des polynômes de degré 5, utilisés pour spécifier les conditions aux limites du modèle système. Ces profils, ainsi que l'ensemble des paramètres importants du modèle système pour la simulation de cette charge, sont donnés en annexe 4 (p. 213).

V.1.1. Validité de la corrélation $Nu = f(Ra)$

Le modèle système se fonde sur la relation présentée précédemment (équation (95)), qui a été déduite de calculs CFD pour lesquels la température de la paroi est uniforme et constante. Afin de s'assurer que cette relation reste correcte lorsque la température du fluide caloporteur n'est plus constante dans le temps, sa validité a été vérifiée pour le calcul CFD mené sur les conditions de l'essai en pression glissante (calcul présenté brièvement en section IV.3.2.1.2).

Pour rappel, le modèle CFD représente un secteur angulaire de 27 ailettes alignées verticalement, ce qui correspond à une hauteur de tube de 0,54m. Pour le calcul mené ici, la température initiale du MCP est de 265°C. Le niveau d'eau se trouve expérimentalement dans le bas des tubes pendant toute la durée de l'essai, et la vapeur surchauffée injectée est très proche de la saturation. De ce fait, la température est pratiquement uniforme sur la quasi-totalité de la longueur des tubes. Pour la simulation CFD, une condition de température uniforme mais non constante dans le temps est ainsi fixée à la paroi interne du tube. Le profil de température fixé comme conditions aux limites est détaillé en annexe 5 (p. 215).

A plusieurs instants du calcul, répartis uniformément entre les instants où la fusion commence et se termine, un nombre de Rayleigh et un nombre de Nusselt ont été calculés pour chacun des 27 sous-volumes représentatifs du domaine de calcul CFD (équations (57), (58), (86), (90), (91)). De manière similaire à ce qui est fait précédemment dans la section IV.4.1.2, le nuage de points obtenu pour l'ensemble du calcul est tracé sur la Figure 84, avec les courbes correspondant aux deux corrélations de la forme $Nu = C Ra^n$ qui apparaissent dans la relation (95) ; pour rappel, ces deux corrélations sont les suivantes :

$$Nu = 0,402Ra^{0,306} \quad (102)$$

$$Nu = 2,614Ra^{0,196} \quad (103)$$

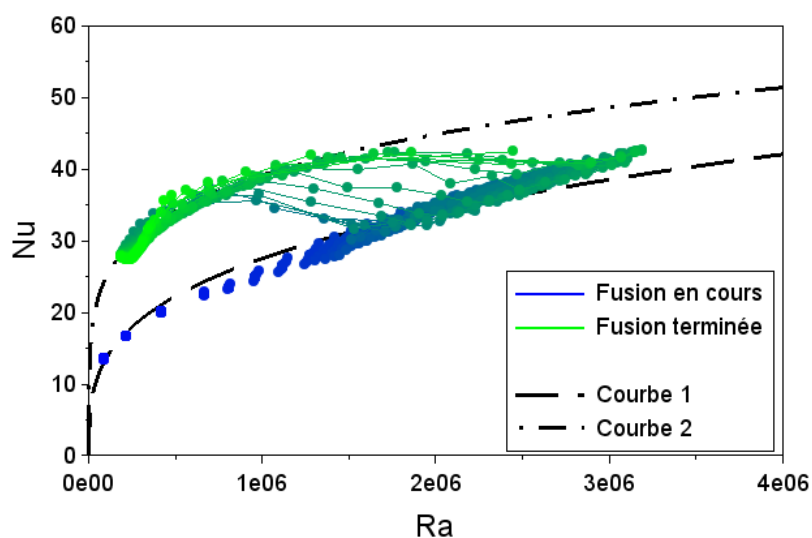


Figure 84 : Nuage de points (Ra, Nu) pour le calcul CFD effectué avec les conditions de l'essai en pression glissante

L'allure du nuage de points est tout à fait similaire à celle du nuage obtenu avec les trois calculs CFD utilisés pour construire les deux corrélations (Figure 74). Les points se concentrent autour de la courbe 1 pendant la fusion, puis se déplacent progressivement vers la courbe 2 lorsque la fusion est terminée dans le sous-volume représentatif considéré. Les tendances avant et après la fin de la fusion s'avèrent être très bien modélisées par les deux corrélations, les points étant peu dispersés autour des deux courbes.

Ainsi, le flux de chaleur à la paroi est représenté correctement par l'équation (95) pour la charge en pression glissante. La relation sur le flux de chaleur peut donc être utilisée pour la simulation système de cet essai.

V.1.2. Energie accumulée

Sur la Figure 85, la prédiction par le modèle système de l'énergie accumulée par le module de stockage est comparée aux résultats expérimentaux, ainsi qu'à la prédiction du modèle CFD. Pour les deux modèles, l'énergie accumulée est calculée de la manière décrite dans le chapitre précédent (section IV.4.2, p. 145). Souhaitant obtenir l'énergie accumulée par l'ensemble du module de stockage, l'énergie calculée pour le modèle système avec l'équation (101) est multipliée par 19, afin de tenir compte des 19 tubes du faisceau. Pour le modèle CFD, l'énergie calculée avec les équations (99) et (100) est multipliée par 19 pour la même raison, et également par un facteur $\frac{4,08}{0,54} = 7,55$, pour tenir compte de l'ensemble de la hauteur du MCP ; en effet, seule une hauteur de MCP de 0,54m est représentée dans le modèle CFD, pour 4,080m de hauteur de tube immergée dans le MCP (en phase liquide) dans le module prototype. Pour l'expérience, l'énergie accumulée est obtenue en intégrant la puissance thermique transmise au module ; cette puissance est calculée à l'aide du bilan d'enthalpie du fluide caloporteur entre l'entrée et la sortie du module, effectué à l'aide du condenseur dont dispose la boucle expérimentale, comme expliqué dans la section IV.3.1. En notant h_{in} et h_{out} l'enthalpie massique du fluide caloporteur à l'injection et à la sortie du tube, et \dot{m} son débit, l'énergie accumulée E s'exprime de la manière suivante :

$$E(t) = \int_0^t \dot{m}(h_{in} - h_{out})dt \quad (104)$$

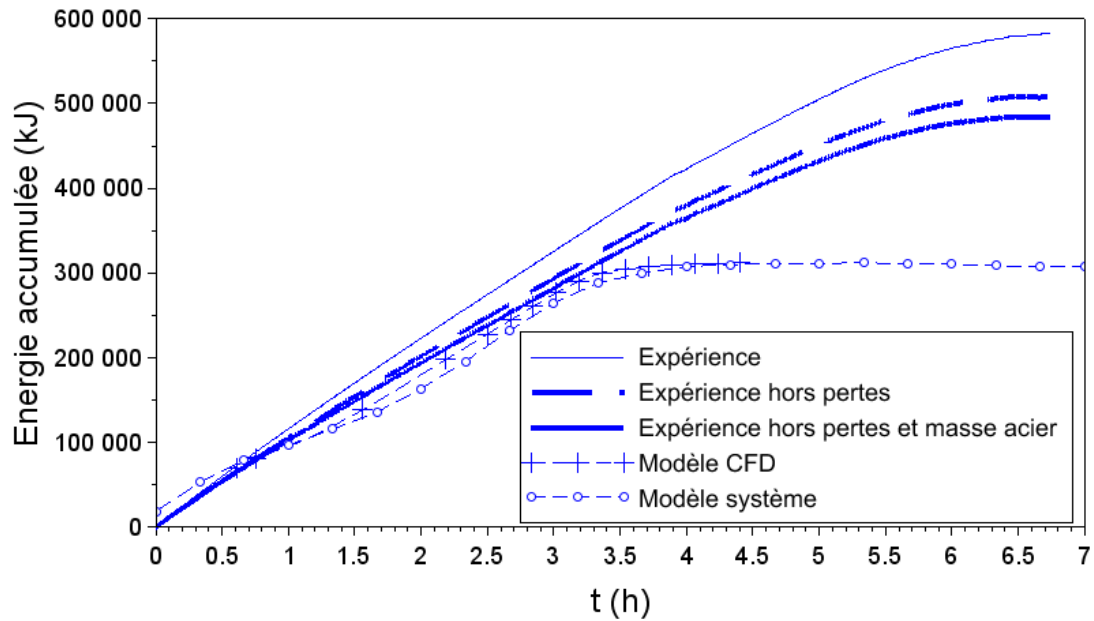


Figure 85 : Evolution dans le temps de l'énergie accumulée par le module de stockage, lors de l'essai de charge en pression glissante

L'énergie accumulée est prise nulle à l'instant initial. Pour le modèle système, la courbe de la Figure 85 ne démarre cependant pas à 0 kJ comme les autres courbes : la raison à cela est que, contrairement au modèle CFD, le modèle système ne tient pas compte de la transition solide-solide du nitrate de sodium qui a lieu vers 270°C (cf. courbe de capacité thermique équivalente Figure 69, p. 128). Afin de tenir compte de l'énergie associée à cette transition dans l'analyse des résultats, celle-ci a été calculée pour la masse de MCP présente dans le modèle système. Ce calcul est effectué en estimant l'énergie par unité de masse L_{ss} liée à la transition, à partir des capacités thermiques utilisées pour le MCP en phase solide dans le modèle CFD et le modèle système. Dans le modèle CFD, la capacité thermique du solide $c_{p,CFD}$ est prise variable avec la température, selon la fonction représentée Figure 69, qui inclut l'énergie associée à la transition solide-solide. Dans le modèle système, la capacité thermique du MCP solide est prise constante, égale à $c_{p,sys} = 1813 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Le modèle CFD considère que la transition solide-solide est terminée lorsque la température atteint la valeur de $T_{ss} = 277^\circ\text{C}$; l'énergie par unité de masse L_{ss} s'exprime donc par :

$$L_{ss} = \int_{T_{ini}}^{T_{ss}} (c_{p,CFD} - c_{p,sys}) dT \quad (105)$$

où $T_{ini} = 265^\circ\text{C}$ est la température initiale du MCP. La masse de MCP présente dans le modèle système est calculée à partir de la somme des volumes des mailles contenant du MCP, notée V , et de la fraction du volume global occupé par le MCP, égale à $x_v = 0,936$:

$$m_{MCP} = \rho_{MCP} x_v V \quad (106)$$

Finalement, l'énergie associée à la transition s'exprime par :

$$E_{ss} = 19 m_{MCP} L_{ss} \quad (107)$$

Sa valeur numérique est de $E_{ss} = 19\,060 \text{ kJ}$. Sur la Figure 85, cette valeur est ajoutée au résultat d'énergie accumulée brut du modèle système : la courbe pour le modèle système est décalée

uniformément vers le haut. Ainsi, au tout début de la charge, la courbe du modèle système est au-dessus des autres, car la transition solide-solide n'a pas encore eu lieu. La transition solide-solide est complètement terminée lorsque le MCP dépasse 277°C ; dans le modèle système, l'ensemble du MCP a dépassé cette température au bout de 1200s environ. A partir de cet instant, le résultat pour le modèle système montré Figure 85 peut être considéré comme juste.

La courbe d'énergie accumulée obtenue pour l'expérience à partir de l'équation (104) est la courbe en trait plein de plus faible épaisseur sur la Figure 85. La comparaison avec les prédictions des deux modèles permet de faire une première observation. Avant $t = 3,5h$, si les courbes de l'expérience et des deux modèles ont des pentes similaires, l'énergie déduite des résultats expérimentaux est globalement plus élevée. Sur cette période, l'écart entre l'expérience et le modèle système est d'environ 60 000 kJ, soit 20 à 30% du résultat expérimental.

Plusieurs facteurs peuvent contribuer à cet écart. Les pertes thermiques du module vers l'environnement extérieur, qui ne sont prises en compte dans aucun des deux modèles, constituent le premier d'entre eux. Afin d'estimer la contribution des pertes thermiques, l'énergie perdue au cours du temps est calculée, à l'aide du coefficient de pertes thermiques $\alpha_{pertes} = 11,5 \text{ W.K}^{-1}$ déterminé pour le module lors des essais dédiés (décrits en section IV.3.1) :

$$E_{pertes}(t) = \int_0^t \alpha_{pertes} \left(T_{calandre}(t) - T_{air\ exterieur}(t) \right) dt \quad (108)$$

La température de la paroi de la calandre, $T_{calandre}$, est calculée en moyennant les mesures des divers thermocouples qui y sont placés selon la hauteur. L'énergie perdue $E_{pertes}(t)$ est soustraite à l'énergie déduite du bilan enthalpique du fluide caloporteur, pour donner la courbe épaisse avec tirets sur la Figure 85. L'énergie accumulée hors pertes thermique est déjà bien plus proche de la prédiction des deux modèles. L'écart entre l'expérience et le modèle système est réduit à 30 000 à 40 000 kJ, soit 10 à 20% de l'énergie expérimentale.

Le second facteur d'écart est l'énergie thermique accumulée par les parties métalliques du module qui ne sont pas représentées dans les deux modèles. Ces éléments métalliques non représentés sont la paroi de la calandre, les deux collecteurs situés aux extrémités du module, et les deux plaques qui ferment le module à ses extrémités. Les seules parties solides que les modèles prennent en compte sont l'épaisseur des tubes et les ailettes. La température de ces différents éléments métalliques étant mesurée expérimentalement, il est possible de déterminer l'évolution dans le temps de l'énergie accumulée par chacun d'entre eux. Pour un élément métallique de masse m_{solide} dont la capacité thermique est constante, son énergie thermique est donnée par :

$$E_{solide}(t) = m_{solide} c_{p,solide} (T_{solide}(t) - T_{solide}(t = 0s)) \quad (109)$$

Pour ce calcul, la paroi de la calandre, les collecteurs et les plaques sont supposés être faits du même acier que le tube et les ailettes ; la capacité thermique de cet acier est de $c_{p,solide} = 542,8 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Des mesures de température sont effectuées pour les deux collecteurs et les deux plaques ; l'énergie thermique de chacun de ces quatre éléments est donc estimée individuellement. Pour l'épaisseur de la calandre, les mêmes mesures de température que celles exploitées pour estimer les pertes thermiques sont utilisées ; ici aussi, l'ensemble des mesures effectuées à la paroi de la calandre sont moyennées. Les masses des divers éléments métalliques considérés sont listées dans la Table 17.

Élément	Calandre	Collecteur inférieur	Collecteur supérieur	Plaque inférieure	Plaque supérieure
Masse (kg)	678	140	140	45	45

Table 17 : Masse des éléments métalliques du module prototype non représentés par les deux modèles de simulation

Comme pour les pertes thermiques, l'énergie thermique pour ces cinq éléments solides est soustraite de l'énergie déduite du bilan enthalpique du fluide caloporteur ; la courbe obtenue est la courbe épaisse en trait plein sur la Figure 85. L'énergie ainsi estimée se rapproche encore de la prédiction des deux modèles. L'écart avec le modèle système n'est plus que de 20 000 à 30 000 kJ, soit 6 à 17% de l'énergie expérimentale.

Le troisième facteur d'écart non pris en compte par le modèle est le MCP passif situé entre la couronne périphérique du faisceau de tubes et la paroi de la calandre. Les deux modèles tiennent compte uniquement du MCP actif, situé autour des tubes, et du MCP passif situé entre les tubes, au sein du faisceau (en orange sur la Figure 61-(b), p. 120). Contrairement aux deux facteurs d'écart précédents, il ne semble pas possible d'estimer précisément l'énergie accumulée au cours du temps par ce MCP passif non pris en compte, car aucune mesure de température n'y est effectuée dans la section d'essais. Cependant, l'ordre de grandeur de cette énergie peut être estimé, en constatant qu'avant l'instant où l'énergie accumulée se stabilise dans les deux modèles de simulation ($t = 3,5$ h environ), c'est le MCP actif uniquement qui est en train de fondre. En effet, expérimentalement, c'est vers $t = 3,5$ h que les dernières mesures de température dans le MCP, autour du tube central et des tubes de la couronne intermédiaire, quittent le plateau de température caractéristique du changement de phase autour de 305°C. L'évolution de la température du MCP au cours de l'essai est représentée Figure 86 pour le tube central et les tubes de la couronne intermédiaire, et Figure 87 pour les tubes de la couronne extérieure. Certaines températures relatives aux thermocouples de la couronne extérieure quittent ce plateau un peu plus tard, vers $t = 4$ h, mais la majorité du MCP instrumenté a dépassé 305°C avant cet instant, autour des tubes de la couronne extérieure comme des autres. Par ailleurs, dans les deux modèles de simulation, la fusion du MCP est quasiment terminée à $t = 3,5$ h ; la fraction fondue globale à cet instant est de 0,97 dans le modèle système, et de 0,99 environ dans le modèle CFD. Comme les modèles prennent en compte uniquement le MCP actif et une faible fraction de MCP passif, cela confirme le fait que le MCP actif termine bien sa fusion vers l'instant $t = 3,5$ h.

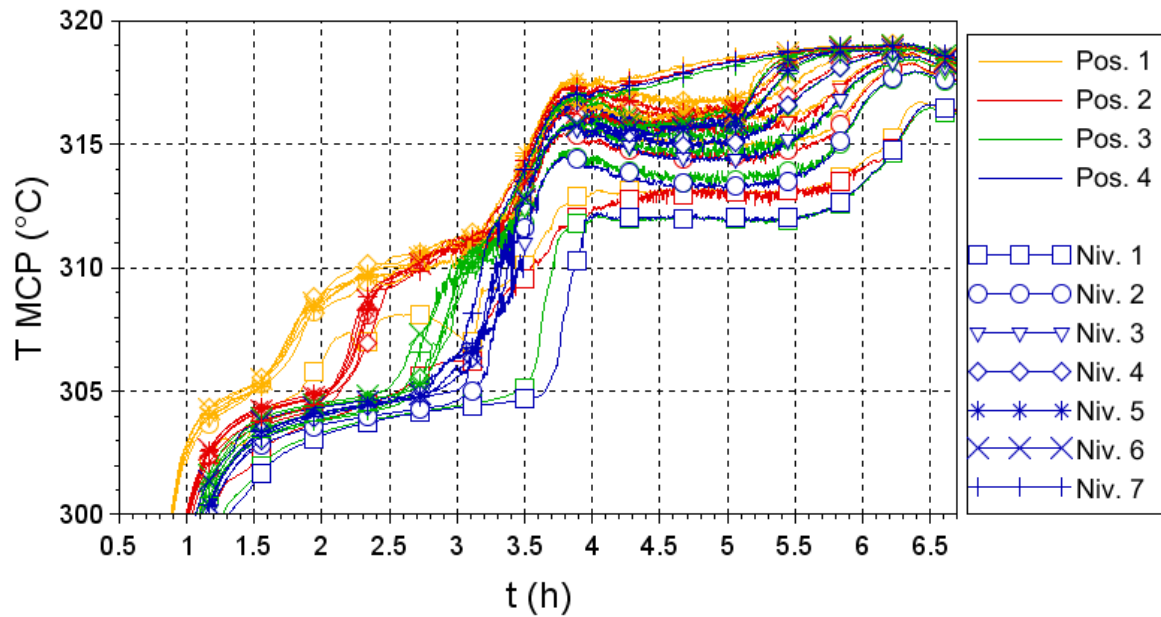


Figure 86 : Mesures de température dans le MCP actif autour du tube central et de la couronne intermédiaire, au cours de la charge en pression glissante

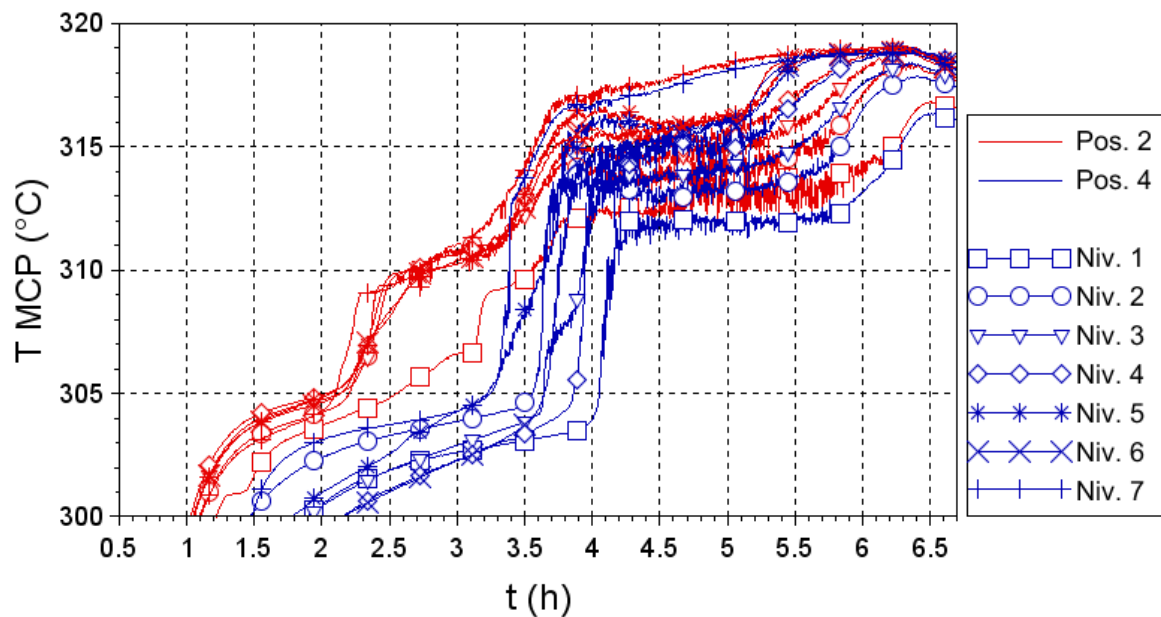


Figure 87 : Mesures de température dans le MCP actif autour de la couronne extérieure, au cours de la charge en pression glissante

Ainsi, avant cet instant, le front de fusion se situe dans le MCP actif (entre les ailettes) : la fusion du MCP passif situé entre la couronne extérieure et la paroi de la calandre n'a donc pas encore débuté, car le front de fusion ne l'a pas encore atteint. En conséquence, l'énergie thermique $E_{pass,3,5}$ accumulée par ce MCP passif avant l'instant $t = 3,5h$ correspond uniquement à une montée en température sensible en phase solide, et à la transition de phase solide-solide autour de $270^{\circ}C$, qui peut être complètement ou partiellement effectuée selon la température locale. Ainsi, $E_{pass,3,5}$ peut être majorée

par la somme de l'énergie sensible du MCP solide entre les températures T_{ini} et T_{sol} , et de l'énergie associée au changement de phase solide-solide entre ces deux températures (calculée plus haut) :

$$E_{pass,3,5} < m_{pass}c_{p,MCP,s}(T_{sol} - T_{ini}) + m_{pass}L_{ss} = 59\,050\text{ kJ} \quad (110)$$

Cette valeur maximale d'énergie thermique serait atteinte par le MCP passif lorsqu'il aurait uniformément atteint la température de $T_{sol} = 303,3^\circ\text{C}$. Dans la pratique, cela n'est probablement pas le cas au bout de 3,5h de charge. En effet, à $t = 3,5\text{h}$, la paroi de la calandre est à une température de 294°C en moyenne. Le MCP passif occupe un espace annulaire sur la périphérie, qui fait face d'une part à cette paroi, et d'autre part au MCP actif de la couronne extérieure du faisceau de tubes, dont la température se trouve dans la plage de changement de phase solide-liquide (elle est traversée par le front de fusion à cet instant). L'écart entre l'énergie accumulée mesurée expérimentalement et celle issue du calcul système est de 20 000 à 30 000 kJ, soit un peu moins de la moitié de la valeur majorante de $E_{pass,3,5}$. Il semble ainsi tout à fait plausible que l'écart d'énergie résiduel entre simulation et expérience soit à imputer à l'énergie absorbée par le MCP passif.

A partir de $t = 3,5\text{h}$, les résultats de simulation se mettent à s'écarter de manière importante des résultats expérimentaux. Dans les deux modèles de simulation, l'énergie accumulée se stabilise vers cet instant, tandis qu'elle continue à augmenter expérimentalement. Dans l'expérience, l'énergie ne se stabilise que bien plus tard, au bout de 6,5h d'essai environ. Comme expliqué plus haut, le moment où l'énergie se stabilise dans la simulation correspond au moment où la fusion du MCP actif se termine. Ainsi, le fait que le fluide caloporteur continue à céder de l'énergie au module après cet instant pourrait être là encore dû au MCP passif situé entre la couronne extérieure et la calandre, qui débute cette fois-ci son changement de phase solide-liquide.

Cette masse de MCP passif représente une fraction importante de la masse totale de MCP présente dans le module. En effet, le module contient au total 1705 kg de nitrate de sodium, et la quantité de MCP présente dans le domaine de calcul du modèle système (un seul tube) est de 54,4 kg. La masse de MCP passif non représentée dans le modèle système est ainsi égale à $m_{pass} = 1705 - 19 \times 54,4 = 672\text{ kg}$, soit environ 40% de la masse totale. Lorsque le MCP actif termine sa fusion, le front de fusion atteint la zone occupée par ce MCP passif ; comme la fusion de cette importante masse de MCP débute alors tout juste, celle-ci pourrait continuer à absorber de la chaleur du fluide caloporteur pendant plusieurs heures.

Afin de confirmer cette hypothèse, l'énergie thermique absorbée par le MCP passif à la fin de l'essai, notée $E_{pass,fin}$, est estimée. L'ensemble du MCP (actif et passif) est supposé s'être stabilisé à la température moyenne que l'on mesure à la fin de l'essai dans le MCP actif, à savoir $T_{fin} = 318^\circ\text{C}$. L'énergie thermique associée au MCP passif s'exprime alors par :

$$E_{pass,fin} = m_{pass} \left(c_{p,MCP,s}(T_{sol} - T_{ini}) + \frac{c_{p,MCP,s} + c_{p,MCP,l}}{2}(T_{liq} - T_{sol}) + c_{p,MCP,l}(T_{fin} - T_{liq}) + L + L_{ss} \right) \quad (111)$$

avec L_{ss} défini par l'équation (105).

L'application numérique donne $E_{pass,fin} = 192\ 300$ kJ. A la fin de l'essai, la différence entre l'énergie accumulée pour l'expérience et le modèle système est de 176 400 kJ. L'estimation de l'énergie absorbée par le MCP passif est conforme à cette différence d'énergie à 16 000 kJ près, soit 9% d'écart. Cet écart relatif est assez satisfaisant ; ce calcul montre ainsi que la divergence de l'expérience et du modèle système après la fusion du MCP actif est bien due à la fusion du MCP passif en périphérie de la calandre.

V.1.3. Front de fusion

Le modèle système se montre capable de reproduire l'évolution dans le temps de l'énergie accumulée dans le MCP et les ailettes, sur la globalité du module. Dans cette section, on s'intéresse à la prédiction *locale* du volume fondu le long du tube, autrement dit à la répartition de cette énergie sur la hauteur du module. Pour évaluer cette prédiction locale, la position du front de fusion dans le module est tracée pour le modèle système et pour l'expérience, dans le plan (r, z) . Le rayon jusqu'auquel s'étend le front de fusion à une abscisse z donnée le long du tube indique en effet la quantité d'énergie latente accumulée par le MCP à cette abscisse.

Dans le modèle système, le front de fusion est défini dans le plan (r, z) comme l'ensemble des points pour lesquels la fraction fondue locale Y_i vaut 0,5 (ligne de niveau de Y_i). Pour une ligne de mailles à une hauteur donnée, le rayon auquel Y_i vaut 0,5 est déterminé en interpolant linéairement la fraction fondue entre les mailles. Dans le cas où Y_i est inférieur ou supérieur à 0,5 dans l'ensemble des mailles considérées, c'est-à-dire au tout début ou à la toute fin de la fusion respectivement, le front de fusion se situe dans la maille la plus proche de la paroi du tube dans le premier cas, ou de la frontière extérieure du domaine de calcul dans le second cas. La position du front est alors prise entre R_{tint} et le centre de la maille dans le premier cas :

$$R_{cp} = R_{tint} + Y_{l,i} \Delta r \quad (112)$$

ou entre le centre de la maille et R_{text} dans le second cas :

$$R_{cp} = R_{text} + (1 - Y_{l,i}) \Delta r \quad (113)$$

avec $Y_{l,i}$ la fraction fondue dans la maille où se trouve le front.

Pour l'expérience, les mesures de température dans le MCP sont exploitées afin d'obtenir la position du front ; il est ici repéré par l'isotherme $T = \frac{T_{sol} + T_{liq}}{2} = 305^\circ\text{C}$. Les mesures de températures étant effectuées à mi-hauteur entre deux ailettes adjacentes, l'isotherme obtenue à l'aide de ces mesures donne une position moyenne du front ; la courbure du front autour des ailettes n'est pas représentée.

Pour l'analyse des résultats, l'influence de l'incertitude des mesures de température sur la position de l'isotherme à 305°C est prise en compte. Les thermocouples ont une incertitude de mesure de $\pm 1^\circ\text{C}$, à laquelle s'ajoute la dispersion des mesures effectuées à une position donnée dans le plan (r, z) . En effet, comme dit précédemment en section IV.3.1, les mesures des différents thermocouples situés à une position (r, z) donnée autour des 7 tubes considérés pour l'analyse, et à diverses positions angulaires autour de ces tubes, sont moyennées pour obtenir des mesures ramenées dans le plan (r, z) autour d'un tube. L'écart-type des mesures faites à une position donnée est de $0,3^\circ\text{C}$ en moyenne ; l'incertitude sur les mesures de température moyennées est donc de 1 à 2°C environ. La différence de température entre le front de fusion et la paroi du tube est au maximum de 13°C ; elle croît au cours de la charge jusqu'à cette valeur maximale, à mesure que la température de saturation du fluide caloporteur augmente. L'incertitude sur les mesures expérimentales est donc non négligeable devant

cette différence de température ; cela justifie l'intérêt de la prendre en compte pour l'analyse.

Les fronts de fusion obtenus pour le modèle système et l'expérience sont représentés Figure 88, à divers instants au cours de la fusion. Pour l'expérience, trois isothermes à $T = 305^{\circ}\text{C}$ sont représentées : l'une d'entre elles est obtenue à partir des mesures de température brutes, et les deux autres sont obtenues respectivement en ajoutant et en soustrayant à ces mesures brutes l'incertitude de 1°C sur les mesures des thermocouples, et l'écart-type $\sigma(r, z)$ entre les différents thermocouples à chaque position (r, z) . Si on note $T_{MCP}(r, z, t)$ le champ de température déduit des mesures, les champs $T(r, z, t)$ exploités pour tracer les trois isothermes expérimentales de la Figure 88 sont donc les suivants :

$$T(r, z, t) = T_{MCP}(r, z, t) \quad (114)$$

$$T(r, z, t) = T_{MCP}(r, z, t) + \sigma(r, z, t) + 1^{\circ}\text{C} \quad (115)$$

$$T(r, z, t) = T_{MCP}(r, z, t) - \sigma(r, z, t) - 1^{\circ}\text{C} \quad (116)$$

La légende des différentes courbes est présentée sur la Figure 89.

Jusqu'à l'instant $t = 8400\text{s}$ (Figure 88-(a), -(b) et -(c)), le front de fusion prédit par le modèle système est en bon accord avec l'expérience. Le front de fusion est quasiment vertical expérimentalement ; cela est dû au fait que la condensation de la vapeur à l'intérieur des tubes se fait sur la quasi-totalité de leur longueur (du fait de la stratégie de conduite en pression glissante), ce qui rend quasi uniforme la température de la paroi du tube. Le modèle système prédit bien un front de fusion vertical : il prédit donc bien une condensation sur toute la longueur du tube à partir des conditions aux limites du fluide caloporteur à l'injection. La position radiale du front est bien prédite également par le modèle système, ce qui est cohérent avec le bon accord constaté précédemment pour l'énergie accumulée globale. En tenant compte de l'incertitude sur les mesures, la zone de l'espace dans laquelle le front peut se situer (délimité par les courbes expérimentales à gauche et à droite) est assez large ; malgré cela, pour les trois instants de calcul regardés ($t = 6000\text{s}$; $t = 7200\text{s}$; $t = 8400\text{s}$), le front prédit par le modèle système est tout de même très proche de la courbe expérimentale issue des mesures brutes.

Aux instants suivants, la fusion cesse d'être uniforme sur la hauteur expérimentalement. A $t = 9600\text{s}$ (Figure 88-(d)), le front est plus avancé dans le haut du module que dans le bas, alors que le modèle système le prédit toujours vertical. A $t = 10800\text{s}$ (Figure 88-(e)) et $t = 12000\text{s}$ (Figure 88-(f)), la quasi-totalité du MCP est fondu expérimentalement, et seule une petite zone de MCP en bas du module, près de la frontière extérieure, n'est pas encore fondue. Dans le modèle système, la fusion est également moins avancée dans le bas du module ; mais pour les deux instants, l'écart entre le haut et le bas reste plus important expérimentalement. A $t = 12000\text{s}$, la fusion est terminée sur quasiment toute la hauteur expérimentalement, alors qu'il subsiste dans le modèle système une hauteur un peu plus grande sur laquelle la fusion est toujours en cours.

Le fait que le modèle prédise un front de fusion plus uniforme qu'il ne l'est réellement à partir de $t = 9600\text{s}$ pourrait être lié au transport de chaleur vertical au sein du module par l'écoulement de MCP liquide. Ces transferts verticaux ne sont pas pris en compte par le modèle système, la convection naturelle du MCP liquide étant représentée uniquement au niveau des transferts à la paroi du tube. Pendant un certain temps à partir du début de la fusion, il y a peu de transferts verticaux par l'écoulement, d'une part car les boucles de convection sont de plus petite taille (le MCP liquide occupant un volume relativement réduit), et d'autre part car elles sont confinées dans l'espace situé entre les ailettes.

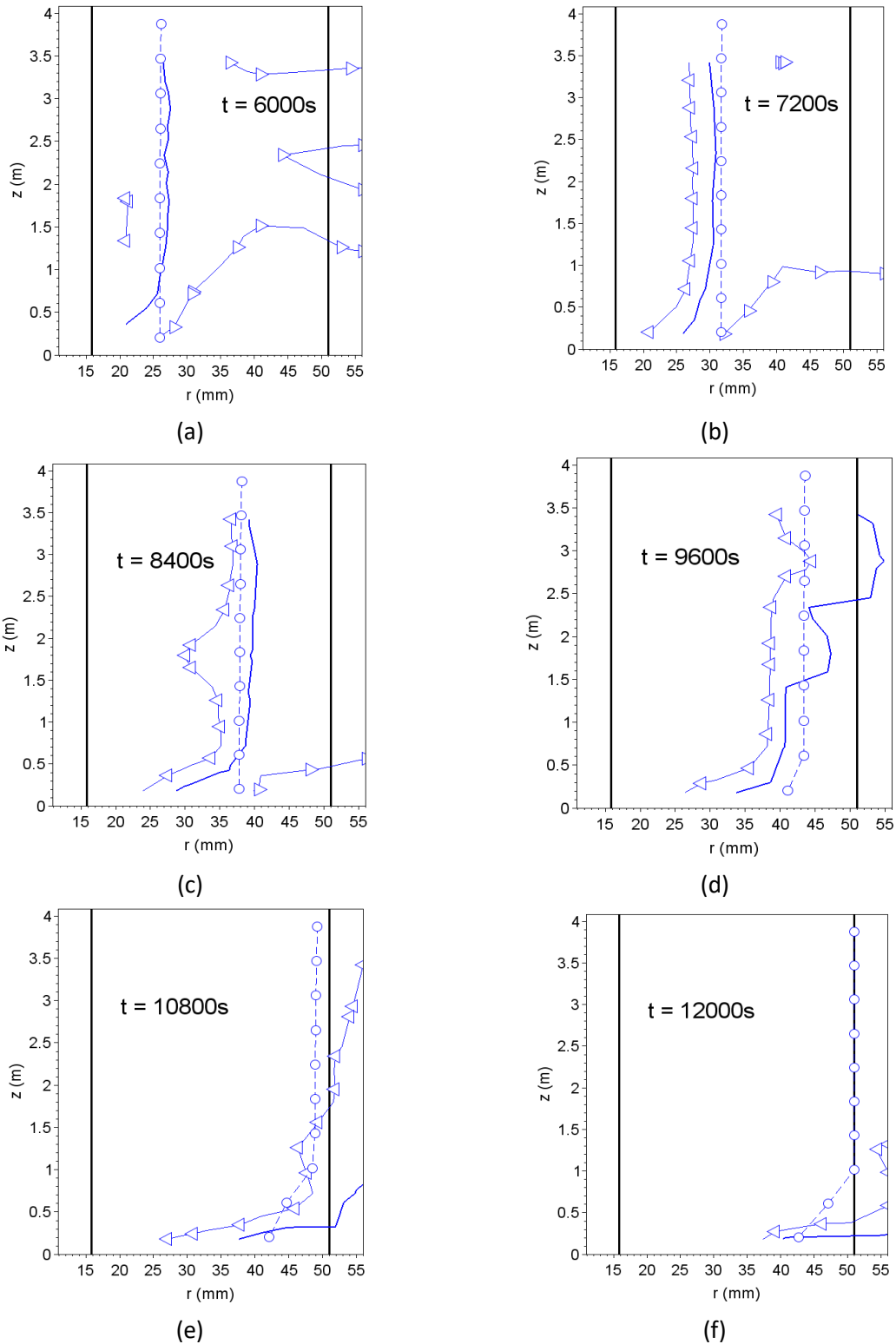


Figure 88 : Position moyenne du front de fusion pour le modèle système et l'expérience, à différents instants de calcul au cours de la charge à pression glissante

Les segments verticaux noirs représentent respectivement la paroi externe du tube (à gauche), et la frontière externe du domaine de calcul du modèle système (à droite)

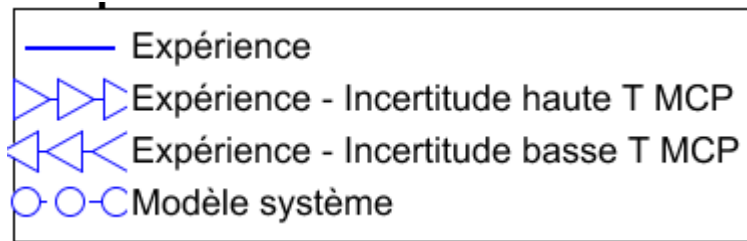
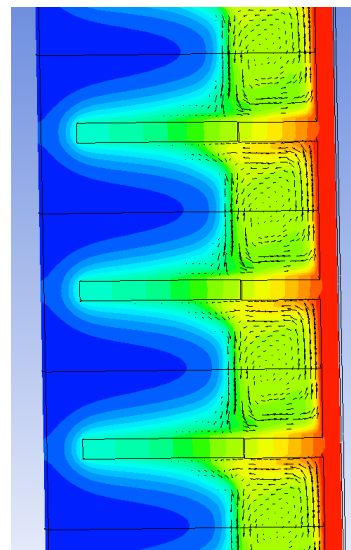
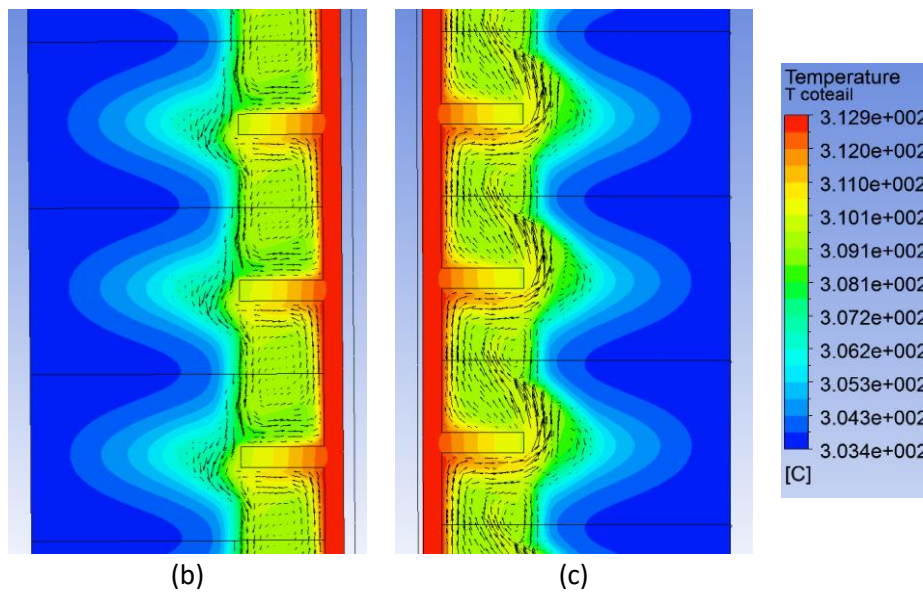


Figure 89 : Légende des courbes de front de fusion de la Figure 88

Afin d'évaluer l'importance des transferts de chaleur verticaux au cours du temps, les champs de température et de vitesse dans le modèle CFD sont montrés Figure 90 à l'instant $t = 7600s$, avant que les différences entre simulation système et expérience n'apparaissent pour le front de fusion. Les boucles de convection se développent entre les ailettes (a), et dans l'espace situé entre deux spires successives du ruban auquel sont soudées les ailettes (b), (c). De ce fait, il n'y a quasiment pas d'écoulement vertical qui parcourt la hauteur du tube. Seul un écoulement descendant dont la vitesse est assez faible ($2,6 \text{ mm.s}^{-1}$ maximum) est constaté sur la gauche des ailettes (b) ; il est compensé par un écoulement ascendant d'une vitesse similaire ($3,9 \text{ mm.s}^{-1}$ maximum) sur la droite de l'ailette (c). La température du tube étant uniforme, la fusion s'effectue ainsi de manière uniforme sur la hauteur. Le modèle système ne prenant pas en compte les transferts de chaleur par les mouvements verticaux, sa prédiction de la position du front de fusion reste conforme à l'expérience tant qu'une situation avec mouvements verticaux négligeables, comme celle illustrée Figure 90, reste en vigueur.



(a)



(b)

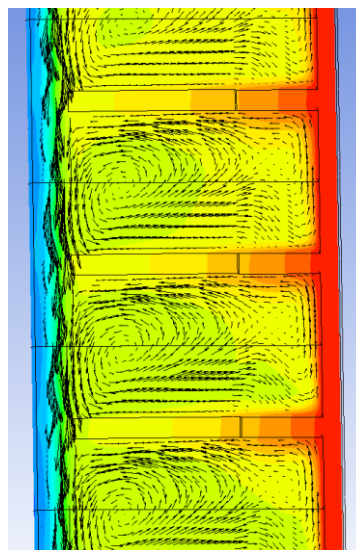
(c)

Figure 90 : Champs de vitesse et de température dans le MCP à $t = 7600s$

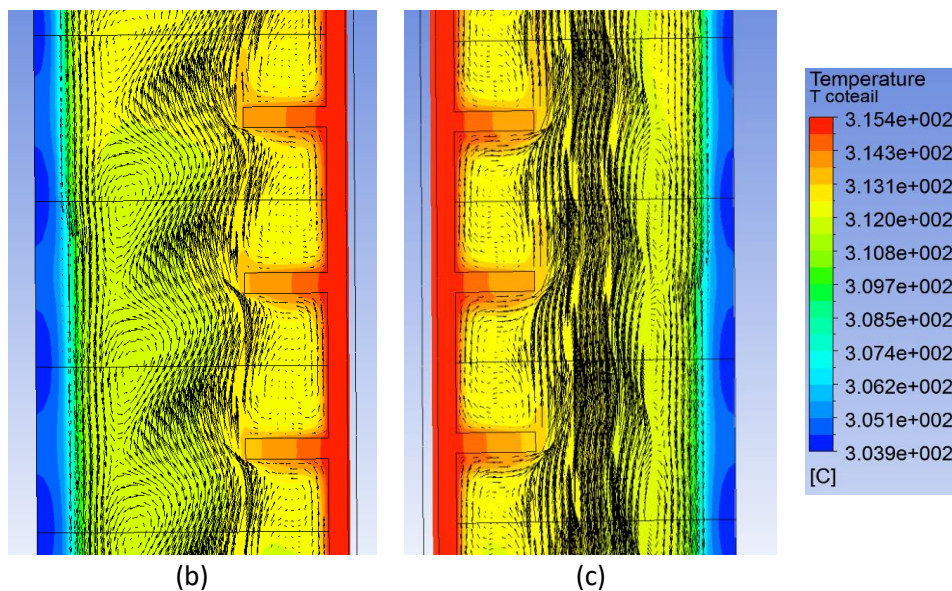
(a) : Plan vertical coupant les ailettes en leur centre ; (b) et (c) : Plans verticaux situés entre deux ailettes (frontières latérales du domaine de calcul CFD)

En comparaison, les champs de température et de vitesse à l'instant $t = 11270s$, après que le front de fusion soit devenu non uniforme expérimentalement, sont montrés Figure 91, dans les mêmes plans verticaux que pour la Figure 90. A cet instant, le front de fusion a dépassé l'extrémité des ailettes ; en conséquence, comme on peut le voir, l'écoulement du liquide peut parcourir la hauteur du tube. Sur les côtés de l'ailette (b), (c), un flux de liquide ascendant circule près de l'extrémité du ruban, tandis qu'un flux descendant à plus basse température circule près du front de fusion : il y a donc un transport de chaleur net du bas vers le haut du module. Dans le plan entre les ailettes (a), l'unique flux de liquide qui parcourt la hauteur du tube est descendant. Ce flux est à plus basse température que le liquide contenu entre les ailettes, du fait de sa proximité avec le front de fusion : le fluide le plus froid est ainsi transporté vers le bas. Au global, les mouvements de liquide sur la hauteur du tube tendent donc à

transporter le liquide chaud vers le haut du tube, et le liquide froid vers le bas. Une stratification de la température du MCP liquide du bas vers le haut se met donc en place ; il semble ainsi logique que la fusion soit plus rapide dans le haut que dans le bas, la température y étant plus élevée. Par ailleurs, à l'instant illustré Figure 91, on constate dans le modèle CFD que le MCP est entièrement fondu sur une partie de la hauteur du tube, et en cours de fusion sur une autre partie (celle représentée sur la Figure 91), de la même manière que dans l'expérience. Cela confirme que les mouvements verticaux, négligés dans le modèle système mais représentés par le modèle CFD, sont à l'origine de la non-uniformité de la fusion sur la hauteur.



(a)



(b)

(c)

Figure 91 : Champs de vitesse et de température dans le MCP à $t = 11270s$, dans une zone du tube où la fusion est en cours
(a) : Plan vertical coupant les ailettes en leur centre ; (b) et (c) : Plans verticaux situés entre deux ailettes (frontières latérales du domaine de calcul CFD)

L'analyse du front de fusion met ainsi en évidence une limitation du modèle système : le fait de négliger les transferts de chaleur verticaux par les mouvements de convection naturelle du MCP liquide empêche le modèle de reproduire la stratification de la température et de la fraction fondue le long du tube. Cette stratification se met en place lorsque la fusion est à un avancement suffisant pour que l'épaisseur de la couche de MCP liquide permette à une circulation significative sur toute la hauteur du module. Le modèle système prédit tout de même une fusion plus lente dans le bas du tube à partir de $t = 9600s$ (cf. Figure 88-(d), -(e) et -(f)), mais cet effet est dû au transfert thermique du côté du fluide caloporteur. En effet, vers la fin de la fusion, la vapeur injectée en haut du tube se condense complètement avant d'en sortir. Dans le bas du tube, il y a ainsi une hauteur sur laquelle le fluide caloporteur est à l'état d'eau liquide pure : le coefficient d'échange intérieur tube est alors beaucoup plus faible qu'en condensation. Au vu de l'impact de la convection naturelle du MCP liquide sur la stratification thermique, ce seul effet du côté du fluide caloporteur n'est pas suffisant pour reproduire la forme du front observée expérimentalement.

Malgré cette limitation, le modèle système reproduit malgré tout correctement l'énergie accumulée de manière globale dans le module, comme vu dans la section précédente (V.1.2). Cette prédiction devrait être suffisante si l'on souhaite utiliser le modèle système pour dimensionner le module, ou pour évaluer ses performances dans le cadre d'un modèle d'un procédé dans lequel le module serait intégré. Il convient tout de même de faire remarquer que, sur la géométrie du module prototype, les boucles de convection restent confinées entre les ailettes pendant une bonne partie de la fusion, ce qui limite les transferts verticaux. Selon la géométrie des ailettes et des inserts, les mouvements verticaux pourraient être plus importants, et débuter plus tôt pendant la fusion ; sur une géométrie qui favorise plus les mouvements liquides sur toute la hauteur du tube, le fait de les négliger pourrait dégrader plus significativement les performances globales du modèle.

V.2. Charge en pression fixe

Le second cas de charge auquel le modèle système a été comparé est celui d'une charge en pression fixe. Comme son nom l'indique, la pression de l'eau liquide / la vapeur est maintenue à une valeur fixe de 105,1 bar au cours de cet essai. Les tubes sont initialement remplis d'eau liquide sous-refroidie, à une température de 286°C en moyenne (la température de saturation est de 314,6°C à cette pression). De la vapeur proche de la saturation (une surchauffe de 0,5°C est considérée pour le modèle) est injectée en haut des tubes pendant tout l'essai. A mesure que la charge progresse, la résistance thermique augmente du côté du MCP. Contrairement à l'essai précédent, la température du fluide caloporteur n'augmente pas pour compenser cet effet : la puissance thermique échangée localement le long du tube diminue au cours du temps. En conséquence, le niveau d'eau dans les tubes se déplace du haut vers le bas dans les tubes au cours de la charge : à mesure que la puissance échangée par unité de surface décroît, la longueur de tube nécessaire pour condenser entièrement la vapeur augmente.

Les températures mesurées le long du tube dans la vapeur au cours du temps sont représentées sur la Figure 92 (la hauteur étant pour rappel croissante du niveau 1 vers le niveau 7). On voit bien sur ce graphe le déplacement vers le bas du niveau liquide. Au début de l'essai, seul le thermocouple du niveau 7, dans le haut du tube, se trouve dans la zone où le fluide caloporteur est diphasique, dans laquelle la température est égale à la température de saturation (315°C) ; puis cette zone occupe une plus grande hauteur à mesure que la charge progresse. Dans la colonne d'eau liquide située en-dessous, la température diminue assez rapidement le long du tube, pour atteindre la température initiale de 285°C. Ainsi, contrairement à l'essai en pression glissante, la température de la paroi des tubes n'est ni constante au cours du temps, ni uniforme.

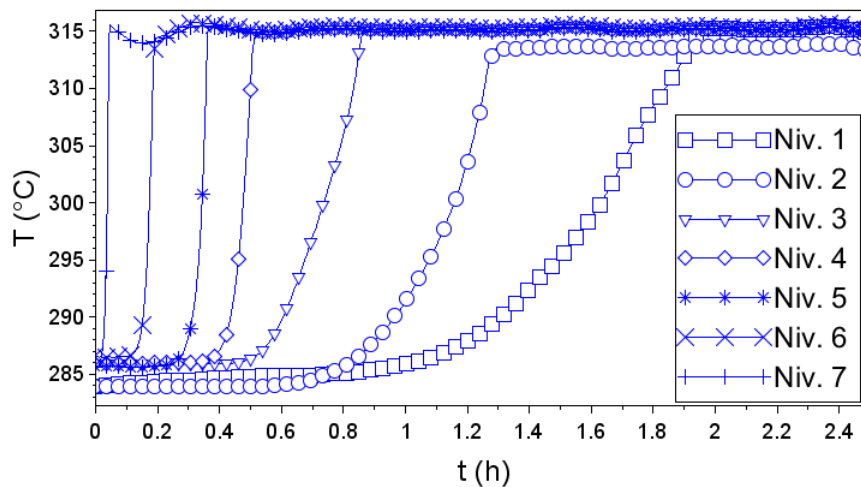


Figure 92 : Température du fluide caloporteur à plusieurs abscisses le long du tube au début de l'essai en pression fixe

Les discrétisations temporelle et spatiale sont inchangées par rapport à l'essai en pression glissante. Conformément aux mesures expérimentales, la pression et la température d'injection du fluide caloporteur sont constantes au cours de l'essai. Le débit d'injection est initialement de $0,010 \text{ kg.s}^{-1}$; il croît pendant les 30 premières minutes de l'essai, avant de se stabiliser à $0,020 \text{ kg.s}^{-1}$. L'évolution temporelle du débit et les paramètres du modèle système pour la simulation de ce second cas de charge sont détaillés en annexe 4 (p. 213).

V.2.1. Validité de la corrélation $Nu = f(Ra)$

De la même manière que pour l'essai en pression glissante, la validité de la corrélation établie sur le flux de chaleur à la paroi du tube (95) est vérifiée pour l'essai en pression fixe, à l'aide un calcul CFD. Le modèle CFD représentant une fraction seulement de la hauteur du tube, seule la fusion sur une hauteur de tube réduite peut être simulée ; contrairement à l'essai en pression glissante, il n'est pas possible d'appliquer directement comme condition aux limites la température de vapeur mesurée sur l'ensemble du tube, car celle-ci n'est pas uniforme ni constante. Il a été choisi de simuler la fusion du MCP situé entre les niveaux 2 et 3 de la section d'essais, soit entre les abscisses $z = 720 \text{ mm}$ et $z = 1260 \text{ mm}$ le long du tube (cf. Figure 62). Ce tronçon du tube est choisi car un thermocouple mesure la température de la paroi du tube central au milieu des niveaux 2 et 3 (à l'abscisse $z = 990 \text{ mm}$) ; cette mesure permet de détecter le moment où le niveau liquide atteint le centre du tronçon.

Le calcul CFD commence à l'instant correspondant à $t = 0,52 \text{ h}$ dans le modèle système ; à cet instant, la montée en température du MCP solide entre les niveaux 2 et 3 n'a pas encore commencée. La température du MCP à cet instant est uniforme (écart-type de $0,5^\circ\text{C}$ sur les différentes mesures), égale à $284,5^\circ\text{C}$; cette température est adoptée comme condition initiale pour le modèle CFD. La condition aux limites appliquée à la paroi interne du tube est déterminée à l'aide des mesures de température de l'eau aux niveaux 2 et 3, et de la température de la paroi au centre du tronçon. Partant de leur valeur à l'instant initial, ces trois températures croissent au cours du temps jusqu'à atteindre la température de saturation (315°C), à laquelle elles se stabilisent alors ; le moment où cette stabilisation se produit correspond au passage du niveau liquide au niveau du thermocouple. Il est ainsi possible d'estimer le moment où le niveau liquide entre dans le domaine de calcul par le haut (passage du niveau 3), arrive au milieu du domaine (passage du thermocouple de paroi entre les niveaux 2 et 3), et en sort par le bas (passage du niveau 2).

La condition aux limites à la paroi est ici une condition d'échange convectif ; dans chaque cellule de maillage adjacente à la paroi interne, le flux surfacique φ_p à la paroi a la forme suivante :

$$\varphi_p = \alpha_{calo}(T_{calo} - T_{cellule}) \quad (117)$$

La température du fluide caloporteur T_{calo} et le coefficient d'échange intérieur tube α_{calo} sont à spécifier. La procédure permettant de déterminer T_{calo} et α_{calo} à chaque instant et à chaque abscisse le long du tube est détaillée en annexe 5 (p. 215).

Le calcul CFD est mené jusqu'au moment où la fusion du MCP est terminée dans l'ensemble du domaine de calcul. De manière similaire à ce qui est fait en section IV.4.1, un nombre de Nusselt et un nombre de Rayleigh sont calculés pour chacun des 27 sous-domaines représentatifs du domaine de calcul, à plusieurs instants de calcul (équations (57), (58), (86), (90), (91)). Le nuage de points obtenu pour les deux nombres adimensionnels est tracé Figure 93.

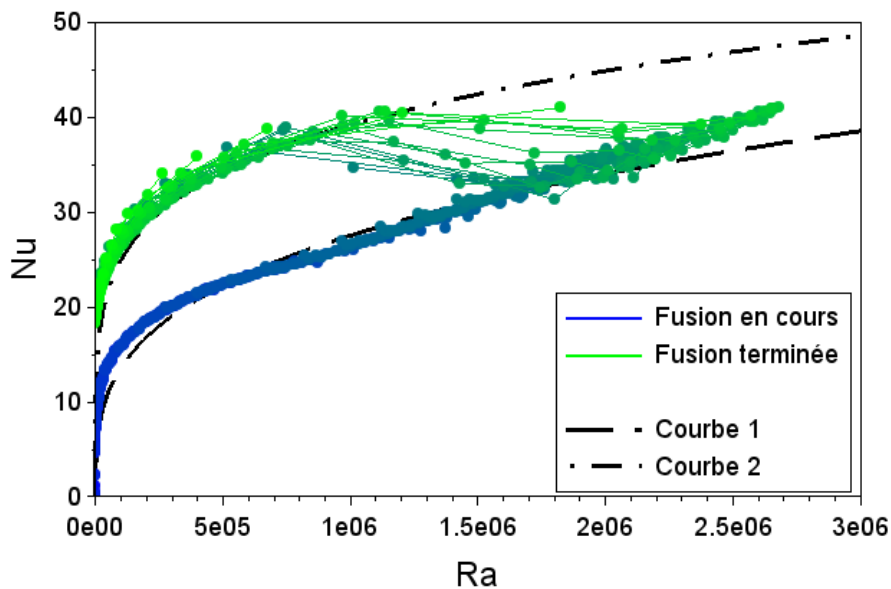


Figure 93 : Nuage de points (Ra, Nu) pour le calcul CFD effectué pour la charge en pression fixe, entre les niveaux 2 et 3

Les points obtenus se rassemblent autour des courbes des deux corrélations mises en évidence entre les nombres de Rayleigh et de Nusselt (équation (95), p. 145), de la même manière que pour les autres calculs CFD précédemment présentés. C'est autour de la première courbe que les points se rassemblent tant que la fusion est en cours, puis autour de la seconde lorsque la fusion est terminée localement. Certains points se trouvent entre les deux courbes, dans les cas où la fusion est terminée dans une partie des sous-volumes représentatifs, et en cours dans une autre. Les deux corrélations semblent modéliser le flux de chaleur tout aussi bien que pour l'essai en pression glissante, la dispersion des points autour des deux courbes étant faible.

Les deux corrélations sur le flux de chaleur (95) peuvent donc également être utilisées dans le modèle système pour simuler l'essai en pression fixe.

V.2.2. Energie accumulée

V.2.2.1. Résultats et hypothèses d'interprétation

De la même manière que pour l'essai en pression glissante, l'énergie accumulée dans le module de stockage au cours de l'essai est calculée pour l'expérience et pour le calcul système, afin de comparer les prédictions du modèle à l'expérience. Le calcul de l'énergie accumulée expérimentalement est effectué à l'aide du bilan d'énergie du fluide caloporteur aux bornes du module. Afin de se rapprocher autant que possible de l'énergie accumulée par le MCP, les tubes et les ailettes uniquement, l'énergie thermique accumulée par la paroi de la calandre, et les collecteurs et les plaques métalliques situées aux extrémités haute et basse de la section d'essais sont directement déduites du résultat, de même que les pertes thermiques. Les détails du calcul de l'énergie accumulée par les parties métalliques et des pertes thermiques sont présentés en section V.1.2 ci-dessus (p. 155). Pour le modèle système, l'énergie calculée est multipliée par le nombre de tubes (19), afin de se ramener à la masse de métal (tube + ailettes) et de MCP actif présente dans l'ensemble de la section d'essais. Les résultats sont tracés Figure 94.

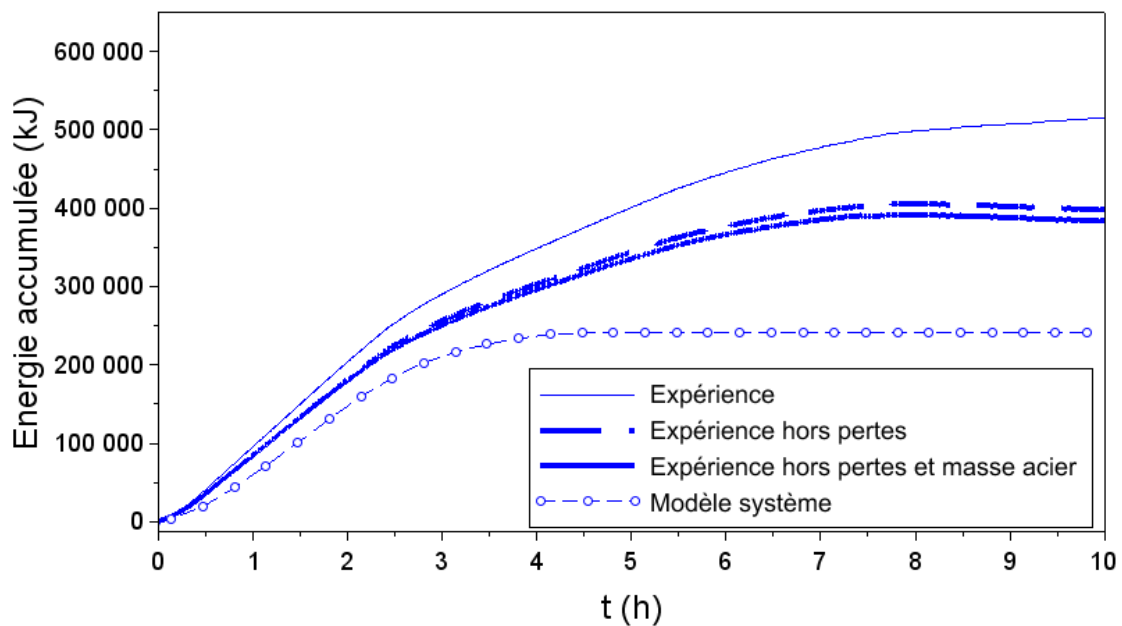


Figure 94 : Energie accumulée dans le MCP, les tubes et les ailettes au cours de l'essai en pression fixe

Comme précédemment, l'estimation de l'énergie expérimentale à l'aide du bilan d'enthalpie du fluide caloporteur donne un résultat nettement plus élevé que celui du modèle système. Le fait de déduire l'énergie liée aux pertes thermiques et celle accumulée par la calandre, les collecteurs et les plaques rapproche le résultat expérimental de celui du modèle. Il subsiste après cette déduction un écart entre le modèle et l'expérience ; l'énergie accumulée prédite par le modèle croît moins vite que celle estimée à l'aide des données expérimentales. A partir de $t = 4$ h environ, l'énergie se stabilise dans le modèle système, tandis qu'elle continue à croître expérimentalement. Cet effet avait été attribué à la fusion du MCP passif pour le précédent cas de charge. Pour ce second cas, en supposant que le MCP passif se stabilise à la fin de l'essai à la même température que le MCP actif (315°C), l'énergie qu'il a accumulée peut être estimée à $E_{pass,fin} = 152\,600$ kJ. La différence d'énergie accumulée entre l'expérience et le modèle à la fin de l'essai est de 142 900 kJ. L'écart entre ces deux valeurs est de 7% ; cet écart

raisonnable montre que l'énergie relâchée par le fluide caloporteur après la fin de la fusion du MCP actif va bien ici aussi dans sa plus grande partie au MCP passif, dont la fusion commence une fois celle du MCP actif terminée.

Avant la fin de la fusion du MCP actif ($t < 4h$), l'écart entre le modèle et l'expérience croît au cours du temps : il prend des valeurs allant de 10 000 à 60 000 kJ, en atteignant cette dernière valeur vers $t = 4h$. L'écart relatif est de 15 à 40% selon l'instant temporel considéré. La prédiction du modèle système s'avère donc être en moins bon accord avec l'expérience que pour la charge en pression glissante ; pour ce premier cas de charge, l'écart avec l'expérience était de 20 000 à 30 000 kJ, ce qui correspondait à un écart relatif de 17% au maximum.

Cet écart plus important que l'on constate pour la charge en pression fixe ne peut pas être imputé à l'énergie thermique accumulée par des pièces solides autres que la paroi de la calandre, les collecteurs et les plaques (c'est-à-dire des pièces dont la température n'est pas mesurée), car cet écart devrait alors se retrouver également dans l'essai à pression glissante. La différence de température entre le début et la fin de l'essai est plus importante pour l'essai en pression glissante : pour des températures finales éloignées de 3°C, le MCP est initialement à 264°C environ pour l'essai en pression glissante, contre 285°C pour l'essai en pression fixe. Ainsi, si l'énergie thermique des pièces solides était une source majeure de l'écart entre simulation et expérience, l'écart devrait être plus important pour l'essai en pression glissante, ou du moins comparable à celui constaté pour l'essai en pression fixe ; or, c'est l'inverse qui est observé. Il semble également peu probable d'envisager que les pertes thermiques soient plus importantes ou moins bien estimées pour ce second essai. Pour cet essai, la température est plus élevée dans le haut de la section d'essais que dans le bas ; les pertes au niveau du collecteur et de la plaque du haut du module sont ainsi plus élevées que celles au niveau des pièces homologues dans le bas du module. Cependant, les pertes sont estimées à l'aide de la température moyenne de la calandre sur la hauteur : la différence de température entre le haut et le bas du module est ainsi être prise en compte dans le calcul des pertes.

Ces sources d'erreurs étant exclues, une possibilité pour expliquer cet écart plus important serait une erreur du modèle : le modèle système pourrait moins bien estimer le flux de chaleur entre l'eau liquide / la vapeur et le MCP pour l'essai en pression fixe que pour l'essai en pression glissante. La seule différence fondamentale entre les deux essais provient de la température de la paroi du tube, qui est uniforme dans l'essai en pression glissante, et qui ne l'est pas pour le second essai. En conséquence, pour l'essai en pression glissante, la fusion du MCP est quasiment uniforme sur la hauteur. Dans le calcul CFD mené sur cet essai, l'avancement de la fusion est identique ou quasi identique au cours de la charge pour les différents sous-volumes représentatifs de MCP centrés autour des ailettes. Des différences commencent à apparaître entre les sous-volumes à partir du moment où les mouvements de convection naturelle du liquide deviennent importants, et créent une stratification thermique le long du tube (effet exposé en détail en section V.1.3 ci-dessus).

Pour l'essai en pression fixe, des différences entre les sous-volumes du calcul CFD apparaissent plus tôt au cours de la charge. Cela est dû au fait que, du côté de fluide caloporteur, le niveau liquide traverse la hauteur de tube simulée entre les instants $t_{v3} = 1260s$ et $t_{v2} = 2700s$. Pendant ce laps de temps, une partie de la hauteur du tube se trouve donc à la température de saturation ($T_{sat} = 315°C$), et avec un

coefficient d'échange intérieur tube élevé, caractéristique d'un écoulement diphasique. Le reste de la hauteur du tube est occupé par de l'eau liquide sous-refroidie : le tube y est donc à une température moins élevée, et le coefficient d'échange intérieur tube est plus faible également (écoulement monophasique). Les sous-volumes situés plus haut le long du tube se retrouvent donc plus tôt en contact avec une paroi chaude et opposant peu de résistance au transfert de chaleur : la fusion est donc en avance dans le haut du domaine de calcul.

Afin d'illustrer cette différence entre les deux essais, l'évolution de la température du MCP liquide est tracée Figure 95 pour les calculs CFD menés pour les deux essais, à plusieurs instants de calcul. Ce tracé se fonde sur la température moyenne du MCP liquide dans les sous-volumes représentatifs, calculée à l'aide de l'équation (86) (p. 134) pour les 27 sous-volumes aux instants considérés. Le tracé est effectué en prenant comme abscisse z pour chaque sous-volume l'abscisse moyenne de l'ensemble de ses mailles. Pour l'essai en pression glissante, le tracé de la position du front de fusion (Figure 88, p. 163) a permis de mettre en évidence le fait qu'une stratification thermique se mettait en place entre $t = 8400s$ et $t = 9600s$. Sur la Figure 95-(a), pour $t \leq 9000s$, le profil de température du liquide est remarquablement plat. Les sous-volumes situés aux extrémités haute et basse du domaine de calcul CFD (extrémités des courbes) ne sont pas à la même température que le reste des sous-volumes, mais cela est dû au fait qu'ils sont soumis à des conditions aux limites différentes : une condition de non-glissement y étant appliquée, l'écoulement de convection naturelle est stoppé aux niveaux des extrémités du domaine. Sur les autres sous-volumes, la température est quasi identique, ce qui indique la faiblesse des transferts de chaleur verticaux liés à la convection naturelle ; celle-ci ne devient importante qu'après $t = 9000s$, le profil de température n'étant plus uniforme à partir de $t = 10500s$.

Pour l'essai en pression fixe (Figure 95-(b)), le profil de température est quasiment plat pendant un certain temps au début de la fusion ($t = 4000s$), puis sa pente augmente à partir d'un certain instant ($t = 5800s$). Le profil obtenu à un instant donné a une forme légèrement différente de ceux observés pour l'essai en pression glissante. Comme on peut le voir à $t = 5800s$ et $t = 6800s$, la pente de la courbe croît progressivement avec l'abscisse z , jusqu'à un point où elle connaît une augmentation plus soudaine. La quasi-totalité du MCP situé plus haut que ce point est liquide : l'énergie absorbée du fluide caloporteur sert donc non pas à fondre le MCP (énergie latente) mais à augmenter la température du MCP fondu (énergie sensible). En comparaison, pour l'essai en pression glissante, le profil obtenu à $t = 10500s$ (Figure 95-(a)) a une pente très stable sur la quasi-totalité de la longueur du tube qui précède le point où la pente augmente soudainement. Aux instants suivants, les profils de température sont comparables pour les deux essais.

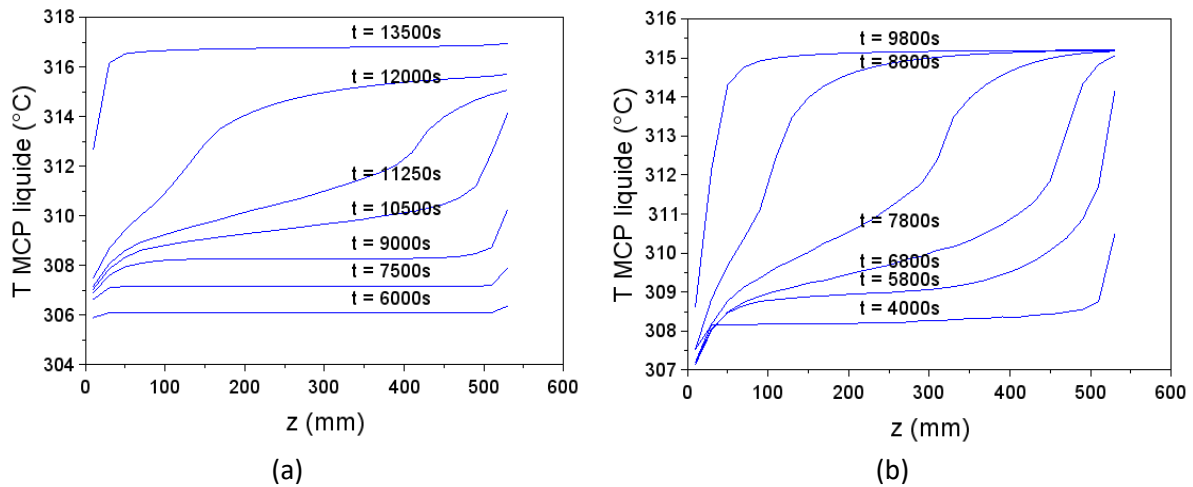


Figure 95 : Evolution le long du tube de la température moyenne du MCP liquide dans les sous-volumes représentatifs des calculs CFD
(a) : Pression glissante – (b) : Pression fixe

Cette différence constatée entre les pentes des profils de température montre une stratification thermique plus importante dans l'essai en pression fixe. Cette différence entre les deux essais peut également être observée expérimentalement. Pour l'essai en pression glissante, la Figure 86 (p. 159) montre qu'à un instant donné, les mesures de température effectuées dans le MCP à différentes altitudes pour une distance au tube donnée sont très proches les unes des autres. Ce n'est plus le cas pour l'essai en pression fixe, comme on peut le voir sur la Figure 96 : le MCP quitte le plateau de température du changement de phase d'autant plus tôt qu'il est situé haut le long du tube.

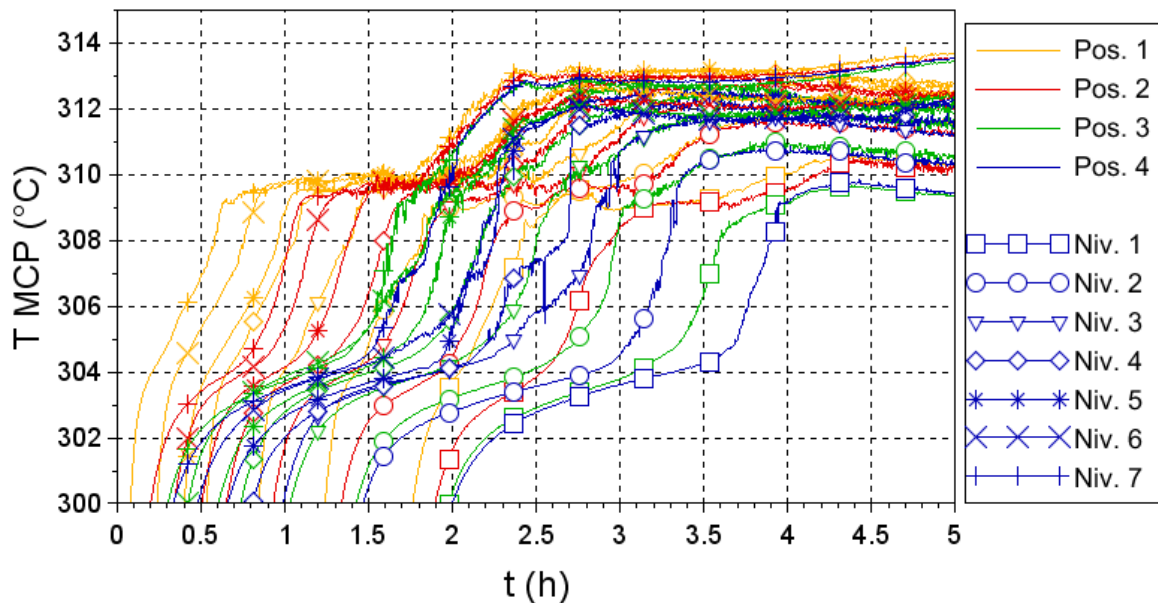


Figure 96 : Mesures de température dans le MCP actif autour du tube central et de la couronne intermédiaire, au cours de la charge en pression fixe

Intuitivement, la stratification du MCP liquide pour l'essai en pression fixe s'explique du fait que la distribution de la chaleur soit non uniforme sur la hauteur dans le MCP et les ailettes. La différence de température entre deux sous-volumes voisins est ainsi plus importante que dans l'essai à pression

glissante. Lorsque la convection naturelle dans le liquide se développe suffisamment pour permettre un transport de chaleur important sur la hauteur, cet écart va logiquement se creuser : la stratification thermique qui se met en place est plus importante. Au bout d'un certain temps, la fusion sera donc plus fortement avancée dans le haut du tube que dans le bas.

Or, comme montré dans l'analyse des résultats pour l'essai en pression glissante, le modèle système prédit une fusion plus lente qu'expérimentalement lorsque la fusion est quasiment terminée localement (cf. les instants $t \geq 9600s$ sur la Figure 88). Il est donc envisageable que la source des écarts plus importants d'énergie globale accumulée pour l'essai en pression fixe soit due à la présence sur un temps plus important de MCP dont la fusion est presque terminée. Pour l'essai en pression glissante, comme la fusion est uniforme sur la hauteur entre les différents sous-domaines de MCP autour des ailettes, le taux de fusion global doit être suffisamment élevé pour que la convection naturelle devienne importante, et donc que les prédictions de flux de chaleur du modèle se retrouvent sous-estimées par rapport à la réalité. Pour l'essai en pression fixe, une zone où le MCP est suffisamment fondu pour permettre à la convection naturelle de devenir importante apparaît plus tôt dans l'essai ; cette zone est présente dès $t = 5800s$, au vu de la Figure 95-(b). Comme le modèle système sous-estime le flux de chaleur dans cette zone, le fait qu'elle soit présente plus longtemps pourrait rendre plus importante l'erreur commise sur l'énergie transmise globalement au MCP et aux ailettes à la fin de l'essai, car l'erreur sur le flux est intégrée sur un temps plus long.

Une seconde piste d'interprétation des écarts d'énergie pour l'essai en pression fixe serait une influence des mouvements de convection naturelle du MCP liquide sur les transferts de chaleur qui soit différente de celle de l'essai en pression glissante. En effet, pour l'essai en pression fixe, le fait que la fusion soit plus avancée dans le haut des tubes fait qu'un écoulement de liquide plus important que dans le bas des tubes peut s'y développer, l'épaisseur de MCP liquide étant plus importante. Dans l'essai en pression glissante, cette épaisseur de liquide est en revanche uniforme en moyenne le long des tubes. Il est donc possible que la structure de l'écoulement de convection naturelle du liquide, et par voie de conséquence son influence sur les transferts de chaleur, ne soient pas les mêmes pour les deux essais.

Cette différence entre les deux essais peut avoir deux impacts distincts sur les transferts de chaleur. D'une part, elle peut influencer les transferts de chaleur au sein du MCP liquide dans la direction verticale, liés à l'écoulement. Comme montré en section V.1.3 (p. 161), ces transferts de chaleur verticaux sont négligeables pour l'essai en pression glissante pendant une bonne partie de la fusion. Pour l'essai en pression fixe, ces transferts verticaux pourraient être intensifiés par un écoulement de liquide différent et par la stratification de la température dans le liquide qui est présente dans cet essai uniquement. Le modèle système ne tient pas compte des transferts de chaleur verticaux au sein du MCP. Si ces transferts ne sont plus négligeables pour l'essai en pression fixe, les résultats du modèle système pourraient donc être dégradés pour cet essai.

D'autre part, l'écoulement par convection naturelle influence également les transferts de chaleur entre les parois du tube et des ailettes et le MCP. Ces transferts sont pris en compte à l'aide de la corrélation adimensionnelle déduite de l'étude CFD (95). Cette relation a été obtenue à l'aide de calculs CFD pour lesquels la température de la paroi du tube et le coefficient d'échange intérieur tube étaient pris constants et uniformes, ce qui amène à une fusion du MCP uniforme sur la hauteur ; pour ces calculs, l'écoulement par convection naturelle lors de la fusion doit donc être comparable à celui d'un essai en

pression glissante. Si l'écoulement n'a pas la même structure pour l'essai en pression fixe, les transferts convectifs aux parois se verront modifiés. De tels effets, qui n'apparaîtraient que dans le cas d'une fusion non uniforme sur la hauteur des tubes, pourraient ne pas être représentés précisément par la relation (95).

Sur la Figure 93, les deux corrélations entre les nombres de Rayleigh et de Nusselt semblent plutôt bien ajuster le nuage de points obtenu à partir du calcul CFD pour l'essai en pression fixe, ce qui indiquerait que la relation (95) ne perdrait globalement pas en précision pour cet essai. Cependant, selon l'essai (cf. Figure 84, p. 154 pour le nuage de points pour l'essai en pression glissante), les points ne semblent pas répartis de la même manière autour des courbes correspondant aux deux corrélations. Dans l'intervalle $0 < Ra < 10^6$, peu de points sont présents pour l'essai en pression glissante au début de la fusion, alors que le nombre de points présents pour l'essai en pression fixe est beaucoup plus important ; ces points sont en bleu sur les deux figures. Sur la Figure 84, les points de ce groupe sont majoritairement en-dessous de la courbe de la première corrélation, alors qu'ils sont en revanche plutôt au-dessus de la courbe sur la Figure 93. De même, parmi les points qui se rassemblent autour de la courbe de la seconde corrélation (en vert, fusion terminée), un grand nombre se trouve au-dessus de la courbe sur la Figure 93, tandis que la répartition des points autour de cette courbe semble plus équilibrée sur la Figure 84. Ainsi, il est possible qu'il y ait une différence entre les deux essais dans la qualité de l'estimation du flux de chaleur par les deux corrélations. Comme les deux courbes semblent bien modéliser les deux nuages de points visuellement, cette différence est probablement faible dans l'absolu. Malgré cela, il est envisageable qu'elle puisse amener à une différence d'énergie totale accumulée non négligeable, une fois intégrée sur le temps de la charge.

Une troisième hypothèse envisageable pour expliquer les écarts serait que pour l'essai en pression fixe, la fusion du MCP passif commence tôt au cours de la charge. La fusion du MCP passif à une hauteur donnée dans la calandre commence lorsque le front de fusion atteint la périphérie des ailettes, c'est-à-dire lorsque la fusion du MCP actif est terminée. Comme la fusion est en avance dans le haut des tubes pour l'essai en pression fixe, le MCP actif du haut du tube termine sa fusion plus tôt, ce qui permet au front de fusion d'atteindre plus tôt le MCP passif du haut de la calandre. Le MCP passif n'est pas représenté dans le modèle système ; lorsque sa fusion commence dans le haut de la calandre, l'énergie nécessaire à son changement de phase pourrait donner lieu à un important transfert de chaleur vers le MCP passif, non représenté par le modèle.

En résumé, trois hypothèses sont donc envisagées pour expliquer les écarts d'énergie accumulée entre le modèle système et l'expérience :

- 1) La présence de MCP quasi fondu localement pendant plus longtemps que pour l'essai en pression glissante, amenant à une prédiction moins bonne des transferts de chaleur globaux, ceux-ci étant moins bien prédits localement lorsque la couche de MCP liquide est épaisse mais que la fusion n'est pas terminée.
- 2) Un écoulement de convection naturelle dans le liquide différent entre les deux essais, amenant à une moins bonne estimation des transferts de chaleur aux parois par la relation (95), et au développement de transferts de chaleur verticaux au sein du MCP, négligés par le modèle.
- 3) Un transfert de chaleur vers le MCP passif plus important pour l'essai en pression fixe.

Dans la suite de cette section, les résultats de calcul CFD pour les deux essais sont analysés plus en détail, dans l'objectif de vérifier si les différents effets discutés sont effectivement à l'œuvre ou non au cours de la charge en pression fixe. L'analyse qui suit s'intéresse uniquement aux effets liés aux deux premières hypothèses. En effet, l'absorption de chaleur par le MCP passif (troisième hypothèse) ne peut pas être vérifiée, car aucune mesure de température n'est effectuée dans le MCP passif dans le module prototype. Il ne semble donc pas possible d'estimer expérimentalement la quantité d'énergie qu'il accumule avant la fin de la fusion, ni de vérifier s'il commence bien à accumuler de la chaleur de manière importante plus tôt lors de l'essai en pression fixe.

Par ailleurs, dans l'analyse qui suit, on ne cherche pas à quantifier l'erreur induite par les différents effets sur l'énergie accumulée dans le module prédite par le modèle système. En effet, estimer cette erreur semble difficile, car les erreurs commises ponctuellement par le modèle se propagent au cours du temps : une erreur du modèle système sur les transferts de chaleur à un instant donné affecte l'évolution de la température et de l'épaisseur de la couche liquide à cet instant, ce qui affectera également le flux de chaleur à l'instant suivant. De ce fait, l'analyse se limite à identifier si la présence des différents effets peut être mise en évidence ou non à l'aide des résultats de calcul CFD ; leur impact sur les résultats du modèle n'est pas discuté.

V.2.2.2. Hypothèse 1 – Avancement local de la fusion

Pour vérifier la première hypothèse, il a été tenté dans un premier temps de repérer, pour les deux calculs CFD, la fraction liquide moyenne dans un sous-volume au-delà de laquelle la relation (95) perd en précision, comme constaté lors de l'analyse des résultats pour l'essai en pression glissante (cf. section V.1.3). Dans la suite, cette fraction liquide associée à un sous-volume est notée \bar{Y}_l . Si une telle valeur limite $(\bar{Y}_l)_0$ existe, le temps pendant lequel certains sous-volumes dans le domaine de calcul CFD ont leur fraction liquide moyenne supérieure à cette valeur, et le nombre de sous-volumes dans ce cas sur ce temps, peut donner une indication de l'erreur commise par le modèle du fait du temps de présence de MCP quasi fondu localement.

Il faut donc estimer l'erreur commise par la relation (95) en fonction de la fraction liquide moyenne \bar{Y}_l . Pour cela, pour les deux calculs CFD, un certain nombre d'instant de calcul espacés régulièrement entre le début et la fin de la fusion, et séparés de 2s environ les uns des autres, ont été choisis. Pour ces instants, deux nombres de Nusselt ont été calculés pour chacun des 27 sous-volumes : d'une part le nombre de Nusselt Nu_{CFD} prédit par le calcul CFD, calculé à partir des équations (57), (86), (90) et (91), et d'autre part celui prédit par la relation (95), noté Nu_{corr} . L'écart relatif entre ces deux nombres de Nusselt est calculé, puis les écarts obtenus pour l'ensemble des instants de calcul et pour les 27 sous-volumes sont tracés en fonction de la fraction liquide moyenne associée à chaque point. Les graphes obtenus sont tracés Figure 97 pour l'essai en pression glissante, et Figure 98 pour l'essai en pression fixe.

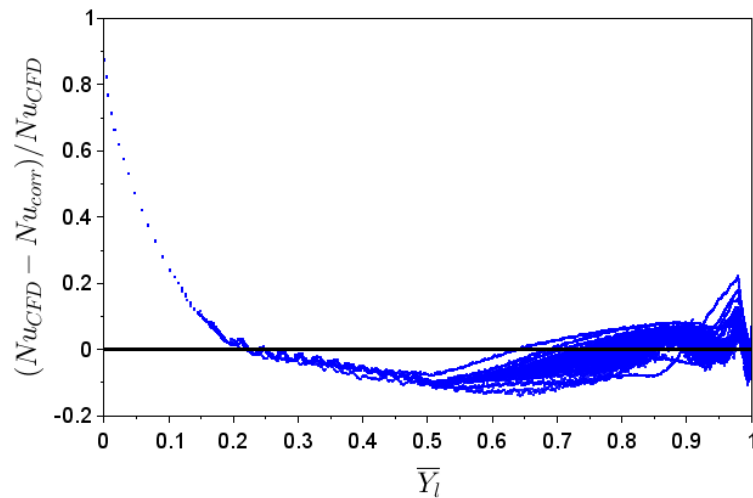


Figure 97 : Erreur relative sur le nombre de Nusselt prédit par la relation sur le flux de chaleur (95), en fonction de l'avancement local de la fusion, pour le calcul CFD de l'essai en pression glissante

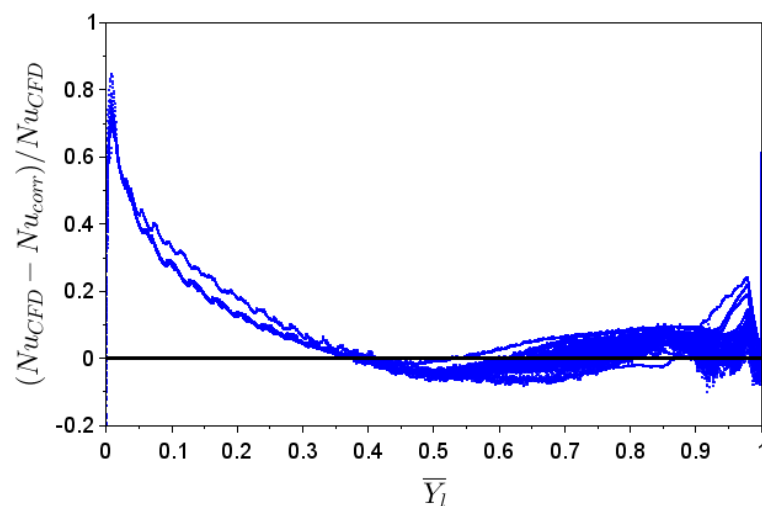


Figure 98 : Erreur relative sur le nombre de Nusselt prédit par la relation sur le flux de chaleur (95), en fonction de l'avancement local de la fusion, pour le calcul CFD de l'essai en pression fixe

Sur la Figure 97, pour $\bar{Y}_l > 0,8$ environ, les points du graphe sont de manière générale plus nombreux au-dessus de la droite $Nu_{CFD} - Nu_{corr} = 0$ qu'en-dessous. La même chose peut être observée sur la Figure 98 pour $\bar{Y}_l > 0,7$ environ. Cela signifie que lorsque la fraction fondue dans un sous-volume dépasse cette valeur limite (qui dépend visiblement de l'essai), les prédictions du nombre de Nusselt données par la relation (95) sont en moyennes inférieures aux valeurs du nombre de Nusselt calculées à partir des résultats CFD. De ce fait, la relation (95) prédit un flux de chaleur en moyenne plus faible que celui prédit par le modèle CFD lorsque la valeur limite de la fraction fondue est dépassée. Ce constat est cohérent avec le fait que le modèle système sous-estime la vitesse de la fusion lorsque celle-ci est avancée localement, comme constaté précédemment en section V.1.3 (p. 161). La Figure 97 et la Figure 98 permettent de mettre en évidence une valeur limite de \bar{Y}_l au-delà de laquelle cette perte de précision a lieu. Les valeurs limites identifiées pour les deux calculs sont notées dans la suite $(\bar{Y}_l)_{0,glis} = 0,8$ pour l'essai en pression glissante, et $(\bar{Y}_l)_{0,fixe} = 0,7$ pour l'essai en pression fixe.

Dans un second temps, le nombre de sous-volumes dans les deux calculs CFD pour lesquels la valeur limite de \bar{Y}_l est dépassée est compté au cours de la fusion ; l'évolution de ce nombre dans le temps est tracé Figure 99. L'extrémité en haut à droite des deux courbes correspond à la fin de la fusion ; malgré les temps de fusion différents pour les deux calculs, la même échelle est adoptée pour les deux graphes afin de permettre une comparaison visuelle des courbes. La Figure 99 permet de voir que, comme supposé, le temps pendant lequel une fraction du MCP a dépassé le taux de fusion limite est plus important pour l'essai en pression fixe. En effet, pour l'essai en pression glissante, à partir de l'instant où les premiers sous-volumes dépassent la valeur limite de \bar{Y}_l (la courbe quitte l'axe des abscisses), l'augmentation du nombre de sous-volumes concernés est brutale : il passe d'un nombre inférieur à 5 à un nombre proche du maximum de 27 sur un temps très court. Pour l'essai en pression fixe, l'augmentation est plus progressive. Cette différence de comportement est cohérente avec le caractère uniforme ou non uniforme de la fusion. Pour l'essai en pression glissante, comme la fusion s'effectue de manière plutôt uniforme sur la hauteur, l'avancement de la fusion est proche d'un sous-volume à un autre : ainsi, la majorité des sous-volumes voient leur fraction liquide moyenne atteindre la valeur limite de 0,8 au même moment. Ce n'est pas le cas pour l'essai en pression fixe, des différences s'installant entre les sous-volumes pendant le laps de temps où le niveau liquide dans le tube parcourt la hauteur du domaine de calcul, comme expliqué plus haut.

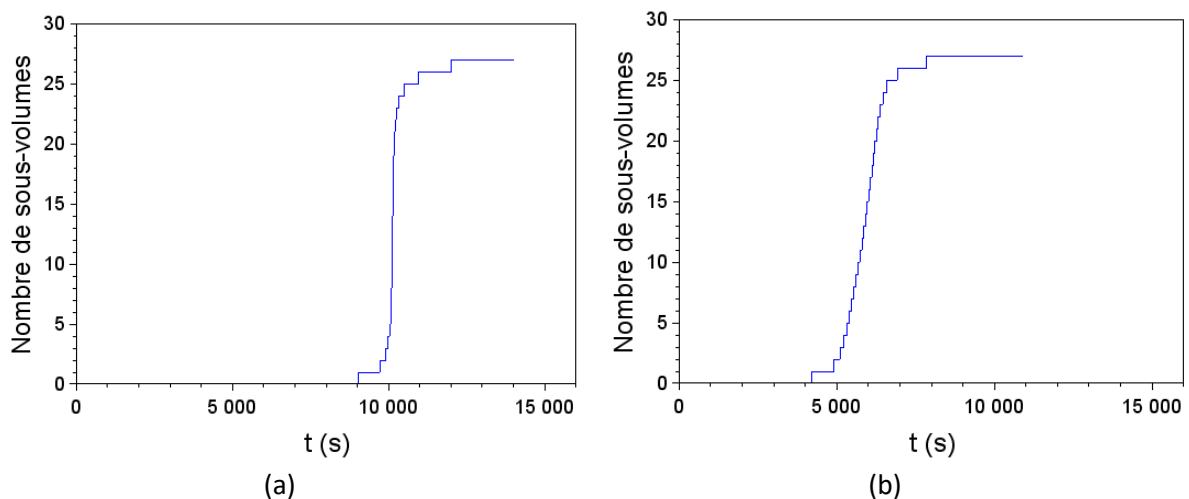


Figure 99 : Evolution du nombre de sous-volumes représentatifs dans lesquels la relation sur le flux de chaleur perd en précision

(a) : Calcul CFD pour l'essai en pression glissante

(b) : Calcul CFD pour l'essai en pression fixe

Le temps pendant lequel une partie des sous-volumes se trouve au-dessus de la valeur limite pour la fraction liquide moyenne peut être évalué en considérant l'instant où le nombre de sous-volumes compté sur la Figure 99 atteint 2, et l'instant où l'ensemble du MCP est fondu dans tous les sous-volumes, à l'exception de celui situé tout en bas du domaine. En effet, il est préférable d'ignorer pour l'analyse les sous-volumes situés aux extrémités du domaine : la fusion dans ces sous-volumes est différente de celle du reste du domaine, du fait des conditions aux limites différentes auxquels ils sont sujets. Pour l'essai en pression glissante, c'est à $t = 9700s$ que deux sous-volumes atteignent $(\bar{Y}_l)_{0,glis} = 0,8$, et c'est à $t = 13100s$ que la fusion est terminée de partout, sauf dans le bas. Pour l'essai en pression fixe, ces deux instants sont respectivement $t = 4900s$, et $t = 10100s$. Il y a donc des sous-volumes pour lesquels $\bar{Y}_l \geq (\bar{Y}_l)_0$ pendant 3400s pour l'essai en pression glissante, et pendant 5200s

pour l'essai en pression fixe. Ainsi, l'hypothèse 1 semble être confirmée : le calcul en pression fixe se trouve pendant plus longtemps dans des conditions où la relation (95) est moins précise que celui en pression glissante.

V.2.2.3. Hypothèse 2 – Effets des mouvements de convection naturelle du MCP liquide

Parmi les effets potentiels des changements éventuels dans l'écoulement par convection naturelle du MCP liquide, cités dans la section V.2.2.1, le premier d'entre eux est une perte de précision de la relation (95) sur le flux de chaleur aux parois. La Figure 97 et la Figure 98, qui représentent l'erreur commise par la relation (95) par rapport aux résultats CFD, permettent d'évaluer si cette relation est effectivement plus éloignée des résultats CFD pour l'essai en pression fixe que pour l'essai en pression glissante, comme supposé en section V.2.2.1. Pour l'essai en pression glissante, au vu de la Figure 97, l'erreur de la relation (95) par rapport à la CFD est en moyenne nulle, ou bien faiblement positive ou négative selon les valeurs de \bar{Y}_l , à l'exception des plus faibles valeurs de \bar{Y}_l pour lesquels l'erreur est importante et toujours positive (sous-estimation du flux de chaleur par (95)). Pour \bar{Y}_l plus élevé, l'erreur se situe entre -10% et 0% pour $0,2 < \bar{Y}_l < 0,65$, est nulle en moyenne sur la plage $0,65 < \bar{Y}_l < 0,85$ (valeurs entre -10% et +10%), puis est entre 0% et 20% pour $0,85 < \bar{Y}_l < 1$. Ainsi, l'erreur commise en moyenne pour $\bar{Y}_l > 0,2$ semble être proche de 0%.

Pour l'essai en pression fixe, le graphe de l'erreur en fonction de \bar{Y}_l a la même allure globale que pour l'essai en pression glissante (Figure 98). Cependant, l'erreur semble plus souvent positive que négative : en d'autres termes, la relation (95) sous-estime en moyenne le flux de chaleur par rapport au modèle CFD. La plage de faibles valeurs de \bar{Y}_l sur laquelle l'erreur est invariablement positive s'étend ici jusqu'à $\bar{Y}_l = 0,4$; c'est uniquement sur la plage $0,25 < \bar{Y}_l < 0,4$ que l'erreur est inférieure à 10%. L'erreur apparaît ensuite nulle en moyenne sur la plage $0,4 < \bar{Y}_l < 0,75$ environ, puis elle est ensuite globalement positive pour $0,75 < \bar{Y}_l < 1$ (valeurs entre 0% et 20% environ, comme pour le premier essai). Ce constat confirme le fait qu'au global, la relation (95) estime moins bien le flux de chaleur pour l'essai en pression fixe. La Figure 97 et la Figure 98 montrent que ce n'est pas uniquement sur la plage des plus grandes valeurs de \bar{Y}_l (au-dessus de 0,7), dans laquelle les sous-volumes passent effectivement plus de temps que pour le premier essai (comme montré plus haut), que la relation (95) est moins précise : elle l'est également pour les faibles fractions fondues ($\bar{Y}_l < 0,4$). L'erreur commise pour les faibles valeurs de \bar{Y}_l est ainsi une seconde source d'erreur, qui s'ajoute à celle pour les fortes valeurs, dont l'impact a été étudié plus haut (hypothèse 1).

Une fois ce constat effectué, la question qui se pose est celle de la cause de cette perte de précision de la relation (95) pour l'essai en pression fixe. Afin de vérifier si cela est lié à des différences dans l'écoulement par convection naturelle du MCP liquide par rapport à l'essai en pression glissante, comme supposé, les champs de vitesse prédits par les calculs CFD des deux essais ont été comparés. Trois instants de calcul ont été sélectionnés pour l'essai en pression glissante, pour lesquels la fusion est localement à des degrés d'avancement différents, à savoir respectivement $\bar{Y}_l = 0,27$, $\bar{Y}_l = 0,46$, et $\bar{Y}_l = 0,71$ (ces trois instants sont $t = 6208s$, $t = 7608s$, et $t = 9465s$) ; ces trois valeurs de \bar{Y}_l se trouvent dans l'intervalle dans lequel la relation (95) prédit un flux de chaleur plus élevée pour le calcul en pression fixe (cf. Figure 97 et Figure 98). Pour chacune de ces trois valeurs, un instant de calcul a été

sélectionné pour le calcul en pression fixe, pour lequel la fusion est localement à ce même niveau d'avancement pour un groupe d'ailettes donné au sein du domaine (les trois instants choisis sont $t = 3464s$, $t = 4364s$, et $t = 6164s$). Cela permet la comparaison des champs de vitesse entre les deux calculs, pour un même avancement local de la fusion. La comparaison est effectuée, pour chaque valeur de \bar{Y}_l , dans trois plans verticaux situés respectivement au milieu des ailettes, et sur les côtés gauche et droit des ailettes (mêmes plans que pour la Figure 80, p. 148, et que pour la Figure 90, p. 165). Un total de neuf comparaisons est ainsi effectué dans les figures ci-dessous (Figure 100 à Figure 108). Afin de visualiser les valeurs numériques de la vitesse, le champ des vecteurs vitesse et le champ de la norme de la vitesse sont tous deux représentés sur ces figures.

Les neuf comparaisons permettent de voir qu'au global, pour un degré d'avancement donné, la structure de l'écoulement, et la forme et la taille des domaines de l'espace occupés par le MCP solide et liquide sont les mêmes entre les deux calculs. Ce n'est pas le cas pour la plus petite des trois valeurs de \bar{Y}_l (0,27), pour laquelle le liquide occupe plus de place pour l'essai en pression fixe. Cet effet est dû à la température de la paroi, qui est un peu plus faible ($\approx 312^\circ\text{C}$) pour l'essai en pression glissante à l'instant de calcul choisi ; la zone pâteuse est ainsi plus épaisse, ce qui réduit la place occupée par du MCP purement liquide à taux de fusion égal. Pour les deux autres valeurs de \bar{Y}_l , la forme du domaine liquide et la structure de l'écoulement sont tout à fait similaires entre les deux calculs.

Une différence que l'on peut en revanche constater est que l'écoulement est plus rapide en moyenne pour le calcul en pression fixe. Cela peut se constater qualitativement à l'aide des champs de la norme de la vitesse, l'échelle des couleurs étant la même pour chaque figure de la Figure 100 à la Figure 108. Afin d'effectuer des comparaisons quantitatives, les vitesses maximales atteintes dans le plan vertical situé à droite des ailettes (Figure 102 ; Figure 105 ; Figure 108), dans lequel la vitesse est la plus élevée parmi les trois plans verticaux, sont rassemblées dans la Table 18 (p. 184). L'augmentation de la vitesse maximale pour le calcul en pression fixe est plutôt importante ; elle est de 240% pour $\bar{Y}_l = 0,27$, de 54% pour $\bar{Y}_l = 0,46$, et de 31% pour $\bar{Y}_l = 0,71$. Ainsi, pour un degré d'avancement \bar{Y}_l donné autour d'une ailette, la vitesse du MCP liquide est plus importante pour l'essai en pression fixe, pour une même forme du domaine de l'espace occupé par le liquide et une même structure d'écoulement. Cela doit intensifier les échanges de chaleur convectifs avec le tube et les ailettes ; en effet, une vitesse d'écoulement plus importante éloigne plus rapidement des parois le MCP chaud pour le remplacer par du MCP plus froid. De même, à proximité du front de fusion, un écoulement plus rapide va remplacer plus rapidement le MCP liquide froid (proche de la température de liquidus) par du MCP liquide plus chaud provenant du reste du domaine occupé par le liquide.

L'augmentation du nombre de Nusselt pour l'essai en pression fixe par rapport à l'essai en pression glissante, visible sur la Figure 97 et la Figure 98, est de l'ordre de 10%, ce qui est très inférieur à l'importante augmentation de la vitesse maximale visible dans la Table 18. Toutefois, cette vitesse maximale n'est pas atteinte partout dans l'écoulement ; pour les deux valeurs les plus importantes de \bar{Y}_l , la vitesse maximale est atteinte au cœur du volume de MCP liquide, c'est-à-dire à proximité ni de la surface d'échange du liquide avec le tube et les ailettes, ni du front de fusion. L'augmentation de 10% du nombre de Nusselt reste ainsi cohérente avec les chiffres de la Table 18.

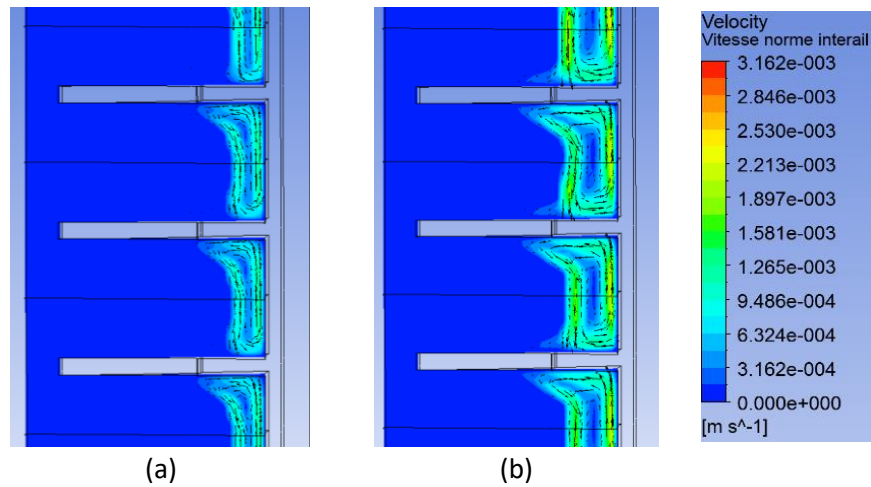


Figure 100 : Comparaison des champs de vitesse entre les calculs CFD en pression glissante (a) et fixe (b), pour $\bar{Y}_l = 0,27$, dans un plan vertical coupant les ailettes en leur centre

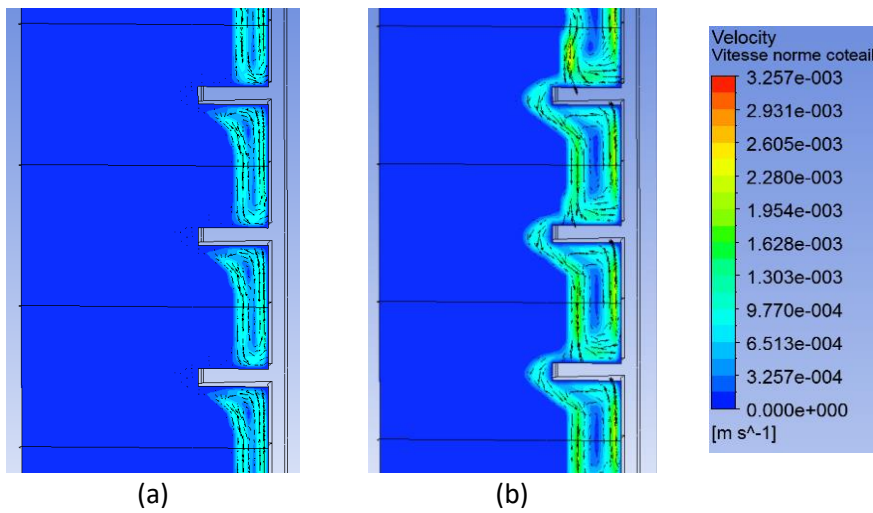


Figure 101 : Comparaison des champs de vitesse entre les calculs CFD en pression glissante (a) et fixe (b), pour $\bar{Y}_l = 0,27$, dans un plan vertical situé entre deux ailettes (frontière latérale gauche du domaine)

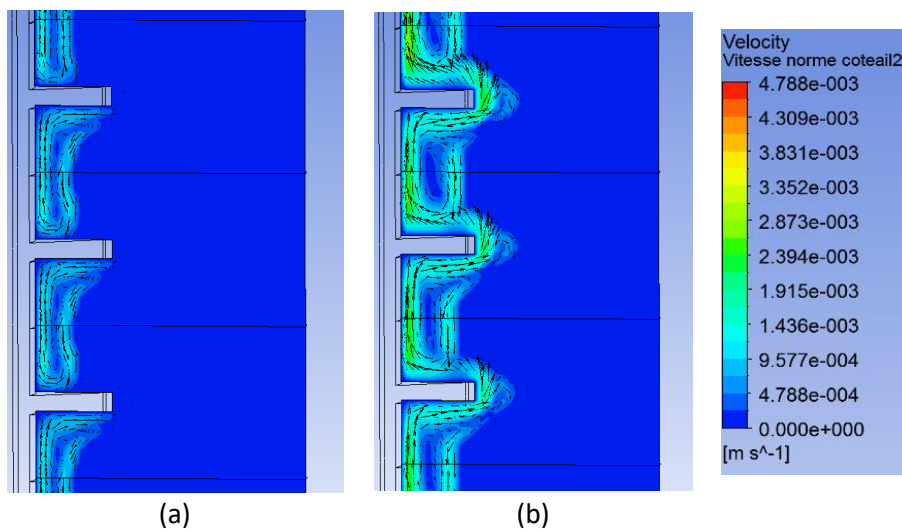


Figure 102 : Comparaison des champs de vitesse entre les calculs CFD en pression glissante (a) et fixe (b), pour $\bar{Y}_l = 0,27$, dans un plan vertical situé entre deux ailettes (frontière latérale droite du domaine)

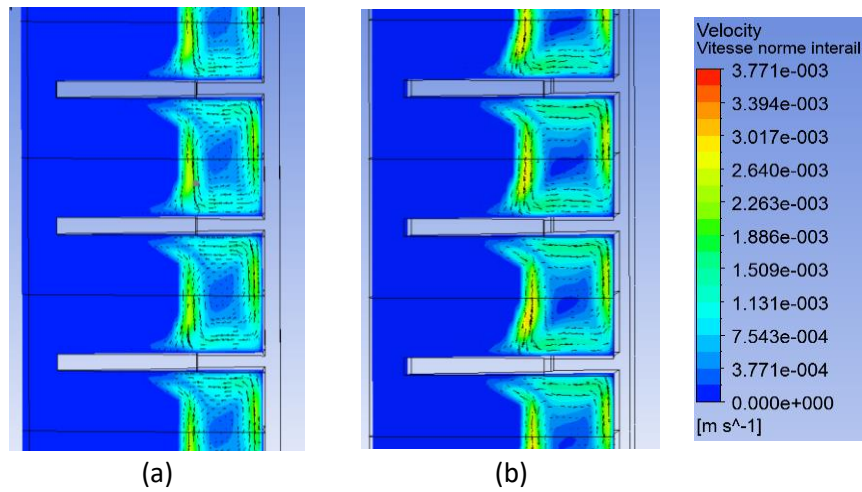


Figure 103 : Comparaison des champs de vitesse entre les calculs CFD en pression glissante (a) et fixe (b), pour $\overline{Y}_l = 0,46$, dans un plan vertical coupant les ailettes en leur centre

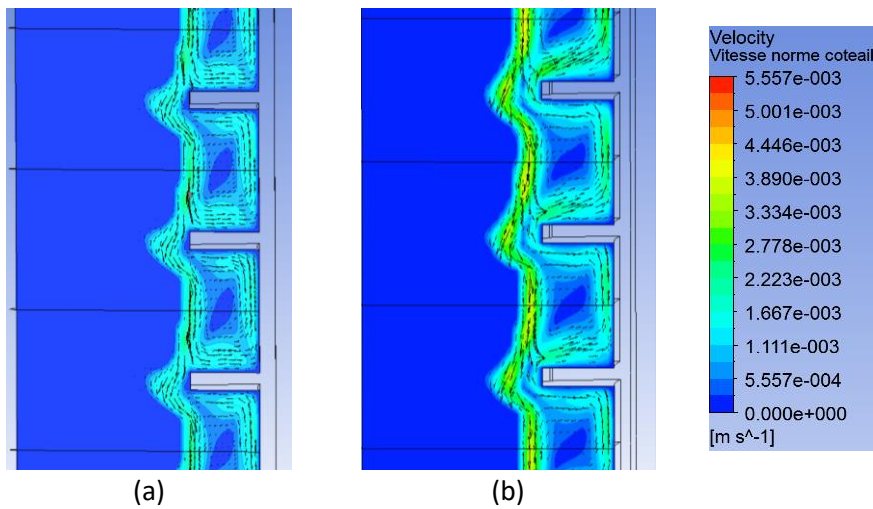


Figure 104 : Comparaison des champs de vitesse entre les calculs CFD en pression glissante (a) et fixe (b), pour $\overline{Y}_l = 0,46$, dans un plan vertical situé entre deux ailettes (frontière latérale gauche du domaine)

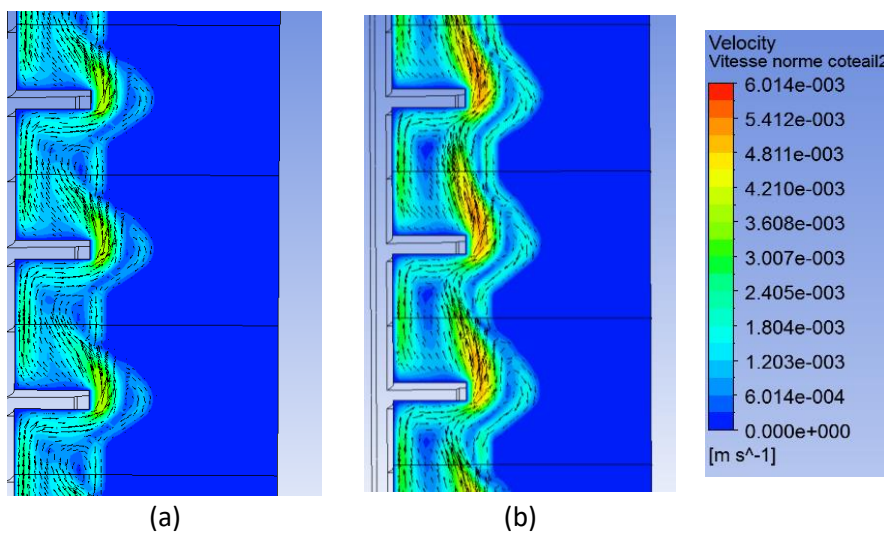


Figure 105 : Comparaison des champs de vitesse entre les calculs CFD en pression glissante (a) et fixe (b), pour $\overline{Y}_l = 0,46$, dans un plan vertical situé entre deux ailettes (frontière latérale droite du domaine)

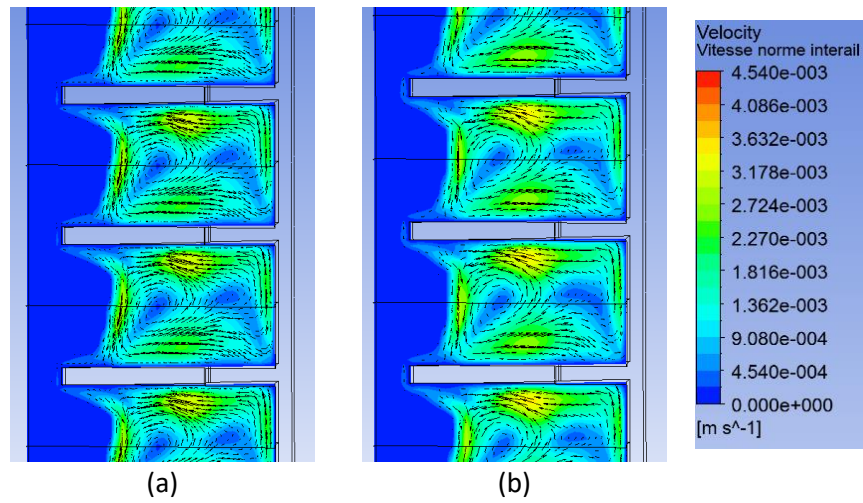


Figure 106 : Comparaison des champs de vitesse entre les calculs CFD en pression glissante (a) et fixe (b), pour $\bar{Y}_l = 0,71$, dans un plan vertical coupant les ailettes en leur centre

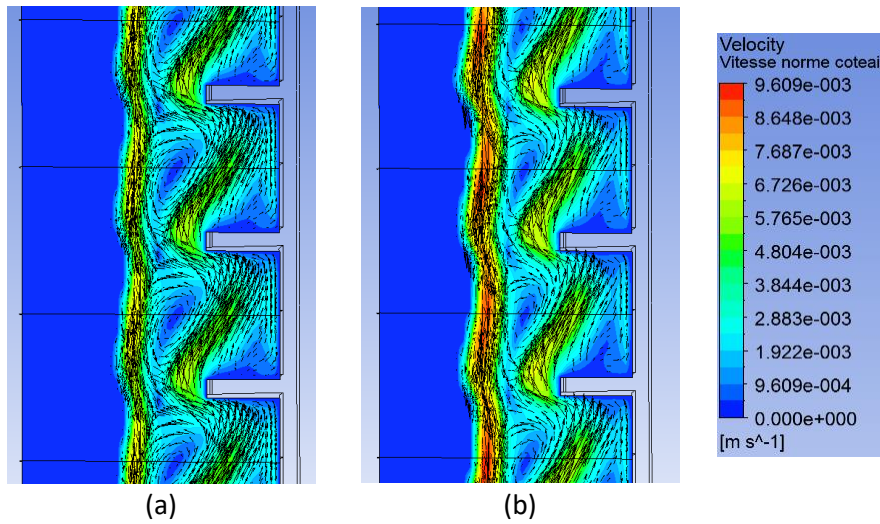


Figure 107 : Comparaison des champs de vitesse entre les calculs CFD en pression glissante (a) et fixe (b), pour $\bar{Y}_l = 0,71$, dans un plan vertical situé entre deux ailettes (frontière latérale gauche du domaine)

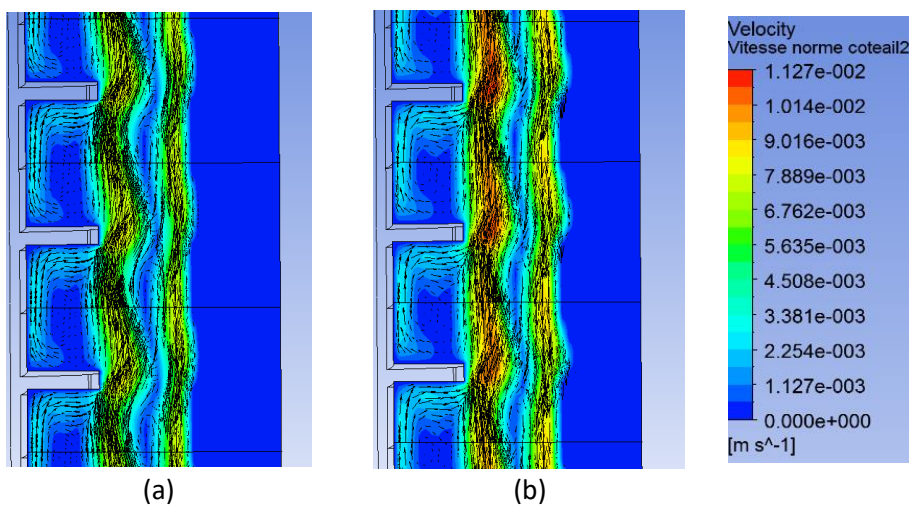


Figure 108 : Comparaison des champs de vitesse entre les calculs CFD en pression glissante (a) et fixe (b), pour $\bar{Y}_l = 0,71$, dans un plan vertical situé entre deux ailettes (frontière latérale droite du domaine)

\bar{Y}_l	Pression glissante	Pression fixe
0,27	1,4 mm.s ⁻¹	4,8 mm.s ⁻¹
0,46	3,9 mm.s ⁻¹	6,0 mm.s ⁻¹
0,71	8,4 mm.s ⁻¹	11 mm.s ⁻¹

Table 18 : Valeurs maximales de la vitesse dans le plan vertical à droite des ailettes, pour les calculs CFD en pression glissante et en pression fixe, selon l'avancement local de la fusion

La sous-estimation du flux de chaleur par la relation (95) pour l'essai en pression fixe semble donc être liée à une augmentation de la vitesse de l'écoulement du MCP liquide. Dès que les boucles de convection parcourent l'ensemble de la hauteur du domaine, le MCP liquide du haut du tube peut donc circuler jusque dans le bas du tube ; cela arrive très tôt après le début de la fusion, la couche de liquide étant déjà suffisamment épaisse pour $\bar{Y}_l = 0,1$. Le MCP du haut du tube ayant une vitesse plus élevée pour l'essai en pression fixe, il est probable que son arrivée dans le bas du tube accélère localement l'écoulement : cela expliquerait l'écoulement plus rapide que l'on constate pour cet essai, aussi bien lorsque la fusion est bien avancée (\bar{Y}_l plus élevé) que peu avancée (\bar{Y}_l plus faible) localement. La relation (95) a été construite sur la base de calculs CFD pour lesquels les conditions à la paroi étaient uniformes et constantes ; il apparaît donc logique que cette relation ne puisse pas prédire cet effet, qui apparaît uniquement lorsque les conditions à la paroi du tube sont non uniformes.

Par ailleurs, l'écoulement de liquide plus rapide peut également intensifier les transferts de chaleur verticaux au sein du MCP. En effet, les écoulements de MCP liquide chaud ascendant et de MCP froid descendant le long du tube étant plus rapides pour l'essai en pression glissante, il est possible que les transferts de chaleur verticaux liés à ces écoulements ne soient plus négligeables devant les transferts de chaleur entre les parois et le MCP, comme c'est le cas pour l'essai en pression glissante. Les transferts verticaux contribuent à la stratification de la température dans le liquide ; s'ils sont importants, ils vont ainsi influencer la température moyenne du MCP liquide à une hauteur donnée, donc le flux de chaleur échangé avec le tube et les ailettes, et par voie de conséquence l'énergie transférée globalement au MCP. Le modèle système ne tenant pas compte des transferts de chaleur verticaux au sein du MCP, il ne peut pas tenir compte de cette redistribution de la chaleur dans le liquide, et donc de son incidence sur les échanges de chaleur avec le tube et les ailettes. Autrement dit, pour l'essai en pression fixe, l'absence de prise en compte des transferts verticaux par le modèle système a potentiellement un impact les résultats. Leur prise en compte pourrait rapprocher les prédictions du modèle des résultats expérimentaux.

En résumé, pour l'essai en pression fixe, l'écoulement de convection naturelle est plus rapide localement à épaisseur de liquide égale. Cela peut induire potentiellement pour le modèle système une erreur plus importante que pour l'essai en pression glissante, du fait d'une part de l'intensification des transferts de chaleur entre les parois du tube et des ailettes et le MCP (relation (95)), et d'autre part de l'apparition d'une redistribution de la chaleur non négligeable au sein du MCP liquide, dont le modèle système ne tient pas compte.

V.2.3. Front de fusion

La forme du front de fusion autour d'un tube est tracée sur la Figure 109 pour le modèle système et pour l'expérience, afin d'évaluer comme précédemment la prédiction locale du volume fondu le long du tube qu'effectue le modèle système. De manière similaire à ce qui est fait pour la Figure 88, la position du front de fusion expérimental est évaluée à l'aide de l'isotherme $T = 305^{\circ}\text{C}$; le front expérimental est donné sous la forme d'une zone de l'espace, qui représente l'incertitude sur la position de cette isotherme du fait de l'incertitude de mesure de la température.

Le front de fusion prédit par le modèle système s'avère être plus proche du tube que le front de fusion expérimental, et ce pour les six instants de calcul regardés. Pour $t < 5320\text{s}$ (Figure 109-(a), -(b) et (c)), le front de fusion du modèle est très proche de la frontière gauche de la zone de l'espace dans lequel le front expérimental peut se trouver ; au vu de ces trois instants uniquement, le doute peut donc être permis quant à la bonne estimation de la position du front pour l'expérience. Cependant, pour les trois instants suivants (Figure 109-(d), -(e) et (f)), le front du modèle ne se trouve plus dans la zone d'incertitude expérimentale ; il est clairement plus à gauche que la frontière de cette zone. Cela montre que l'écart entre le modèle et l'expérience est dû à une mauvaise prédiction de la position du front par le modèle, et non à l'estimation expérimentale du front.

Le modèle système prédit donc une fusion plus lente que dans l'expérience. Ce constat est cohérent avec le fait que la corrélation sur le flux de chaleur extraite de la CFD (relation (95)) sous-estime d'environ 10% en moyenne le nombre de Nusselt, donc le flux échangé entre le fluide caloporteur et le MCP pour l'essai en pression fixe, comme montré dans la section précédente. Comme le montrent la Figure 97 et la Figure 98 (p. 177), la sous-estimation du flux par la relation (95) par rapport à l'essai en pression glissante est à peu près indépendante de l'avancement local de la fusion (c'est-à-dire de la valeur de \bar{Y}_l dans le volume local de MCP et de métal considéré) ; c'est uniquement au tout début ($\bar{Y}_l < 0,1$) et à la toute fin de la fusion ($\bar{Y}_l > 0,85$) que les prédictions du flux sont les mêmes pour l'essai en pression glissante et celui en pression fixe. Ainsi, sur la Figure 109, l'éloignement progressif du front de fusion prédit par le modèle système et du front expérimental semble cohérent avec cette imprécision quasi constante de la relation (95) au cours de la fusion.

Pendant la majeure partie de la fusion, la forme du front de fusion est en revanche bien prédite par le modèle système ; le front calculé semble décalé sur la gauche par rapport au front expérimental. Cela peut également s'expliquer par le caractère constant dans le temps de l'erreur sur l'estimation du flux de chaleur. Pour l'essai en pression glissante, la position du front de fusion était très bien estimée par le modèle système (sauf lorsque l'on s'approche de la fin de la fusion), et ce en dépit de l'erreur non nulle en moyenne que peut commettre la relation (95) selon l'avancement local de la fusion. Une erreur constante de +10% étant ajoutée pour l'essai en pression fixe, il semble ainsi logique que la forme globale du front soit prédite de manière satisfaisante par le modèle système, mais que sa position ne le soit pas.

C'est uniquement lorsque la fusion est quasiment terminée localement que la forme du front de fusion n'est pas la même entre le modèle et l'expérience : comme on peut le voir sur la Figure 109-(d) et -(e), le front expérimental a tendance à se courber vers la frontière extérieure du domaine lorsqu'il approche de la frontière extérieure du domaine de calcul. Le modèle système ne reproduit pas cette courbure plus importante du front. Cet aspect peut s'expliquer par l'erreur assez importante commise par la relation (95) pour les grandes valeurs de \bar{Y}_l . Comme on peut le voir sur la Figure 98, pour $\bar{Y}_l > 0,85$, le modèle sous-estime presque toujours le nombre de Nusselt, et ce de manière parfois

importante (jusqu'à 20% d'erreur) : le flux de chaleur reçu du tube va donc lui aussi être sous-estimé par le modèle. Cette erreur se retrouve également pour l'essai en pression glissante (Figure 97), ce qui avait pour conséquence d'empêcher le modèle de reproduire la courbure du front de fusion que l'on constatait à la fin de la charge (cf. V.1.3, p. 161). Pour l'essai en pression fixe, ce même phénomène fait s'éloigner la forme du front de fusion prédit par le modèle de celle de l'expérience lorsque la fusion est pratiquement terminée localement. Comme montré en section V.1.3, cette erreur de la relation (95) est due aux mouvements de liquide verticaux plus importants vers la fin de la fusion, qui tendent à stratifier la température dans le MCP liquide, accélérant la fusion dans le haut du domaine. Le modèle système ne prenant pas en compte le transport de chaleur vertical par les mouvements liquides, il ne peut pas reproduire ce phénomène.

Ainsi, l'erreur commise par la relation (95) pour l'essai en pression fixe fait que le modèle système prédit une vitesse de fusion inférieure à la réalité, aussi bien au niveau global qu'au niveau local. L'erreur relative commise localement ne dépendant pas de l'avancement local de la fusion, le modèle système reproduit malgré cela la forme du front de fusion de manière assez satisfaisante. Le front prédit par le modèle est ainsi décalé par rapport au front expérimental, sauf lorsque la fusion est pratiquement terminée localement, auquel cas le modèle ne reproduit pas la courbure du front expérimental vers la frontière extérieure du domaine.

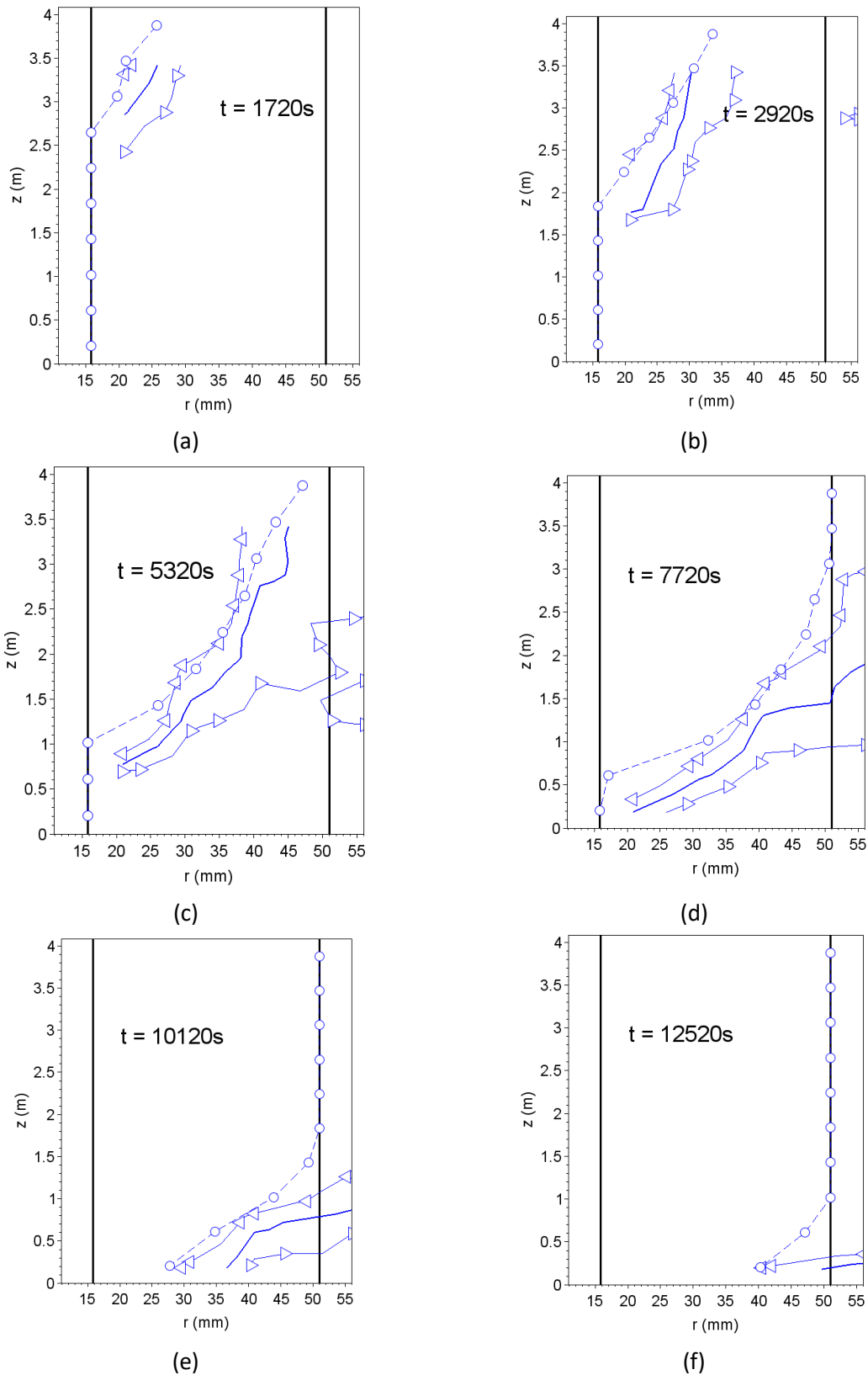


Figure 109 : Position moyenne du front de fusion pour le modèle système et l'expérience, à différents instants de calcul au cours de la charge en pression fixe

Les segments verticaux noirs représentent respectivement la paroi externe du tube (à gauche), et la frontière externe du domaine de calcul du modèle système (à droite)

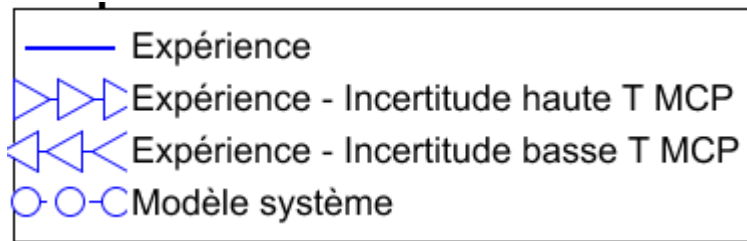


Figure 110 : Légende des courbes de front de fusion de la Figure 109

V.3. Synthèse du chapitre

Dans ce chapitre, deux essais de charge du module prototype ont été simulés avec le modèle système, afin de comparer ses prédictions aux résultats expérimentaux. Ces deux essais présentent des conditions différentes à la paroi, ce qui permet d'évaluer les performances du modèle système pour plusieurs situations de charge différentes, représentatives de la conduite envisagée en pratique pour la charge d'un module de stockage de vapeur par MCP en contexte industriel. Les comparaisons entre modèle et expérience sont faites sur la base de l'énergie accumulée par le milieu de stockage (MCP + ailettes + épaisseur du tube) et de la forme du front de fusion. Ces deux comparaisons permettent respectivement d'évaluer la prédiction du flux de chaleur global et local faite par le modèle système. Les deux essais ont également été simulés à l'aide du modèle CFD, afin de vérifier si la relation sur le flux de chaleur entre fluide caloporteur et MCP établie au chapitre précédent restait correcte pour des conditions représentatives d'une charge réelle.

Pour l'essai en pression glissante, l'accord du modèle système avec l'expérience est globalement bon. Les mesures effectuées sur le module prototype permettent d'évaluer les pertes thermiques, ainsi que l'énergie thermique accumulée par certaines des pièces métalliques du module non représentées par le modèle. Une fois ces deux énergies déduites du résultat expérimental brut, l'écart avec le modèle est d'environ 10% pendant la fusion du MCP actif ; cette précision est tout à fait raisonnable pour l'utilisation du modèle système pour les besoins du dimensionnement ou de la prédiction rapide des performances. Les écarts résiduels entre le modèle et l'expérience, ainsi que ceux plus importants constatés après la fin de la fusion du MCP actif, ont pu être reliés à l'énergie thermique absorbée par le MCP passif en périphérie de la calandre. Pour l'étude d'un module de stockage de taille industrielle, ces écarts seront probablement réduits car la proportion de MCP passif diminue avec la taille du module. En effet, un module de plus grande taille contiendra un nombre plus important de tubes : il y aura donc une plus faible proportion de tubes en périphérie du faisceau, faisant face à un volume de MCP passif. La forme du front de fusion est également prédite correctement par le modèle, sauf à la fin de la fusion où la corrélation sur le flux de chaleur établie au chapitre précédent perd en précision d'une part, et où une stratification thermique se met en place dans le MCP liquide d'autre part. Le modèle système négligeant le transfert de chaleur vertical au sein du MCP liquide du fait de l'écoulement de convection naturelle, cette stratification ne peut pas être représentée de manière satisfaisante.

Pour l'essai en pression fixe, les prédictions du modèle système sont en moins bon accord avec l'expérience. L'énergie accumulée globale est éloignée de 20 à 30% en moyenne des résultats expérimentaux. Plusieurs pistes d'explication de cet écart plus important ont été avancées. D'une part, pour ce second essai, le MCP situé dans le haut de la section d'essais atteint un taux de fusion élevé, voire termine sa fusion tôt au cours de la charge. La relation sur le flux de chaleur est moins précise lorsque le MCP est quasiment entièrement fondu localement ; ainsi, l'erreur commise dans le haut des

tubes pourrait s'avérer importante une fois intégrée sur la durée totale de la charge. D'autre part, les vitesses d'écoulement du MCP liquide sont plus importantes pour ce second essai. Cela pourrait intensifier d'une part les échanges de chaleur avec le tube et les ailettes, et d'autre part les transferts de chaleur verticaux au sein du MCP, qui sont négligés par le modèle système. La relation sur le flux de chaleur échangé avec le tube et les ailettes a été obtenue à l'aide de calculs CFD pour lesquels peu de différences pour l'avancement de la fusion sont présentes entre le haut et le bas du tube. Le modèle système ne peut donc pas prédire des effets qui apparaîtraient uniquement lorsque la fusion n'est pas uniforme sur la hauteur, comme c'est le cas pour l'essai en pression fixe. La comparaison des prédictions de la relation (95) avec les résultats CFD montre que l'intensification des échanges entre paroi et MCP par rapport au premier essai est indépendant du taux de fusion local. De ce fait, le modèle système prédit un front de fusion de la même forme que le front expérimental, mais décalé vers la paroi du tube. Enfin, il est possible également que le MCP passif, dont le modèle système ne tient pas compte, absorbe plus d'énergie que lors de l'essai précédent, du fait que la fusion du MCP actif se termine plus tôt dans le haut du tube. N'ayant pas la possibilité d'estimer expérimentalement l'énergie absorbée par le MCP passif, il n'est pas possible d'estimer quels effets parmi ceux envisagés ont l'impact le plus important sur les prédictions du modèle système. En l'état, les trois hypothèses émises restent des conjectures pour expliquer l'écart du modèle à l'expérience pour ce second essai.

Cette comparaison du modèle à deux essais expérimentaux ont permis de mettre en lumière plusieurs limitations et perspectives d'amélioration de la méthodologie de modélisation multi-échelles.

Premièrement, une fraction non négligeable de l'énergie cédée par le fluide caloporteur (eau liquide / vapeur) lors de son passage dans le module s'avère être à imputer aux pertes thermiques. Ainsi, dans l'optique d'utiliser le modèle système au sein d'un modèle plus vaste d'un procédé intégrant un module de stockage de vapeur, la prédiction de l'énergie du fluide caloporteur aux bornes du module requiert de connaître les pertes thermiques. Pour le module prototype étudié, des essais dédiés ont permis de déterminer un coefficient de pertes thermiques ; cela a permis une comparaison plus juste des résultats expérimentaux à ceux du modèle. Pour l'étude ou la conception d'un module n'ayant pas encore été construit (conception préliminaire), estimer les pertes thermiques est a priori moins simple. Bien que cela limite la précision que l'on peut attendre du modèle pour l'utilisation dans un tel contexte, il est bon de noter que le rapport des pertes thermiques sur la puissance thermique transmise au MCP sera moins importante pour un module de taille industrielle que pour le module prototype étudié ici, car la proportion de tubes périphériques sera plus faible, comme dit plus haut. Pour l'étude d'un module de taille industrielle, cette source d'imprécision du modèle pénalisera donc moins la qualité des résultats.

Deuxièmement, la relation extraite du modèle CFD pour le flux de chaleur transmis au MCP se montre moins précise lorsque le transport vertical de chaleur par l'écoulement de MCP liquide devient important. D'une part, lorsque le MCP est presque entièrement fondu localement, une imprécision par rapport au modèle CFD allant jusqu'à 20% est constatée, pour les deux essais. Cela semble être lié à un effet du second ordre, non pris en compte lorsque la relation a été construite. Comme montré au chapitre précédent (cf. section IV.4.1.2, p. 136), le nombre de Nusselt tend à être sous-évalué par la corrélation lorsque les mouvements de convection naturelle deviennent importants, probablement du fait qu'une partie du MCP liquide se situe dans la zone pâteuse, où l'écoulement est ralenti. D'autre part, pour l'essai en pression fixe, l'échange de chaleur semble être sous-évalué par la relation quel que soit le taux de fusion local (erreur d'environ 10%) ; il est supposé que les vitesses d'écoulement plus rapides intensifient les échanges entre le MCP et les parois. Prendre en compte ce type d'effets

demanderait d'effectuer un travail plus poussé sur la détermination d'une corrélation sur le flux de chaleur, qui se fonderait sur des calculs CFD avec des conditions à la fois uniformes et non uniformes à la paroi du tube. En l'état, le modèle système peut être considéré valide pour les situations de charge où l'avancement de la fusion présente peu de différences entre le haut et le bas du tube, c'est-à-dire pour la simulation de charges en pression glissante.

Troisièmement, le modèle système ne tient pas compte des transferts de chaleur verticaux au sein du MCP liquide, c'est-à-dire de la redistribution de la chaleur reçue du tube et des ailettes au sein du liquide par l'écoulement. La stratification thermique qui se met en place dans le liquide du fait de la convection naturelle ne peut donc pas être reproduite par le modèle. Bien que cela ne semble pas nuire à la prédiction de l'énergie globale accumulée sur le cas de l'essai en pression glissante, cela contribue à l'imprécision locale du modèle lorsque le taux de fusion est élevé. En outre, les transferts verticaux sont potentiellement plus importants pour une charge en pression fixe, le modèle CFD ayant montré que les vitesses d'écoulement du MCP y étaient plus élevées. Le fait que le modèle système ne considère pas ces transferts pourrait être une source d'imprécision lorsque l'avancement de la fusion n'est pas le même dans le haut et le bas du tube. Prendre en compte les transferts verticaux demanderait de revoir la formulation du modèle système, afin d'y inclure un terme de transfert de chaleur dans la direction verticale dans le milieu MCP + ailettes / inserts. Le flux de chaleur transmis verticalement devrait également être estimé à l'aide du modèle CFD, typiquement via un travail d'identification d'une relation entre ce flux et les grandeurs pertinentes du problème (gradient thermique dans le MCP, taux de fusion local, ...), de manière similaire au travail mené ici pour la relation sur le flux de chaleur à la paroi.

Chapitre VI. Conclusion et perspectives

VI.1. Conclusions

Le présent travail de thèse a permis la mise en place d'un modèle système d'un module de stockage de vapeur par Matériau à Changement de Phase (MCP) de type tubes-calandre, suivant une approche de modélisation multi-échelles. Le modèle système doit représenter avec précision les phénomènes physiques de petite échelle qui influent sur les transferts de chaleur globaux, à savoir les transferts convectifs dans le MCP en phase liquide, et la conduction de la chaleur dans les ailettes et inserts conducteurs disposés dans le MCP. Les temps de calcul doivent également être réduits, dans l'optique d'utiliser ce modèle pour le dimensionnement ou la prédiction des performances d'un module, dans un contexte d'ingénierie. Un modèle de mécanique des fluides numérique (CFD) à maille fine est utilisé pour simuler directement la fusion d'un MCP autour d'un tube à ailettes et inserts conducteurs. En utilisant les résultats de plusieurs calculs CFD, une corrélation adimensionnelle sur le flux de chaleur échangé entre le MCP et la paroi externe des tubes et des ailettes et inserts est construite. Le modèle système mis en place a un nombre de mailles réduit, et représente les transferts de chaleur dans le MCP par de la conduction pure. Une conductivité équivalente du MCP liquide, fonction de la température et de l'épaisseur locale de MCP fondu, est calculée à partir de la corrélation sur le flux de chaleur extraite de la CFD ; cela permet au modèle système de tenir compte des phénomènes physiques fins qu'il ne simule pas directement.

L'étude bibliographique présentée dans le **chapitre II** a permis tout d'abord de situer l'intérêt stratégique de développer un tel modèle d'un module de stockage de vapeur par MCP de type tubes-calandre. Le stockage de vapeur par MCP est une classe de technologies innovantes qui ont suscité de l'intérêt ces dernières années du fait de l'essor de la recherche sur les centrales solaires thermiques à Génération Directe de Vapeur (GDV). Ces technologies ont le potentiel d'être plus adaptées aux grandes capacités de stockage que celle des accumulateurs de vapeur, qui est la seule technologie de stockage de vapeur ayant atteint aujourd'hui la maturité industrielle. Parmi les technologies étudiées, celle du stockage tubes-calandre est actuellement la plus avancée : quelques modules de taille prototype ont été construits dans le monde, pour le solaire GDV comme pour d'autres applications industrielles. L'arrivée de cette technologie au stade industriel ferait naître le besoin de pouvoir dimensionner ou prédire rapidement les performances d'un module de stockage ; la méthodologie mise au point lors de cette thèse a vocation à répondre à ce besoin.

La revue effectuée sur les méthodes de modélisation numérique a permis d'identifier des méthodes appropriées pour les deux axes de modélisation du présent travail (CFD et système). Parmi les nombreux modèles existants pour la simulation à maille fine du changement de phase solide - liquide, c'est le modèle enthalpie-porosité de Voller qui a été retenu. Les atouts de ce modèle sont d'une part sa simplicité de mise en œuvre : il est en effet disponible dans la plupart des codes CFD, notamment le code ANSYS Fluent® qui est utilisé au CEA. Par ailleurs, ce modèle est de loin le plus utilisé dans la littérature pour l'étude des problèmes de changement de phase solide – liquide, et de ce fait ce modèle a fait ses preuves depuis son introduction dans les années 1980. Pour le volet de modélisation système, il a été choisi de représenter l'écoulement diphasique 1D de l'eau liquide / la vapeur à l'aide d'un

modèle homogène à deux équations. Cette approche de modélisation simple néglige les différences de température et de vitesse entre les deux phases ; cette hypothèse semble raisonnable pour l'écoulement de vapeur diphasique dans un système de stockage de vapeur, les vitesses d'écoulement et les flux de chaleur en jeu étant relativement faibles. Le fait que les modèles homogènes soient nettement moins coûteux en ressources de calcul que les modèles bi-fluide motive également ce choix, l'un des objectifs du présent travail étant la réduction des temps de calcul du modèle système.

Dans le **chapitre III**, deux cas de fusion sont simulés à l'aide du modèle enthalpie-porosité de Voller, à savoir la fusion de gallium dans une cavité rectangulaire, et la fusion d'une paraffine dans un système de stockage de chaleur par MCP tubes-calandre avec ailettes circulaires, de taille laboratoire. L'objectif de l'étude est de caractériser la sensibilité du modèle à plusieurs paramètres qui caractérisent le changement de phase, à savoir la constante de zone pâteuse A_{mush} , l'intervalle de température du changement de phase $T_{liq} - T_{sol}$, et la chaleur latente. Les deux premiers paramètres sont étudiés de manière croisée, à raison d'une vingtaine de simulations pour chacun des deux cas d'étude, ce qui permet à la fois d'observer leurs effets croisés et les différences de sensibilité aux paramètres selon le cas d'étude. La comparaison à des résultats expérimentaux permet d'identifier les valeurs des paramètres permettant le meilleur accord avec l'expérience.

La sensibilité des résultats aux paramètres se montre très différente pour les deux cas d'étude. L'influence de la constante de zone pâteuse est quasiment nulle pour le cas du système de stockage de taille laboratoire, du fait de la faible amplitude des mouvements de convection naturelle. Cette constante est en revanche très sensible pour le cas de la fusion dans une cavité : le temps nécessaire pour atteindre un taux de fusion donné peut varier du simple au double entre $A_{mush} = 10^4$ et $10^8 \text{ kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$. L'influence de l'intervalle de température $T_{liq} - T_{sol}$ est elle aussi plus importante pour la fusion dans une cavité, mais elle reste non négligeable pour le système tubes-calandre : ainsi, c'est A_{mush} le paramètre le plus sensible pour la fusion dans une cavité (bien que l'influence de $T_{liq} - T_{sol}$ reste importante également), et $T_{liq} - T_{sol}$ pour le système tubes-calandre. Des forts effets d'influence croisée apparaissent également : la valeur de l'un des paramètres qui minimise l'écart avec l'expérience est fonction de la valeur de l'autre paramètre, et inversement. La chaleur latente a de son côté une influence importante également : une variation de sa valeur induit une variation du même ordre de grandeur sur le temps de fusion total.

La sensibilité du modèle à $T_{liq} - T_{sol}$ et à la chaleur latente montre que caractériser précisément le MCP est crucial pour la simulation du changement de phase solide – liquide. Les mesures calorimétriques sont le seul moyen de déterminer a priori les valeurs de ces deux paramètres, en dépit des imprécisions inhérentes à ces mesures. Il est donc recommandé de garder ces imprécisions à l'esprit lors de l'utilisation du modèle, en particulier pour les MCP qui effectuent sans doute possible leur changement de phase sur une plage de température large (mélanges de plusieurs composants), comme c'est le cas de la paraffine du système de stockage de taille laboratoire étudié. Pour ce cas-ci, l'imprécision sur $T_{liq} - T_{sol}$ peut être à l'origine d'une erreur non négligeable sur la pente du plateau de température caractéristique du changement de phase.

La constante de zone pâteuse ne peut en revanche pas être déterminée par des mesures. Son influence est négligeable lorsque les mouvements de convection naturelle du MCP liquide sont faibles, ce qui a de fortes chances de ne pas être le cas sur un module de stockage de grandes dimensions. Sur le cas de la fusion dans une cavité, l'étude met en évidence une valeur de A_{mush} (qui dépend de $T_{liq} - T_{sol}$) au-

dessus de laquelle l'accord des résultats avec l'expérience est optimal quelle que soit la valeur de A_{mush} . Ce résultat n'est cependant pas généralisable, l'étude menée par Shmueli et al. [165] sur une autre géométrie ayant mis en évidence un optimum unique. Par ailleurs, le terme de pénalisation de la vitesse où apparaît A_{mush} dépend également d'un second paramètre, noté b dans le chapitre III (équation (48), section III.2.1, p. 65), qui influence le terme de pénalisation pour les faibles valeurs de la fraction liquide massique locale. La (ou les) valeur(s) optimale(s) de A_{mush} devraient donc dépendre de la valeur de b ; les constats faits dans la présente étude et par Shmueli et al. ne sont ainsi valables que pour la valeur $b = 10^{-3}$ qui a été adoptée dans la présente étude, et qui est la valeur la plus souvent adoptée dans la littérature. Ainsi, en l'état actuel des connaissances, caler la constante de zone pâteuse sur des résultats expérimentaux, lorsque cela est possible, apparaît comme le seul moyen de déterminer la valeur à lui donner.

Au vu des conclusions qui émergent de l'étude menée dans ce chapitre, pour les calculs CFD menés dans les chapitres suivants sur un module de stockage prototype, la valeur de $T_{liq} - T_{sol}$ est déterminée à l'aide de résultats de mesures calorimétriques sur le MCP utilisé (nitrate de sodium). A_{mush} est ensuite utilisée pour caler le modèle CFD paramétré avec cette valeur de $T_{liq} - T_{sol}$ sur des résultats expérimentaux, issus d'essais de charge menés sur le module.

Le **chapitre IV** présente le modèle système d'un module de stockage mis en place, ainsi que la méthodologie pour y inclure des informations sur les transferts de chaleur provenant de calculs CFD de la fusion du MCP. Le modèle système simule l'écoulement unidimensionnel de fluide caloporteur diphasique dans un tube. A l'extérieur des tubes, l'ensemble du MCP et des ailettes et inserts est représenté par un unique matériau homogène, dans lequel les transferts de chaleur sont représentés par un modèle de conduction thermique radiale pure ; les transferts dans la direction verticale sont négligés. Une conductivité équivalente de la couche de MCP liquide est calculée à l'aide d'une corrélation adimensionnelle sur le flux de chaleur local entre les parois du tube, des ailettes et des inserts et le MCP, extraite de résultats de calculs CFD. Cette conductivité varie dans le temps et avec l'altitude, et est fonction de l'épaisseur de la couche de liquide à l'altitude considérée, et de la différence entre la température moyenne de cette couche et celle de la paroi du tube.

Le modèle CFD, paramétré selon les préconisations dégagées au chapitre III, reproduit de manière satisfaisante les résultats d'un essai de charge mené sur le module prototype. La longueur et la température des deux plateaux constatés expérimentalement pour l'évolution de la température dans le MCP (l'un pendant que le MCP change de phase, l'autre lorsque le MCP est localement fondu et que la fusion se poursuit plus loin du tube) sont tous deux reproduits par le modèle. La méthodologie multi-échelles est testée sur le cas de la charge d'un module de stockage de vapeur prototype, disponible au CEA Grenoble, avec tubes à ailettes segmentées ; le MCP utilisé est du nitrate de sodium (environ deux tonnes). A l'aide de plusieurs calculs CFD transitoires avec une température uniforme et constante à la paroi du tube, une corrélation adimensionnelle sur le flux de chaleur local pour cette géométrie de tube à ailettes a été mise en évidence ; elle prend la forme d'une relation entre un nombre de Nusselt et un nombre de Rayleigh. Ce résultat montre qu'il est possible de caractériser le flux de chaleur local transmis au MCP pour un tube à ailettes, avec une corrélation dont les paramètres sont indépendants au premier ordre des températures de la paroi du tube et du MCP. L'étude a permis de mettre en évidence les choix à effectuer pour la différence de température et la longueur caractéristique qui apparaissent dans ces deux nombres, afin de permettre leur corrélation. L'analyse des résultats de

calcul CFD montrent que les paramètres de la loi reliant les nombres de Nusselt et de Rayleigh dépend de l'avancement local de la fusion à l'abscisse considérée le long du tube : pour un nombre de Rayleigh donné, le nombre de Nusselt est plus élevé lorsque la fusion est terminée localement (MCP entièrement liquide) que lorsque la fusion est en cours. Les deux corrélations correspondantes obtenues sont les suivantes :

$$Nu = 0,402Ra^{0,306} \quad (118)$$

$$Nu = 2,614Ra^{0,196} \quad (119)$$

Le modèle système paramétré à l'aide de cette corrélation se montre capable de reproduire le flux de chaleur prédit par le modèle CFD. L'évolution de ce flux dans le temps est prédit par le modèle système avec un écart moyen 4 à 14% par rapport aux résultats CFD. Aucun paramètre du modèle système n'a besoin de voir sa valeur changée manuellement selon le cas de calcul : la corrélation adimensionnelle suffit à rendre le modèle robuste vis-à-vis de la température du fluide caloporteur. Le temps nécessaire au calcul transitoire d'une fusion est 10 à 40 fois moins important pour le modèle système que pour le modèle CFD. La méthodologie permet donc bien d'obtenir un modèle système qui reproduise les effets sur les transferts de chaleur des phénomènes physiques fins qu'un modèle CFD simule directement, tout en réduisant significativement les temps de calcul.

Vers la fin de la fusion du MCP, le modèle système ne reproduit pas la stratification thermique du MCP liquide prédite par le modèle CFD. Cela est dû au fait que le modèle système ne tient pas compte des transferts de chaleur verticaux dans le MCP ; sur la géométrie de tube à ailettes étudiée, de tels transferts apparaissent dans le liquide vers la fin de la fusion, du fait de développement de boucles de convection qui occupent une importante hauteur le long du tube. En dépit de cela, le fait que le modèle système prédise le taux de fusion global avec une précision satisfaisante est suffisant pour envisager son utilisation pour des applications d'ingénierie.

Dans le **chapitre V**, le modèle système est validé sur des résultats expérimentaux issus du module prototype. Deux essais de charge sont simulés, et les prédictions du flux de chaleur globaux transmis au MCP et de la forme et la position du front de fusion sont comparées aux mesures expérimentales. Le flux global est estimé expérimentalement à partir d'un bilan d'enthalpie du fluide caloporteur aux bornes du module, duquel sont déduits les contributions estimées des pertes thermiques vers l'extérieur, et de l'énergie absorbée par les pièces solides du module ; ces deux aspects ne sont pas considérés par le modèle système.

Pour un premier essai en pression glissante (température de paroi uniforme, variable dans le temps), le modèle se montre capable de prédire correctement l'évolution du flux de chaleur au cours de la charge, avec une précision de 10% environ. Cet écart a pu être imputé en partie au MCP passif en périphérie de la calandre, dont le modèle système ne tient pas compte, et qui absorbe une partie de l'énergie thermique du fluide caloporteur. La proportion de MCP passif diminuant avec la taille du module, cet écart sera probablement réduit pour la modélisation d'un module de taille industrielle. Le modèle système reproduit également la forme globalement verticale du front de fusion pour cet essai (liée au fait que la température de paroi soit uniforme le long du tube), et prédit sa position de manière satisfaisante. A la fin de la fusion, une courbure du front de fusion apparaît expérimentalement dans le haut des tubes, que le modèle système ne reproduit pas. Cela est attribué d'une part à une perte de

précision de la corrélation sur le flux de chaleur établie au chapitre IV, lorsque la fusion du MCP est avancée à l'altitude considérée. D'autre part, la forme du front est influencée dans les derniers instants de la fusion par la stratification thermique qui se met en place dans le MCP liquide du fait des mouvements de convection naturelle, et dont le modèle système ne tient pas compte. Comme pour les cas de charge simulés au chapitre IV, cela n'impacte pas la prédiction du flux de chaleur global.

Pour un second essai en pression fixe (température de paroi ni uniforme ni constante dans le temps), la précision du modèle se dégrade, l'erreur sur le flux de chaleur global atteignant 20 à 30% en moyenne. La comparaison de la position du front montre que le modèle système prédit ici une fusion plus lente que dans l'expérience. Pour cet essai, la fusion du MCP est plus avancée dans le haut que dans le bas du tube. Ainsi, le MCP du haut du tube atteint plus vite l'avancement de la fusion pour lequel la corrélation sur le flux de chaleur établie au chapitre IV perd en précision, comme évoqué plus haut ; il est possible que cela dégrade la prédiction de l'énergie globale transmise au MCP au cours de la fusion. En outre, le calcul CFD montre que les vitesses d'écoulement du liquide sont plus élevées pour cet essai que pour le précédent, pour un même avancement local de la fusion. Il est supposé que cela intensifie les échanges de chaleur entre le MCP et les parois du tube et des ailettes, et également que les vitesses plus élevées permettent un transfert de chaleur vertical non négligeable au sein du MCP liquide, que le modèle système ne représente pas. Enfin, une partie des écarts pourrait également être à imputer à l'énergie thermique absorbée par le MCP passif en périphérie de la calandre : comme celui situé dans le haut des tubes débute sa fusion plus tôt que dans l'essai précédent, le MCP passif absorbe au global plus d'énergie. De la même manière que les écarts résiduels pour l'essai précédent, cette source d'écart serait moins importante pour un module de taille industrielle. Pour le module prototype, n'ayant pas la possibilité d'estimer expérimentalement l'énergie accumulée par le MCP passif, il n'est pas possible de conclure sur les sources d'écart les plus importantes parmi celles envisagées.

VI.2. Perspectives

Au cours de cette thèse, du travail a été effectué à la fois sur la modélisation 2D-3D fine du changement de phase solide-liquide, sur la modélisation système d'un module de stockage de vapeur par MCP, et sur la méthodologie de modélisation multi-échelles qui permet d'utiliser ensemble ces deux échelles de simulation. Plusieurs perspectives d'amélioration et de poursuite des travaux peuvent être dégagées pour chacun de ces axes.

L'étude menée au chapitre III sur la **modélisation 2D-3D fine** du changement de phase a mis en évidence la difficulté d'obtenir simplement des prédictions fiables de la température et du volume fondu dans du MCP en fusion avec le très utilisé modèle enthalpie-porosité de Voller. Cette difficulté est due en grande partie à l'impossibilité apparente de connaître la valeur à donner à la **constante de zone pâteuse**. Lorsque les mouvements de convection naturelle ont un impact sur les transferts de chaleur, les résultats de simulation sont très sensibles à cette constante. Bien que des tendances sur son influence puissent être dégagées, aucune méthode simple ne se détache pour déterminer la valeur permettant l'accord optimal avec l'expérience. Ainsi, le seul moyen d'être certain de la précision des résultats est de caler la constante de zone pâteuse sur des résultats expérimentaux, ce qui n'est possible que si on dispose de résultats auxquels se rapporter. Cela apparaît comme un sérieux frein à la prédictibilité du modèle enthalpie-porosité de Voller, et aux études et travaux qui se fondent sur ce modèle, comme la méthodologie de modélisation multi-échelles développée dans cette thèse.

Afin de lever cette contrainte posée par la constante de zone pâteuse, il faudrait pouvoir établir une méthodologie systématique permettant de déterminer a priori la valeur optimale. Comme la constante influence les mouvements de convection du MCP liquide, on peut s'attendre à ce que son impact sur les résultats dépende des facteurs qui gouvernent l'amplitude de ces mouvements : dimensions géométriques, forme géométrique de la zone de l'espace occupée par le MCP (espace inter-aillettes, ...), différences de température au sein du liquide, propriétés physiques du MCP, ... Pour relier la valeur optimale de la constante à ces paramètres, on peut imaginer concevoir un banc expérimental constitué d'une cavité de dimensions et de forme variable remplie de MCP, que l'on pourrait chauffer ou refroidir à une température réglable. En effectuant des fusions pour différentes valeurs des paramètres géométriques, différentes températures de paroi, et différents MCP, on pourrait tenter de corrélérer à ces paramètres la valeur de la constante de zone pâteuse permettant l'accord optimal avec l'expérience. Une telle corrélation ne serait probablement pas applicable aux géométries d'aillettes et d'inserts trop complexes, ou s'éloignant trop de la forme géométrique du banc. Une telle étude permettrait cependant d'obtenir des indications sur la dépendance de l'optimum de la constante aux différents paramètres qui sont susceptibles de la gouverner.

La seconde difficulté associée au modèle enthalpie-porosité de Voller est la prise en compte correcte des propriétés physiques du MCP liées à son changement de phase (**caractérisation**). Comme l'a montré l'étude du chapitre III, les résultats de simulation sont aussi sensibles aux paramètres de caractérisation qu'à la constante de zone pâteuse. Les incertitudes liées aux mesures calorimétriques utilisées pour déterminer ces propriétés étant assez importantes, cette sensibilité du modèle peut être une source d'erreur. Par ailleurs, les résultats de simulation sur le cas du module de stockage de taille laboratoire ont montré que le modèle ne pouvait pas reproduire le profil de température du MCP pendant son réchauffement sensible en phase solide (cf. Figure 21, section 3.4.1, p. 57). Ce constat est interprété par le fait que le changement de phase de la paraffine commence environ 15°C avant le pic de chaleur latente (vers 35°C), comme en témoignent les mesures calorimétriques qui mettent en évidence une croissance progressive de la courbe $c_p = f(T)$ bien avant ce pic. Pour tenir compte de cet effet, il faudrait utiliser un modèle de simulation qui tienne compte d'une courbe $c_p = f(T)$ du MCP.

Dans le modèle enthalpie-porosité de Voller, la fraction liquide est reliée linéairement à la température, ce qui correspondrait à une fonction $c_p = f(T)$ constante sur la plage de changement de phase. Pour prendre en compte une courbe $c_p = f(T)$ mesurée par DSC, une piste d'amélioration du modèle pourrait être d'adopter une relation non linéaire entre la fraction liquide et la température dans le modèle enthalpie-porosité de Voller. Rösler et Brügemann [109] présentent une approche de ce type, dans lequel la relation fraction liquide – température est une fonction sigmoïde. S'il est possible d'étendre leur approche à d'autres types de fonctions, on pourrait imaginer choisir les températures de solidus et de liquidus, la valeur de chaleur latente et la relation fraction liquide – température de manière à ce que l'enthalpie massique du MCP en fonction de sa température soit conforme aux mesures effectuées par DSC. Un tel modèle numérique, s'il est possible de le mettre en œuvre, permettrait de représenter correctement le profil de température du MCP lors de la montée en température sensible solide.

Du côté du **modèle système** et de la **méthodologie de modélisation multi-échelles**, plusieurs axes de développement futurs peuvent être dégagés.

Premièrement, la **corrélation sur le flux de chaleur** extraite du modèle CFD pourrait être améliorée. D'une part, au chapitre IV, il a été montré que la précision de la corrélation établie se dégradait lorsque

la différence de température entre la paroi du tube et le MCP diminuait. En effet, cela a pour effet d'augmenter le volume de la zone pâteuse; en fin de fusion, lorsque la vitesse d'écoulement du MCP liquide est plus importante, celui-ci est alors ralenti dans une zone plus importante de l'espace. Comme vu dans le chapitre IV, le flux de chaleur s'éloigne alors de la loi de puissance mise en évidence les nombres de Nusselt et de Rayleigh car celle-ci est représentative des situations où les vitesses sont plus faibles ou bien où la zone pâteuse est plus fine ; dans ces situations, la zone pâteuse a une influence moins importante sur les transferts de chaleur convectifs au niveau du front de fusion. Ce même effet peut probablement expliquer également la perte de précision de la corrélation lorsque la fusion du MCP est avancée mais non terminée localement, constatée au chapitre V ; en effet, c'est lorsque la fusion est avancée localement que les vitesses d'écoulement du liquide sont les plus élevées, et donc que l'écoulement est le plus sensible au ralentissement qu'il subit au niveau de la zone pâteuse. La corrélation sur le flux de chaleur pourrait donc être affinée en prenant en compte cet **effet de ralentissement de l'écoulement de MCP liquide par la zone pâteuse**.

D'autre part, au chapitre V, l'évaluation de la corrélation sur des calculs CFD représentatifs des conditions réelles d'une charge d'un module de stockage a mis en évidence une perte de précision lorsque la fusion du MCP n'est pas uniforme le long du tube (pression fixe), quel que soit son avancement local. L'une des causes possibles identifiées pour cette perte de précision est l'effet d'accélération de l'écoulement de MCP liquide évoqué plus haut, qui survient lorsque la fusion du MCP est plus avancée dans le haut du tube. La corrélation a été construite au chapitre IV sur la base de calculs CFD pour lesquels la température de paroi du tube est uniforme, dans lesquels cet effet d'accélération n'est pas présent. Ainsi, une préconisation pour améliorer les prédictions serait de **construire la corrélation à l'aide de calculs CFD représentatifs à la fois des conditions de charges en pression glissante et en pression fixe**. Cela permettrait d'observer, pour la géométrie de tubes à ailettes et inserts considérée, les effets de la non-uniformité de la température de paroi sur le flux de chaleur transmis au MCP, et fournirait des données pour modéliser ces effets. En outre, il pourrait également être utile d'effectuer des calculs CFD pour plusieurs longueurs de tube. Au vu du temps de calcul nécessaire à un calcul CFD transitoire sur une géométrie complexe (de plusieurs jours à plusieurs semaines sur 16 à 20 processeurs en parallèle dans le présent travail), limiter la hauteur représentée semble indispensable. Pour cette raison, dans la présente étude, les calculs CFD menés sur le module prototype représentent une longueur de tube de 0,54m, ce qui représente environ 1/8 de la hauteur totale de tube immergée dans du MCP. Effectuer un calcul avec une hauteur plus élevée permettrait de **s'assurer de la validité de la corrélation établie pour une plus grande hauteur de tube**.

Deuxièmement, le modèle multi-échelles mis en place ne tient pas compte des **transferts de chaleur verticaux** au sein du MCP liquide par l'écoulement. Le modèle système ne peut donc pas représenter la contribution des mouvements liquides verticaux à la stratification thermique qui se met en place dans le liquide. Cette contribution pouvant devenir non négligeable si les vitesses d'écoulement du liquide deviennent importantes. Il s'agit de l'une des sources d'erreur potentielles du modèle système envisagées au chapitre V pour l'essai en pression fixe. Prendre en compte ces transferts de chaleur verticaux permettrait au modèle système de mieux prédire la température locale du MCP liquide, et donc le flux de chaleur qui lui est transmis. En outre, il n'est pas impossible que ces transferts soient plus importants encore pour d'autres géométries d'aillettes et d'inserts, qui favoriseraient un développement plus précoce de boucles de convection de grande taille. Les transferts verticaux pourraient être pris en compte dans le modèle système par un échange de chaleur entre les mailles de MCP dans la direction verticale. Cet échange pourrait être calculé à l'aide d'une seconde corrélation

modélisant les transferts verticaux, que l'on déduirait des résultats CFD, en plus de la première corrélation sur le flux de chaleur transmis au MCP.

Troisièmement, une piste d'amélioration du modèle système pourrait être de **ne pas mailler le domaine MCP + ailettes / inserts dans la direction radiale**. Dans une optique de dimensionnement ou de prédiction des performances, la fonctionnalité la plus importante d'un modèle système est de prédire le flux de chaleur global échangé entre le MCP et le fluide caloporteur. Le travail d'établissement d'une corrélation sur ce flux a montré que celui-ci était lié à la température et à l'épaisseur locale de la couche de MCP liquide. Mailler radialement le MCP ne semble pas indispensable pour déterminer ces grandeurs : on pourrait imaginer un modèle non maillé, dans lequel les couches de MCP liquide et solide seraient uniquement représentées par leur température moyenne, et le volume fondu à l'altitude considérée. Établir un tel modèle demanderait de connaître la proportion de la chaleur reçue de la paroi qui contribue à réchauffer le liquide de manière sensible (chaleur sensible), et la proportion qui contribue à épaissir la couche de liquide en faisant progresser la fusion (chaleur latente). Un tel modèle, s'il est possible de le mettre en place, aurait l'intérêt de réduire encore les temps de calcul. Ceux du modèle système mis en place dans le présent travail sont de l'ordre de quelques heures pour le calcul d'une charge complète, ce qui représente un gain considérable par rapport à un calcul CFD, mais reste néanmoins assez long pour l'utilisation dans un contexte d'ingénierie.

Enfin, **le modèle multi-échelles appelle à être validé et étendu sur d'autres cas d'étude**. La validation pourrait se poursuivre sur d'autres géométries de modules de stockage, afin de vérifier l'applicabilité de l'approche multi-échelles mise en place à d'autres géométries de tubes à ailettes et inserts. L'approche repose sur la possibilité de modéliser les transferts de chaleur entre les parois et le MCP par une corrélation adimensionnelle entre un nombre de Nusselt et un nombre de Rayleigh. Il serait intéressant de tenter d'établir une telle corrélation sur d'autres géométries, afin de vérifier si cela est possible quelle que soit la géométrie considérée. En outre, comme évoqué plus haut, la géométrie d'ailettes segmentées utilisée ici pour valider la méthode ne favorise pas les transferts de chaleur verticaux au sein du MCP liquide. Étudier une géométrie d'ailettes et d'inserts qui les favorise permettrait d'évaluer l'intérêt de les représenter ou non dans le modèle système, dans l'objectif de conserver une prédiction correcte du flux de chaleur échangé globalement avec les parois.

Une possibilité d'extension de l'approche multi-échelles pourrait être de prendre en compte les **effets des paramètres géométriques** des ailettes et des inserts sur le flux de chaleur (par exemple la longueur et la largeur des ailettes). Leur géométrie n'étant pas directement représentée dans le modèle système, c'est via la corrélation extraite du modèle CFD que leur contribution aux transferts de chaleur est intégrée au modèle. Lors de la mise en place de la corrélation, des calculs CFD supplémentaires pourraient être effectués en faisant varier les dimensions géométriques des ailettes et inserts, afin par exemple d'observer et de quantifier l'effet d'intensification lié à des ailettes plus longues ou plus épaisses. Les paramètres géométriques apparaîtraient alors dans la corrélation sur le flux de chaleur. Le modèle système pourrait ainsi prédire les performances du module de stockage en fonction de ces paramètres, ce qui permettrait de l'utiliser pour optimiser la géométrie des ailettes et des inserts.

Enfin, la perspective d'extension la plus importante est le développement d'une méthodologie multi-échelles similaire pour la **décharge de vapeur**, qui implique cette fois-ci la solidification de MCP, et l'ébullition du fluide caloporteur. Lors de la solidification dans un module de stockage de chaleur par

MCP, les transferts de chaleur sont en général principalement conductifs, car les mouvements de convection naturelle du MCP liquide sont moins importants qu'en fusion. Il est donc probable qu'il soit plus approprié de représenter les transferts de chaleur en décharge par une corrélation adimensionnelle d'une autre forme que celle adoptée pour la charge. Si une corrélation d'une forme différente est mise en évidence, le modèle système devra être adapté pour la décharge pour en tenir compte. En outre, il est possible qu'en solidification, ce soient la température et l'épaisseur de la couche de MCP solide, et non liquide, qui gouvernent le transfert de chaleur. La prise en compte de la corrélation dans le modèle système ne se ferait alors pas via l'attribution d'une conductivité équivalente à la couche de MCP liquide, comme il est fait pour la fusion dans le présent travail.

Le travail de la présente thèse a abouti à l'établissement d'une méthodologie de modélisation multi-échelles systématique pour la charge d'un module, dont la robustesse aux valeurs et aux profils de température de paroi du tube que l'on peut rencontrer lors d'une charge pratique a été démontrée partiellement. Si une méthodologie systématique et robuste peut être établie à la fois pour la charge et la décharge, il sera alors possible de l'utiliser pour construire un modèle système qui sera capable de modéliser l'ensemble des phases (charge et décharge) et des conditions de fonctionnement d'un module de stockage, de manière précise et tout en maintenant des temps de calcul raisonnables. L'approche multi-échelles constituera alors une méthode de modélisation système complète et auto-suffisante d'un module de stockage, adaptée à l'usage dans un contexte d'ingénierie.

Annexes

Annexe 1 – Corrélations pour le coefficient d'échange intérieur tube utilisées dans le modèle système

Cette section liste les différentes corrélations utilisées pour exprimer le coefficient d'échange α_{calo} entre l'eau liquide / la vapeur et la paroi interne du tube. Dans le modèle système, ce coefficient intervient dans l'équation (45).

Pour une maille de fluide caloporteur contenant un **mélange diphasique d'eau liquide et de vapeur**, des expressions de α_{calo} adaptées à la condensation en film sont utilisées (le modèle ayant été testé pour la charge du stockage uniquement). Les formules adoptées négligent l'effet de la vitesse de la vapeur sur le coefficient de condensation, la vitesse de l'écoulement étant assez faible (de l'ordre de 1 m.s⁻¹ pour la vapeur). Pour calculer α_{calo} , on détermine d'abord le régime d'écoulement du condensat à l'aide de son nombre adimensionnel de Reynolds, défini par :

$$Re = \frac{4\dot{m}(1 - x_{vap})}{2\pi R_{tint}\mu_{l,sat}} \quad (120)$$

où \dot{m} est le débit total de fluide caloporteur (liquide + vapeur), et x_{vap} est le titre massique de vapeur.

Pour $Re < 30$ (régime laminaire sans vague), le coefficient d'échange moyen calculé analytiquement par Nusselt [216] est utilisé :

$$\alpha_{calo} = 1,47Re^{-\frac{1}{3}} \quad (121)$$

Pour $30 < Re < 1600$ (régime laminaire avec vagues), Kutateladze [217] donne :

$$\alpha_{calo} = \frac{Re}{1,08Re^{1,22} - 5,2} \quad (122)$$

Pour $Re > 1600$ (régime turbulent), Labuntsov [218] donne :

$$\alpha_{calo} = \frac{Re}{8750 + 57Pr^{0,5}(Re^{0,75} - 253)} \quad (123)$$

avec Pr le nombre adimensionnel de Prandtl du condensat :

$$Pr = \frac{c_{p,l,sat}\mu_{l,sat}}{\lambda_{l,sat}} \quad (124)$$

Lorsque la maille considérée contient de l'**eau liquide** ou de la **vapeur pure**, comme c'est le cas dans la colonne d'eau située dans le bas des tubes lors d'une condensation, l'expression de α_{calo} utilisée est adaptée à un écoulement de fluide monophasique. Le calcul de α_{calo} fait intervenir les nombres de Reynolds et de Prandtl du fluide en écoulement, calculés localement comme :

$$Re = \frac{\rho \dot{m} R_{tint}}{2\pi R_{tint}^2 \mu} \quad (125)$$

$$Pr = \frac{c_p \mu}{\lambda} \quad (126)$$

Pour $Re < 1,24 \cdot 10^5$, la corrélation de Mac Adams [219] (adaptée à un régime d'écoulement turbulent) est utilisée. Celle-ci exprime le coefficient d'échange sous la forme d'un nombre de Nusselt :

$$Nu = 0,023 Re^{0,8} Pr^{0,4} \quad (127)$$

Pour $Re > 1,24 \cdot 10^5$, la corrélation suivante donnée par Gnielinski [220] est utilisée :

$$Nu = \frac{\frac{\Lambda}{8} (Re - 1000) * Pr}{1 + 12,7 * \sqrt{\frac{\Lambda}{8}} \left(Pr^{\frac{2}{3}} - 1 \right)} \quad (128)$$

Λ est un coefficient proportionnel aux pertes de charge, nommé coefficient de Darcy. Pour $Re < 10^6$, il est exprimé à l'aide de la relation de Filonenko [221] :

$$\Lambda = (1,83 \log_{10}(Re) - 1,64)^{-2} \quad (129)$$

Pour $Re > 10^6$, Λ est calculé à l'aide de la relation de Karman-Nikuradze [222], où il intervient de façon implicite :

$$\frac{1}{\sqrt{\Lambda}} = -0,8 + 2 \log_{10}(Re \sqrt{\Lambda}) \quad (130)$$

Une fois le nombre de Nusselt calculé, le coefficient d'échange α_{calo} est donné par :

$$\alpha_{calo} = Nu \frac{\lambda}{2R_{tint}} \quad (131)$$

Annexe 2 – Résolution numérique des équations du modèle système

Dans le modèle système, la résolution numérique du problème (décrit en section IV.2, p. 108) est effectuée en deux blocs séparés. On distingue d'une part le problème d'écoulement 1D du fluide caloporteur diphasique liquide / vapeur, et d'autre part l'ensemble constitué par l'épaisseur du tube, et le milieu homogène MCP + ailettes / inserts.

Du côté du **fluide caloporteur eau liquide / vapeur**, les versions discrétisées des équations physiques ((60), (61)) sont les suivantes :

$$V_i \frac{\rho_{calo,i}^{t+1} - \rho_{calo,i}^t}{\Delta t} + \dot{m}_{i+\frac{1}{2}}^{t+1} - \dot{m}_{i-\frac{1}{2}}^{t+1} = 0 \quad (132)$$

$$\rho_i^t \frac{V_i}{\Delta t} (h_{calo,i}^{t+1} - h_i^t) + \dot{m}_{i+\frac{1}{2}}^{t+1} h_{calo,i}^{t+1} - \dot{m}_{i-\frac{1}{2}}^{t+1} h_{calo,i-1}^{t+1} - q_i^{t+1} = 0 \quad (133)$$

L'indice i désigne ici les grandeurs dans la maille considérée, et les exposants t et $t+1$ les instants temporels précédent et en cours de traitement respectivement. Le facteur V_i désigne le volume de la maille i . Les débits sont calculés à la frontière entre les mailles ; les indices $i + \frac{1}{2}$ et $i - \frac{1}{2}$ désignent respectivement les frontières aval et amont de la maille considérée. Le système d'équations formé par les équations (132) et (133) écrites pour chaque maille est non linéaire, car il fait intervenir des produits des inconnues $\dot{m}_{i+\frac{1}{2}}^{t+1}$ et $h_{calo,i}^{t+1}$. La résolution est effectuée à l'aide d'une méthode itérative de type Newton.

Du côté de l'**épaisseur du tube** et du milieu **MCP + ailettes / inserts**, les références des enthalpies sont prises à la température de fusion du MCP (le changement de phase est supposé s'effectuer à température fixe). Les équations physiques ((3), (67)) sont discrétisées selon l'équation ci-dessous, les indices $j-1, j$ et $j+1$ désignant la position radiale des mailles :

$$a_{i,j}^{t+1} h_{sens,i,j}^{t+1} + a_{i-1,j}^{t+1} h_{sens,i-1,j}^{t+1} + a_{i+1,j}^{t+1} h_{sens,i+1,j}^{t+1} + a_{i,j-1}^{t+1} h_{sens,i,j-1}^{t+1} + a_{i,j+1}^{t+1} h_{sens,i,j+1}^{t+1} = Q_{i,j} \quad (134)$$

Dans le milieu homogène MCP + ailettes / inserts, l'expression générale des coefficients $a_{i,j}^{t+1}$ et $Q_{i,j}$ est la suivante :

$$a_{i,j}^{t+1} = \rho_{h,i,j} \frac{V_{i,j}}{\Delta t} + \frac{\lambda_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i,j-\frac{1}{2}}}{c_{p,h,i,j} \Delta r} + \frac{\lambda_{i,j+\frac{1}{2}} S_{i,j+\frac{1}{2}}}{c_{p,h,i,j} \Delta r} \quad (135)$$

$$a_{i,j-1}^{t+1} = - \frac{\lambda_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i,j-\frac{1}{2}}}{c_{p,h,i,j-1} \Delta r} \quad (136)$$

$$a_{i,j+1}^{t+1} = - \frac{\lambda_{i,j+\frac{1}{2}} S_{i,j+\frac{1}{2}}}{c_{p,h,i,j+1} \Delta r} \quad (137)$$

$$a_{i-1,j}^{t+1} = 0 \quad (138)$$

$$a_{i+1,j}^{t+1} = 0 \quad (139)$$

$$Q_{i,j} = \rho_{h,i,j} h_{sens,i,j}^t \frac{V_{i,j}}{\Delta t} - \rho_{MCP} L x_v V_{i,j} \frac{Y_{l,i,j}^{t+1} - Y_{l,i,j}^t}{\Delta t} \quad (140)$$

Les surfaces $S_{i,j+\frac{1}{2}}$ désignent la surfaces des frontières entre les mailles d'indices $\{i,j\}$ et $\{i,j+1\}$, et $V_{i,j}$ est le volume de la maille d'indice $\{i,j\}$. Le pas d'espace Δr est pris constant sur tout le domaine. Les conductivités $\lambda_{i,j+\frac{1}{2}}$ sont des moyennes entre deux mailles voisines dans la direction radiale. Elles sont calculées par une approche de type résistances thermiques, en considérant les résistances des épaisseurs des deux mailles :

$$\lambda_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{2}{\frac{1}{\lambda_{i,j}} + \frac{1}{\lambda_{i,j+1}}} \quad (141)$$

Pour le cas des mailles situées près de l'épaisseur du tube, le pas d'espace Δr est remplacé par la distance séparant le centre de ces mailles de celui des mailles de l'épaisseur du tube (que l'on note r_g), dans le terme d'indice $\left\{i,j - \frac{1}{2}\right\}$ de l'équation (135) et dans l'équation (136). Dans cette dernière équation, la capacité thermique $c_{p,h,i,j-1}$ du milieu homogène est remplacée par celle de la paroi du tube.

Pour le cas des mailles situées près de la frontière externe du domaine de calcul, la nullité du flux échangé avec l'extérieur impose :

$$a_{i,j}^{t+1} = \rho_{h,i,j} \frac{V_{i,j}}{\Delta t} + \frac{\lambda_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i,j-\frac{1}{2}}}{c_{p,h,i,j} \Delta r} \quad (142)$$

$$a_{i,j+1}^{t+1} = 0 \quad (143)$$

Dans l'épaisseur du tube, les différents coefficients ont les expressions suivantes :

$$a_{i,j}^{t+1} = \rho_{i,j} \frac{V_{i,j}}{\Delta t} + \frac{\lambda_{i+\frac{1}{2},j} S_{i+\frac{1}{2},j}}{c_{p,i,j} \Delta z} + \frac{\lambda_{i-\frac{1}{2},j} S_{i-\frac{1}{2},j}}{c_{p,i,j} \Delta z} + \frac{\lambda_{i,j+\frac{1}{2}} S_{i,j+\frac{1}{2}}}{c_{p,i,j} r_g} + \frac{S_{i,j-\frac{1}{2}}}{c_{p,i,j} \left(\frac{R_{tint} \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{R_{text}}{2R_{tint}} \right)}{\lambda_t} + \frac{1}{\alpha_{calo,i}} \right)} \quad (144)$$

$$a_{i,j-1}^{t+1} = 0 \quad (145)$$

$$a_{i,j+1}^{t+1} = - \frac{\lambda_{i,j+\frac{1}{2}} S_{i,j+\frac{1}{2}}}{c_{p,h,i,j+1} r_g} \quad (146)$$

$$a_{i-1,j}^{t+1} = - \frac{\lambda_{i-\frac{1}{2},j} S_{i-\frac{1}{2},j}}{c_{p,i-1,j} \Delta z} \quad (147)$$

$$a_{i+1,j}^{t+1} = -\frac{\lambda_{i+\frac{1}{2},j} S_{i+\frac{1}{2},j}}{c_{p,i+1,j} \Delta Z} \quad (148)$$

$$Q_{i,j} = \rho_{i,j} h_{i,j}^t \frac{V_{i,j}}{\Delta t} + \frac{S_{i,j-\frac{1}{2}}}{\frac{R_{tint} \ln\left(\frac{1}{2} + \frac{R_{t\text{ext}}}{2R_{tint}}\right)} + \frac{1}{\lambda_t} + \frac{1}{\alpha_{calo,i}}} (T_{calo,i} - T_{cp}) \quad (149)$$

Les surfaces $S_{i+\frac{1}{2},j}$ désignent les surfaces des frontières entre les mailles d'indices $\{i,j\}$ et $\{i+1,j\}$, de la même manière que précédemment. Les conductivités moyennes $\lambda_{i+\frac{1}{2},j}$ entre deux mailles adjacentes dans la direction axiale sont calculées de la même manière que dans la direction radiale (équation (141)). Dans les termes d'échange de chaleur avec la paroi (équations (144) et (149)), $T_{calo,i}$ et $\alpha_{calo,i}$ désignent la température du fluide caloporteur et le coefficient d'échange intérieur tube dans la maille de fluide caloporteur adjacente à la maille d'épaisseur de paroi considérée. T_{cp} est le point de fusion du MCP.

Le problème présente deux inconnues dans le milieu homogène MCP + ailettes / inserts, à savoir l'enthalpie sensible h_{sens} et la fraction liquide Y_l , pour une seule équation (134). Afin de déterminer la valeur des deux inconnues dans chaque maille, la méthode itérative de Voller et al. [97] consiste à résoudre l'équation (134), puis à faire l'hypothèse que l'ensemble des mailles subit un changement de phase, ce qui conduit à $h_{sens,i,j}^{t+1} = 0 \text{ J.kg}^{-1}$ dans toutes les mailles. On obtient ainsi l'équation suivante :

$$Y_{l,i,j}^{t+1} = \frac{\Delta t}{\rho_{MCP} L x_m V_{i,j}} \times \left(\frac{\lambda_{i,j+\frac{1}{2}} h_{sens,i,j+1}^{t+1}}{c_{p,h,i,j+1} \Delta r} S_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\lambda_{i,j-\frac{1}{2}} h_{sens,i,j-1}^{t+1}}{c_{p,h,i,j-1} \Delta r} S_{i,j-\frac{1}{2}} + \rho_{h,i,j} h_{sens,i,j}^t \frac{V_{i,j}}{\Delta t} \right) + Y_{l,i,j}^t \quad (150)$$

$h_{sens,i,j}^{t+1}$ et $Y_{l,i,j}^{t+1}$ sont calculés dans chaque maille en itérant entre l'équation (134), qui donne $h_{sens,i,j}^{t+1}$, et l'équation (150), qui donne $Y_{l,i,j}^{t+1}$. Les itérations se poursuivent jusqu'à convergence de l'enthalpie totale $h_{h,i,j}^{t+1} = h_{sens,i,j}^{t+1} + Y_{l,i,j}^{t+1} x_m L$.

Annexe 3 – Placement et nomenclature des thermocouples dans le module de stockage prototype

Les schémas ci-dessous (Figure 111 à Figure 117) représentent le placement des thermocouples disposés dans le MCP du module de stockage prototype, dans le plan horizontal, pour chacun des sept niveaux (positions axiales) où ceux-ci sont placés.

Les tubes de vapeur sont numérotés de 1 à 19 ; le tube central est le tube n°1, les tubes n°2 à 7 sont ceux de la couronne intermédiaire, et les tubes de n°8 à 19 sont ceux de la couronne extérieure. Les niveaux sont numérotés de 1 à 7 par hauteur croissante ; l'altitude de chaque niveau est indiquée sur les schémas. Les thermocouples sont placés à mi-hauteur entre deux ailettes d'un tube donné, et peuvent être à une distance de 5, 15, 25 ou 40,2 mm de la paroi du tube auquel ils sont assignés ; ces quatre distances au tube sont numérotées de 1 à 4.





Les noms des thermocouples sont indiqués sur les schémas. La nomenclature est la suivante : **TMT-N-P/A**, avec :

- T le numéro du tube autour duquel se trouve le thermocouple
- N le numéro du niveau auquel se situe le thermocouple (de 1 à 7)
- P le numéro associé à la distance du thermocouple à la paroi du tube (de 1 à 4)
- A la position angulaire autour du tube, en °

Les thermocouples sont repérés par des marqueurs sur les schémas. Leur couleur indique la couronne à laquelle appartient le tube auquel ils sont assignés :

- Rouge pour le tube central
- Vert pour la couronne intermédiaire
- Jaune pour la couronne extérieure

Leur forme indique la distance à la paroi du tube :

- Triangle  : position 1 (5 mm)
- Cercle  : position 2 (15 mm)
- Carré  : position 3 (25 mm)
- Losange  : position 4 (40,2 mm)

Les autres formes (étoiles, triangles ou cercles remplis en blanc) désignent d'autres types de thermocouples non exploités dans l'analyse du chapitre IV.

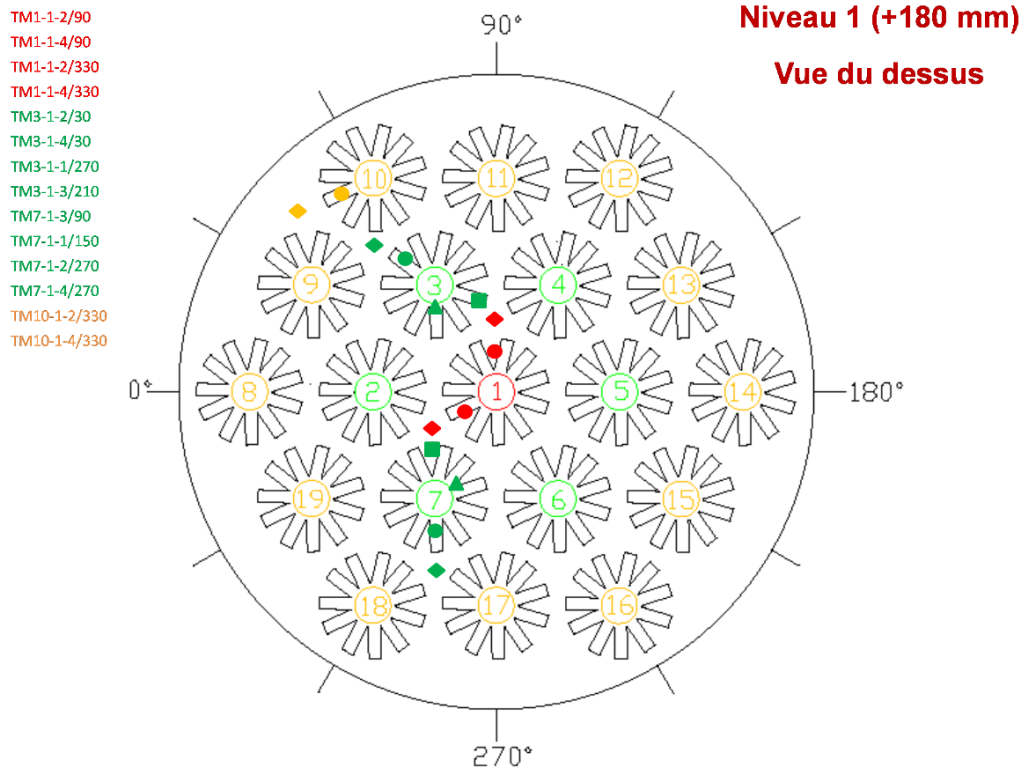


Figure 111 : Position des thermocouples du niveau 1 dans le module prototype

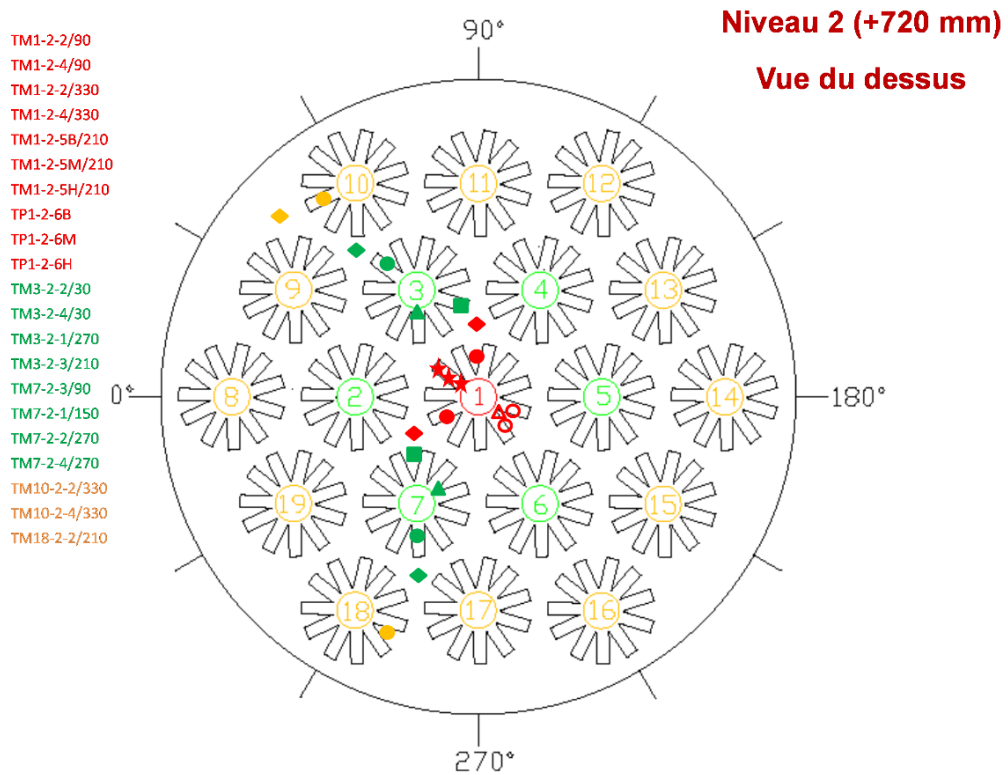


Figure 112 : Position des thermocouples du niveau 2 dans le module prototype

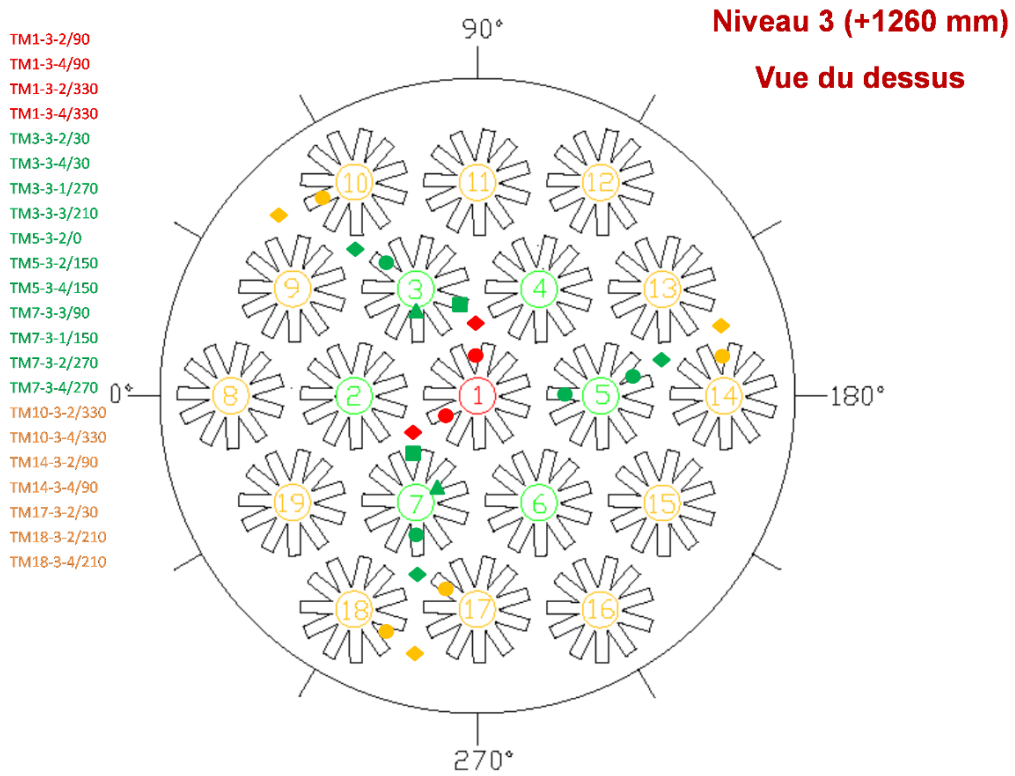


Figure 113 : Position des thermocouples du niveau 3 dans le module prototype

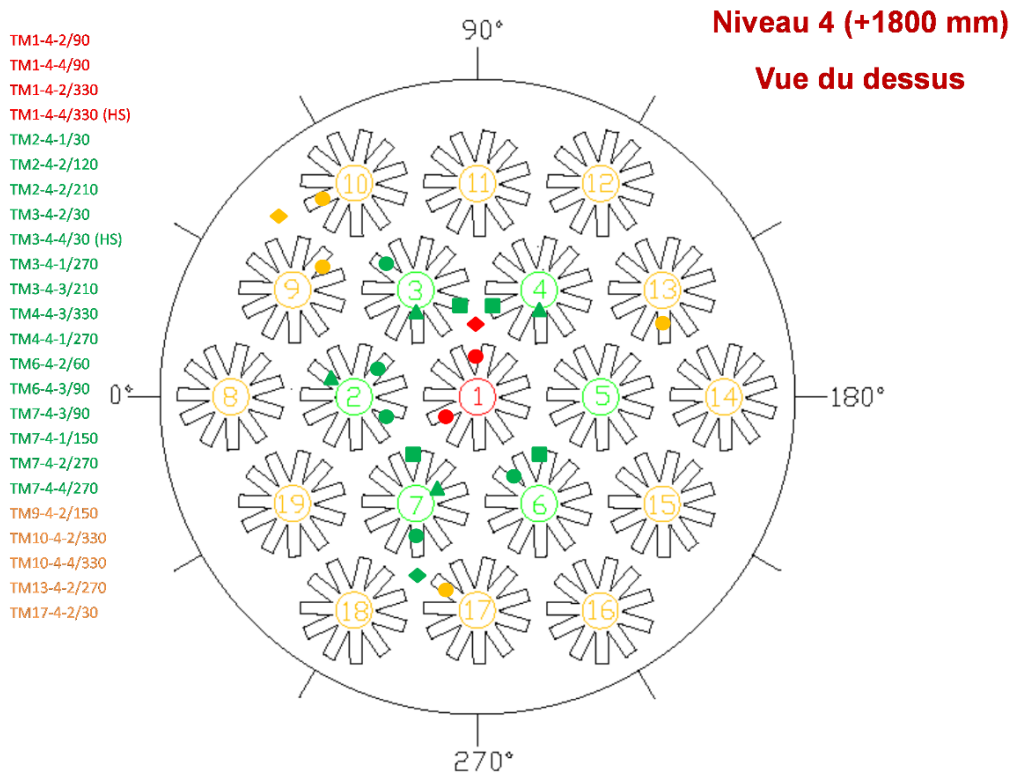


Figure 114 : Position des thermocouples du niveau 4 dans le module prototype

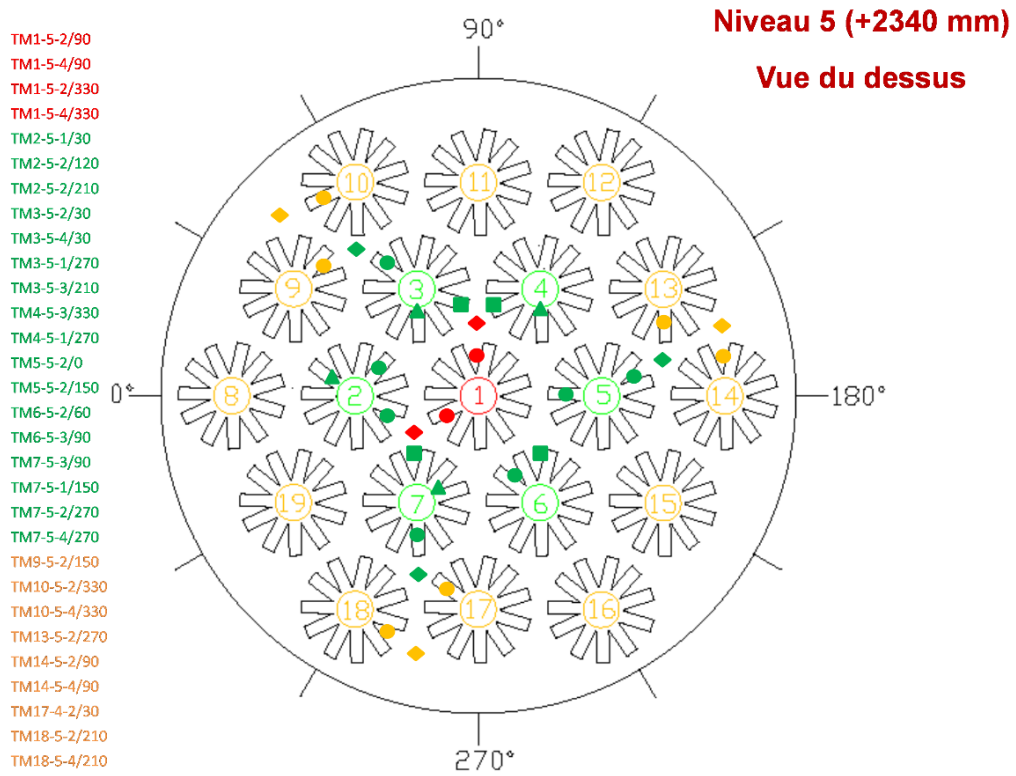


Figure 115 : Position des thermocouples du niveau 5 dans le module prototype

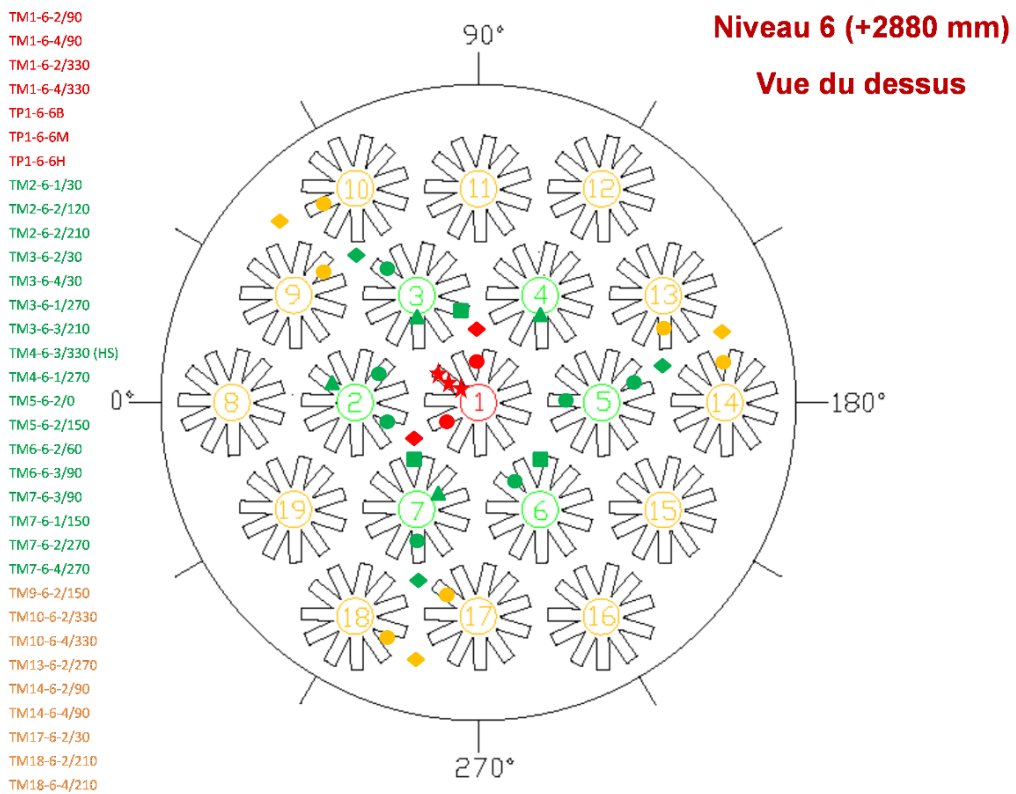


Figure 116 : Position des thermocouples du niveau 6 dans le module prototype

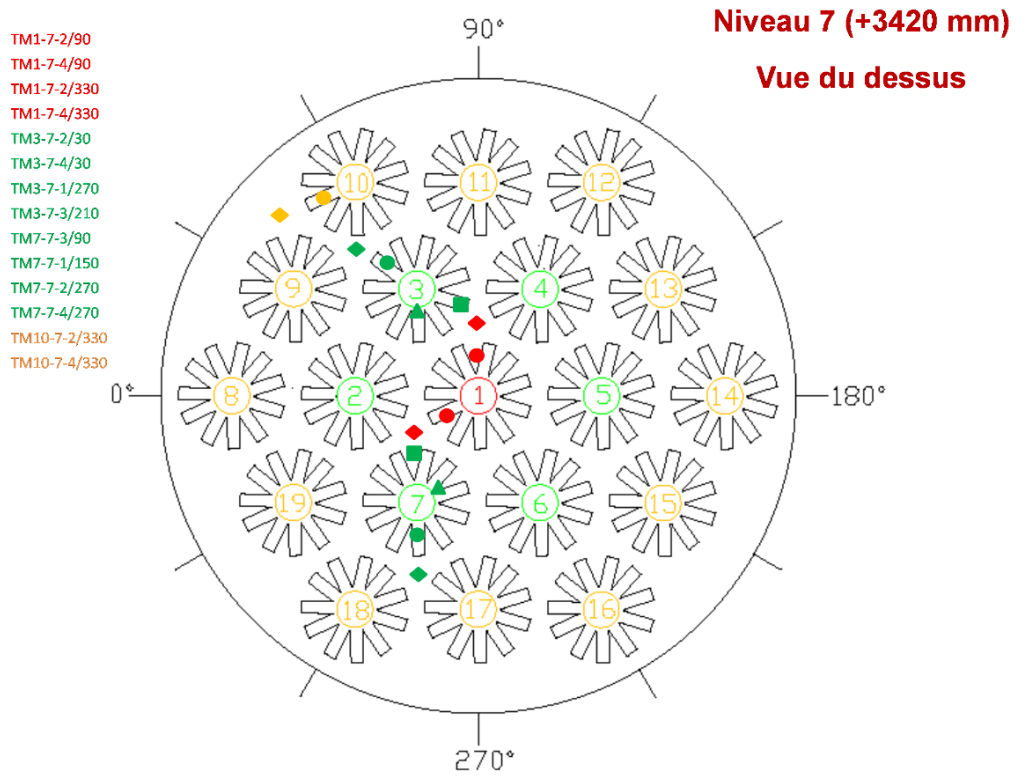


Figure 117 : Position des thermocouples du niveau 7 dans le module prototype

Annexe 4 – Paramètres du modèle système pour les calculs de charge du module prototype

Pour les calculs système de charge du module prototype effectués dans le chapitre V, l'évolution dans le temps des conditions aux limites du fluide caloporteur (température et débit d'injection, pression) sont déterminées à l'aide des mesures expérimentales des différentes grandeurs concernées, au cours des deux essais correspondants.

Pour l'essai en pression fixe, les évolutions temporelles mesurées de la pression et de la température d'injection du fluide caloporteur ont été ajustés par des polynômes de degré 5, utiliser pour fixer les spécifier les conditions aux limites du modèle système. Les profils expérimentaux et ajustés sont représentés Figure 118. Les expressions des polynômes, ainsi que l'ensemble des paramètres importants du modèle système pour la simulation de cette charge, sont rassemblés dans la Table 19.

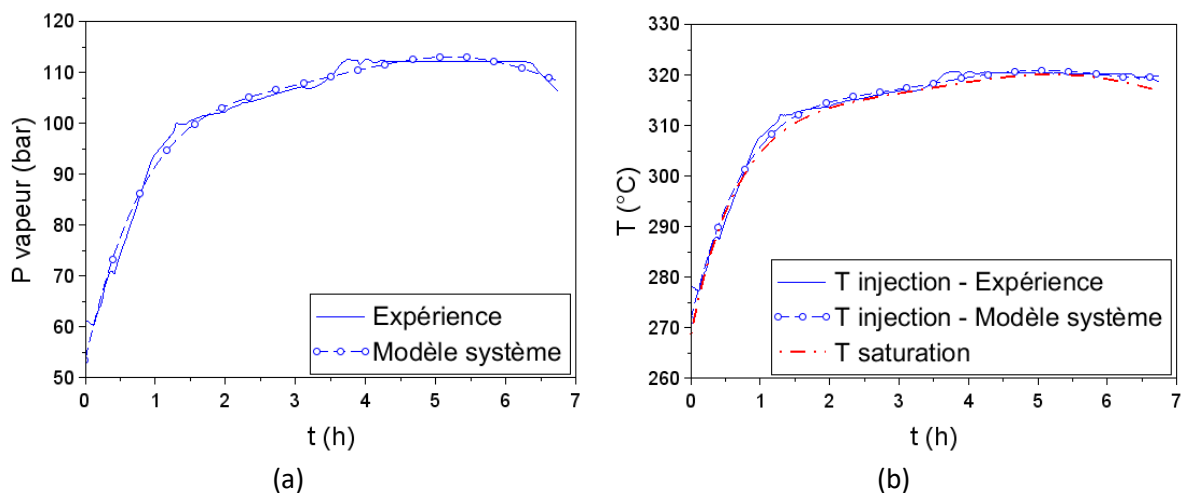


Figure 118 : Conditions de la vapeur à l'injection lors de l'essai de charge en pression glissante
(a) : Pression - (b) : Températures d'injection et de saturation

Longueur de tube (m)	Nombre de mailles	Pas d'espace	Pas de temps (s)	Débit d'injection (kg.s ⁻¹)	Température initiale (°C)
4,080	Dir. axiale : 10 Dir. radiale : 9 (milieu homogène)	Dir. axiale : $\Delta z = 408,0$ mm Dir. radiale : $\Delta r = 1,85$ mm	0,25	0,020	265
Pression fluide caloporteur (bar)			Température d'injection (°C)		
$t' = t/3600 + 1,4546$ $P(t') = 0,039777t'^5 - 1,1766t'^4$ $+ 13,422t'^3 - 74,594t'^2$ $+ 206,57t' - 125,38$ (t en s)			$t' = t/3600 + 1,4546$ $T_{in}(t') = 0,0517804t'^5 - 1,43736t'^4$ $+ 15,5197t'^3 - 81,8644t'^2$ $+ 213,949t' + 91,8956$ (t en s)		

Table 19 : Paramètres du modèle système pour la simulation de l'essai de charge en pression glissante

Pour l'essai en pression fixe, le débit d'injection du fluide caloporteur varie dans le temps, tandis que la température d'injection et la pression sont constants. L'évolution du débit d'injection durant les 30 premières minutes de la charge est ajustée par un polynôme de degré 3 ; après 30 minutes, le débit se stabilise. Les évolutions mesurée et ajustée du débit sont représentées Figure 119. L'expression du débit spécifiée dans le modèle, ainsi que les autres paramètres importants du modèle, sont rassemblés dans la Table 20.

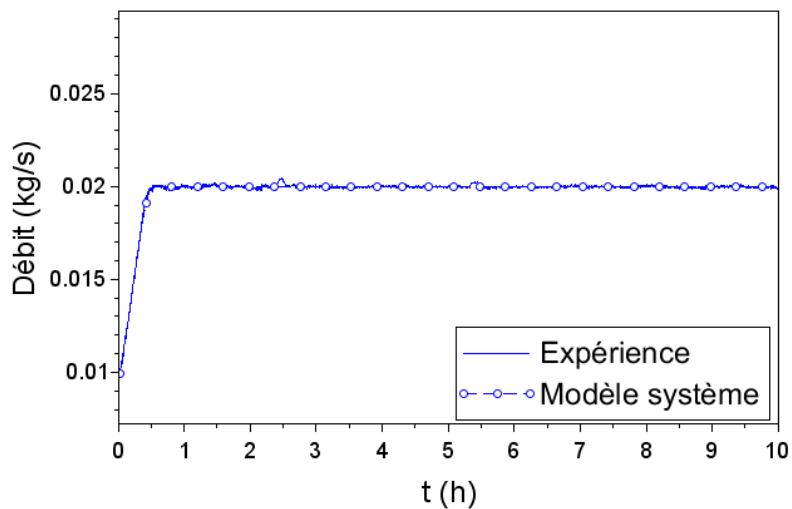


Figure 119 : Evolution du débit d'injection du fluide caloporteur au cours de l'essai en pression fixe

Longueur de tube (m)	Nombre de mailles	Pas d'espace	Pas de temps (s)	Température initiale MCP (°C)	Température initiale fluide caloporteur (°C)
4,080	Dir. axiale : 10 Dir. radiale : 9 (milieu homogène)	Dir. axiale : $\Delta z = 408,0$ mm Dir. radiale : $\Delta r = 1,85$ mm	0,25	284,9	286,1
Pression fluide caloporteur (bar)		Température d'injection (°C)	Débit d'injection ($\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$)		
105,1		315,1	$t' = t/3600 + 0,83$ $\dot{m}_{in}(t') = -0,0782t'^3 + 0,2423t'^2 - 0,2237t' + 0,0728$; $t < 1908$ s $\dot{m}_{in} = 0,02$; $t > 1908$ s (t en s)		

Table 20 : Paramètres du modèle système pour la simulation de l'essai de charge en pression fixe

Annexe 5 – Condition aux limites à la paroi interne du tube pour les calculs CFD de charge du module prototype

Dans le chapitre V, deux calculs CFD de fusion dans le module de stockage prototype sont effectués avec des conditions représentatives respectivement d'une charge en pression glissante et d'une charge en pression fixe. Cette annexe détaille les conditions aux limites fixées à la paroi interne du tube pour les deux calculs.

Pour le calcul de charge en pression glissante, la température de la paroi interne est uniforme le long des tubes, le niveau d'eau étant dans le bas des tubes pendant tout l'essai expérimental qui sert de référence à ce calcul, et augmente au cours du temps. Son évolution temporelle est déterminée à l'aide des mesures de températures effectuées à la paroi externe des tubes. Le tube ayant une faible résistance thermique du fait de la forte conductivité thermique de l'acier, la température est supposée être la même à la paroi interne et à la paroi externe du tube ; la température mesurée à la paroi externe est ainsi fixée à la paroi interne. La température de paroi mesurée expérimentalement est représentée Figure 120, avec le polynôme de degré 5 utilisé pour ajuster cette température pour le modèle CFD ; ce polynôme est le suivant :

$$T_p(t) = 0.0657651t'^5 - 1.79098t'^4 + 18.9319t'^3 - 97.3996t'^2 + 247.041t + 63.7437 \quad (151)$$

$$t' = \frac{t}{3600} + 1,4546$$

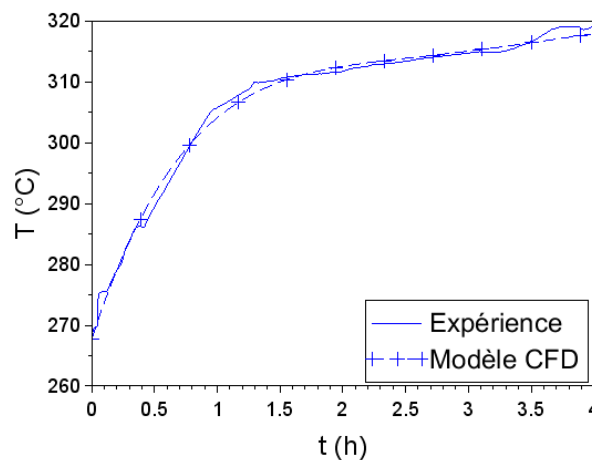


Figure 120 : Température du tube lors de l'essai de charge en pression glissante

Pour le calcul de charge en pression fixe, le niveau d'eau dans les tubes se déplace du haut vers le bas au cours du temps. Au-dessus du niveau d'eau, le fluide caloporteur est diphasique : la température est uniforme et le coefficient d'échange intérieur tube est élevé. En-dessous du niveau d'eau, le fluide caloporteur est monophasique (eau liquide pure) : la température décroît de haut en bas (sens de l'écoulement), et le coefficient d'échange intérieur tube est moins élevé. Le calcul effectué simule la fusion entre les niveaux 2 et 3 du module prototype (c'est-à-dire entre les altitudes $z = 720$ mm et $z = 1260$ mm).

Pour le calcul CFD, la condition aux limites à la paroi interne du tube doit rendre compte de ces différentes conditions à l'intérieur du tube selon l'altitude considérée. Une condition aux limites d'échange convectif est fixée ; dans une cellule de maillage adjacente à la paroi, de température $T_{cellule}$,

le flux de chaleur à la paroi s'exprime de la manière suivante :

$$\varphi_p = \alpha_{calo}(T_{calo} - T_{cellule}) \quad (152)$$

La température du fluide caloporteur T_{calo} et le coefficient d'échange intérieur tube α_{calo} sont déterminés à chaque instant et dans chaque cellule adjacente à la paroi, à partir des mesures de température effectuées expérimentalement dans le fluide caloporteur aux niveaux 2 et 3 (extrémités du domaine de calcul) ; ces températures sont notées T_{v2} et T_{v3} . Les deux profils de température mesurés expérimentalement ont été ajustés à l'aide de polynômes de degré 5, montrés dans la Table 21. Les profils expérimentaux et ajustés sont représentés Figure 121.

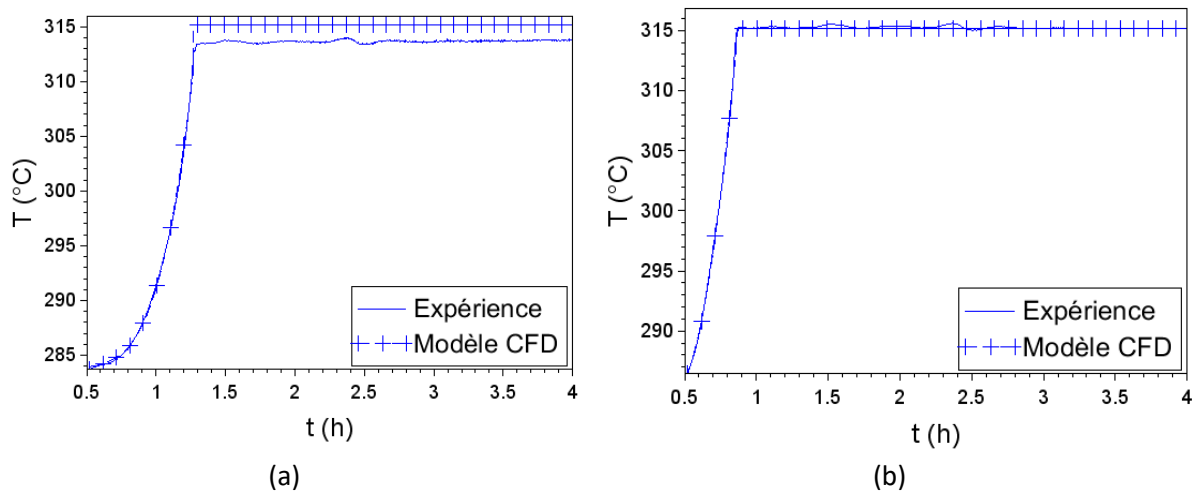


Figure 121 : Evolution dans le temps de la température de vapeur aux niveaux 2 et 3
(a) : Niveau 2 ; (b) : Niveau 3

Niveau 2	Niveau 3
$t' = \frac{t}{3600} + 1.3494$ $T_{v2}(t') = 81.372t'^3 - 350.84t'^2 + 509.3t' + 35.299$ (t en s)	$t' = \frac{t}{3600} + 1.3494$ $T_{v3}(t') = 143.2t'^2 - 355.32t' + 505.15$ (t en s)

Table 21 : Polynômes modélisant l'évolution de la température de l'eau liquide aux niveaux 2 et 3, avant que le niveau liquide ne les atteigne

On note t_{v2} et t_{v3} les instants auxquels le niveau d'eau franchit les niveaux 2 et 3, et t_{p23} l'instant où le niveau franchit la hauteur moyenne du domaine de calcul ($z = 990$ mm), détectable expérimentalement grâce au thermocouple placé à la paroi externe du tube central à cette altitude. La procédure pour déterminer T_{calo} et α_{calo} à partir de ces instants et des profils de température T_{v2} et T_{v3} , à un instant et pour une cellule donnés, est la suivante :

1. Si le niveau d'eau est au-dessus du niveau 3 à l'instant considéré ($t < t_{v3}$), tout le fluide caloporteur contenu entre les niveaux 2 et 3 est alors sous forme d'eau liquide.
 - a. La valeur de T_{calo} est interpolée sur la hauteur entre les valeurs de T_{v2} et T_{v3} à l'instant considéré :

$$T_{calo}(z, t) = \left(1 - \frac{z}{Z}\right)T_{v2}(t) + \frac{z}{Z}T_{v3}(t) \quad (153)$$

avec $Z = 0,54\text{m}$ la distance séparant les niveaux 2 et 3.

- b. α_{calo} est calculé à l'aide des corrélations présentées en annexe 1 pour l'écoulement d'un fluide monophasique dans une conduite

2. Si le niveau liquide est entre le niveau 3 et la position du thermocouple de paroi au milieu du domaine ($t_{v3} < t < t_{p23}$) :

- a. La position z_{niv} du niveau est déterminée en supposant qu'il avance à vitesse constante entre l'instant t_{v3} où il passe le niveau 3, et l'instant t_{p23} où il passe la position du thermocouple de paroi :

$$z_{niv}(t) = Z \left(1 - \frac{1}{2} * \frac{t - t_{v3}}{t_{p23} - t_{v3}} \right) \quad (154)$$

- b. Pour $z < z_{niv}$ (eau liquide pure), la température est interpolée sur la hauteur entre T_{v2} et la température de saturation, $T_{sat} = 315^\circ\text{C}$:

$$T_{calo}(z, t) = \left(1 - \frac{z}{z_{niv}(t)} \right) T_{v2}(t) + \frac{z}{z_{niv}(t)} T_{sat} \quad (155)$$

α_{calo} est calculé à l'aide des corrélations pour un écoulement monophasique de l'annexe 1.

- c. Pour $z > z_{niv}$ (fluide diphasique en condensation), on fixe $T_{calo}(z, t) = T_{sat} = 315^\circ\text{C}$, et $\alpha_{calo} = 10^6 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$.

3. Si le niveau liquide est entre la position du thermocouple de paroi au milieu du domaine, et le niveau 2 ($t_{p23} < t < t_{v2}$) :

- a. La position z_{niv} du niveau est déterminée comme précédemment, en supposant qu'il avance à vitesse constante entre l'instant t_{p23} , et l'instant t_{v2} où il passe le niveau 2 :

$$z_{niv}(t) = \frac{Z}{2} \left(1 - \frac{t - t_{p23}}{t_{v2} - t_{p23}} \right) \quad (156)$$

- b. T_{calo} et α_{calo} sont déterminés comme dans les étapes 2.b et 2.c, selon que la cellule de maillage considérée se trouve en-dessous (eau liquide pure) ou au-dessus (fluide diphasique) du niveau liquide.

4. Si le niveau liquide a dépassé le niveau 2 ($t > t_{v2}$), tout le fluide caloporteur est diphasique entre les niveaux 2 et 3. On prend alors $T_{calo} = T_{sat} = 315^\circ\text{C}$ et $\alpha_{calo} = 10^6 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ uniformément.

MODÉLISATION MULTI-ÉCHELLES D'UN SYSTÈME DE STOCKAGE THERMIQUE DE VAPEUR PAR
MATÉRIAU A CHANGEMENT DE PHASE (MCP)

Clément BEUST - 2019

Références bibliographiques

- [1] “Changements climatiques 2014 - Rapport de synthèse,” GIEC, 2015.
- [2] “Loi de transition énergétique pour la croissance verte,” *Ministère de la Transition écologique et solidaire*. [Online]. Available: <http://www.ecologique-solidaire.gouv.fr/loi-transition-energetique-croissance-verte>. [Accessed: 20-Aug-2019].
- [3] “Plan climat,” *Ministère de la Transition écologique et solidaire*. [Online]. Available: <https://www.ecologique-solidaire.gouv.fr/politiques/plan-climat>. [Accessed: 20-Aug-2019].
- [4] “Annual Report 2018 - IEA-ECES TCP,” IEA - ECES TCP, Jul. 2019.
- [5] “Étude de valorisation du stockage thermique et du power-to-heat,” ADEME, ATEE, ENEA, Artelys, Nov. 2016.
- [6] “Energie fatale : de la récupération à la revalorisation,” *EDF France*, 12-Jun-2018. [Online]. Available: <https://www.edf.fr/entreprises/le-mag/le-mag-entreprises/conseils-energie-competitivite/energie-fatale-de-la-recuperation-a-la-revalorisation>. [Accessed: 27-Aug-2019].
- [7] K. Attonaty, P. Stouffs, J. Pouvreau, J. Oriol, and A. Deydier, “Thermodynamic analysis of a 200 MWh electricity storage system based on high temperature thermal energy storage,” *Energy*, vol. 172, pp. 1132–1143, Apr. 2019.
- [8] H. Mehling and L. F. Cabeza, *Heat and cold storage with PCM: an up to date introduction into basics and applications ; with 28 tables*. Berlin: Springer, 2008.
- [9] A. Gil *et al.*, “State of the art on high temperature thermal energy storage for power generation. Part 1—Concepts, materials and modellization,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 14, no. 1, pp. 31–55, Jan. 2010.
- [10] “Le réseau vapeur et condensats,” Service Public de Wallonie, Sep. 2010.
- [11] A. Biglia, L. Comba, E. Fabrizio, P. Gay, and D. Ricauda Aimonino, “Steam batch thermal processes in unsteady state conditions: Modelling and application to a case study in the food industry,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 118, pp. 638–651, May 2017.
- [12] J. H. Carr, P. J. Hurley, and P. J. Martin, “Applications of thermal energy storage to process heat storage and recovery in the paper and pulp industry,” U.S. Department of Energy, Sep. 1978.
- [13] V. D. Stevanovic, B. Maslovaric, and S. Prica, “Dynamics of steam accumulation,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 37, pp. 73–79, May 2012.
- [14] D. A. Shnaider, P. N. Divnich, and I. E. Vakhromeev, “Modeling the dynamic mode of steam accumulator,” *Autom Remote Control*, vol. 71, no. 9, pp. 1994–1998, Sep. 2010.
- [15] “Applications of Thermal Energy Storage in the Energy Transition: Benchmarks and Developments,” IEA-ECES Annex 30, Sep. 2018.
- [16] “Etude des potentiels de production et de valorisation de chaleur fatale en Ile-de-France,” ADEME, Oct. 2017.
- [17] M. Medrano, A. Gil, I. Martorell, X. Potau, and L. F. Cabeza, “State of the art on high-temperature thermal energy storage for power generation. Part 2—Case studies,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 14, no. 1, pp. 56–72, Jan. 2010.
- [18] A. Fernández-García, E. Zarza, L. Valenzuela, and M. Pérez, “Parabolic-trough solar collectors and their applications,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 14, no. 7, pp. 1695–1721, Sep. 2010.
- [19] P. Garcia, V. Vuillerme, M. Olcese, and N. El Mouchid, “Design and modelling of an innovative three-stage thermal storage system for direct steam generation CSP plants,” *AIP Conference Proceedings*, vol. 1734, p. 050015, 2016.

- [20] A. Caron-Soupart, J.-F. Fourmigué, P. Marty, and R. Couturier, "Performance analysis of thermal energy storage systems using phase change material," *Applied Thermal Engineering*, vol. 98, pp. 1286–1296, Apr. 2016.
- [21] M. Johnson, J. Vogel, M. Hempel, B. Hachmann, and A. Dengel, "Design of high temperature thermal energy storage for high power levels," *Sustainable Cities and Society*, vol. 35, no. Supplement C, pp. 758–763, Nov. 2017.
- [22] P. Garcia, M. Olcese, and S. Rougé, "Experimental and Numerical Investigation of a Pilot Scale Latent Heat Thermal Energy Storage for CSP Power Plant," *Energy Procedia*, vol. 69, pp. 842–849, May 2015.
- [23] M. Lacroix, "Numerical simulation of a shell-and-tube latent heat thermal energy storage unit," *Solar Energy*, vol. 50, no. 4, pp. 357–367, Apr. 1993.
- [24] H. A. Adine and H. El Qarnia, "Numerical analysis of the thermal behaviour of a shell-and-tube heat storage unit using phase change materials," *Applied Mathematical Modelling*, vol. 33, no. 4, pp. 2132–2144, Apr. 2009.
- [25] W.-W. Wang, L.-B. Wang, and Y.-L. He, "The energy efficiency ratio of heat storage in one shell-and-one tube phase change thermal energy storage unit," *Applied Energy*, vol. 138, pp. 169–182, Jan. 2015.
- [26] R. Waser *et al.*, "Fast and experimentally validated model of a latent thermal energy storage device for system level simulations," *Applied Energy*, vol. 231, pp. 116–126, Dec. 2018.
- [27] H. A. Zondag, R. de Boer, S. F. Smeding, and J. van der Kamp, "Performance analysis of industrial PCM heat storage lab prototype," *Journal of Energy Storage*, vol. 18, pp. 402–413, Aug. 2018.
- [28] S. S. Mostafavi Tehrani, Y. Shoraka, G. Diarce, and R. A. Taylor, "An improved, generalized effective thermal conductivity method for rapid design of high temperature shell-and-tube latent heat thermal energy storage systems," *Renewable Energy*, vol. 132, pp. 694–708, Mar. 2019.
- [29] K. Yang, N. Zhu, C. Chang, H. Yu, and S. Yang, "Numerical analysis of phase-change material melting in triplex tube heat exchanger," *Renewable Energy*, vol. 145, pp. 867–877, Jan. 2020.
- [30] B. Fortunato, S. M. Camporeale, M. Torresi, and M. Albano, "Simple Mathematical Model of a Thermal Storage with PCM," *AASRI Procedia*, vol. 2, pp. 241–248, Jan. 2012.
- [31] X. Ju, C. Xu, X. Li, X. Du, and Y. Yang, "Numerical analysis of thermal storage performance with high-temperature phase change materials operated by condensing steam," *Solar Energy*, vol. 117, pp. 213–223, Jul. 2015.
- [32] W.-D. Steinmann and M. Eck, "Buffer storage for direct steam generation," *Solar Energy*, vol. 80, no. 10, pp. 1277–1282, Oct. 2006.
- [33] J. Buschle, W.-D. Steinmann, and R. Tamme, "Latent heat storage for process heat applications," in *The Tenth International Conference on Thermal Energy Storage, Atlantic City, New Jersey*, 2006, vol. 31.
- [34] W.-D. Steinmann, "Thermal energy storage systems for concentrating solar power (CSP) technology," in *Advances in Thermal Energy Storage Systems*, Elsevier, 2015, pp. 511–531.
- [35] R. Osuna *et al.*, "PS10, Construction of a 11MW Solar Thermal Tower Plant in Seville, Spain," in *13th International Symposium on Concentrated Solar Power and Chemical Energy Technologies*, Seville (Spain), 2006.
- [36] "Concentrating Solar Power Projects - Khi Solar One | Concentrating Solar Power | NREL." [Online]. Available: https://www.nrel.gov/csp/solarpaces/project_detail.cfm/projectID=244. [Accessed: 19-May-2017].

- [37] V. Samson Packiaraj Raphael, R. Velraj, and P. Jalihal, "Transient analysis of steam accumulator integrated with solar based MED-TVC system," *Desalination*, vol. 435, pp. 3–22, Jun. 2018.
- [38] M. Berger, M. Meyer-Grünefeldt, D. Krüger, K. Hennecke, M. Mokhtar, and C. Zahler, "First Year of Operational Experience with a Solar Process Steam system for a Pharmaceutical Company in Jordan," *Energy Procedia*, vol. 91, pp. 591–600, Jun. 2016.
- [39] J. M. Holassian, "Khi Solar One project overview and economic analysis," Universidad de Oviedo, Jul. 2015.
- [40] D. Laing, C. Bahl, T. Bauer, D. Lehmann, and W.-D. Steinmann, "Thermal energy storage for direct steam generation," *Solar Energy*, vol. 85, no. 4, pp. 627–633, Apr. 2011.
- [41] E. González-Roubaud, D. Pérez-Osorio, and C. Prieto, "Review of commercial thermal energy storage in concentrated solar power plants: Steam vs. molten salts," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 80, pp. 133–148, Dec. 2017.
- [42] C. Prieto, A. Rodríguez, D. Patiño, and L. F. Cabeza, "Thermal energy storage evaluation in direct steam generation solar plants," *Solar Energy*, vol. 159, pp. 501–509, Jan. 2018.
- [43] "Torresol Energy - Gemasolar thermosolar plant." [Online]. Available: <http://torresolenergy.com/TORRESOL/gemasolar.html?swlang=en>. [Accessed: 25-Sep-2017].
- [44] "Concentrating Solar Power Projects - Andasol-1 | Concentrating Solar Power | NREL." [Online]. Available: https://www.nrel.gov/csp/solarpaces/project_detail.cfm/projectID=3. [Accessed: 25-Sep-2017].
- [45] "SOLANA," *Energy.gov*. [Online]. Available: <https://www.energy.gov/lpo/solana>. [Accessed: 02-Sep-2019].
- [46] R. Tamme, T. Bauer, J. Buschle, D. Laing, H. Müller-Steinhagen, and W.-D. Steinmann, "Latent heat storage above 120°C for applications in the industrial process heat sector and solar power generation," *International Journal of Energy Research*, vol. 32, no. 3, pp. 264–271, Mar. 2008.
- [47] G. Beckmann and P. V. Gilli, *Thermal energy storage: basics, design, applications to power generation and heat supply*. Wien: Springer, 1984.
- [48] L. Willwerth *et al.*, "Steam drum design for direct steam generation," *AIP Conference Proceedings*, vol. 1850, p. 020017, 2017.
- [49] R. Olavarria Rodriguez-Arango, E. Garcia Ramirez, and J. Barragan Jinemez, "System and method for accumulating steam in tanks for solar use," Brevet, WO 2010/146200 A1, 23-Dec-2010.
- [50] "Appontage et Catapultage." [Online]. Available: <http://www.netmarine.net/bat/porteavi/foch/catapu/>. [Accessed: 24-May-2017].
- [51] B. Sun, J. Guo, Y. Lei, L. Yang, Y. Li, and G. Zhang, "Simulation and verification of a non-equilibrium thermodynamic model for a steam catapult's steam accumulator," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 85, pp. 88–97, Jun. 2015.
- [52] D. Laing, T. Bauer, N. Breidenbach, B. Hachmann, and M. Johnson, "Development of high temperature phase-change-material storages," *Applied Energy*, vol. 109, pp. 497–504, Sep. 2013.
- [53] R. Bayón, E. Rojas, L. Valenzuela, E. Zarza, and J. León, "Analysis of the experimental behaviour of a 100 kWth latent heat storage system for direct steam generation in solar thermal power plants," *Applied Thermal Engineering*, vol. 30, no. 17–18, pp. 2643–2651, Dec. 2010.
- [54] K. Nithyanandam, J. Stekli, and R. Pitchumani, "10 - High-temperature latent heat storage for concentrating solar thermal (CST) systems," in *Advances in Concentrating Solar Thermal Research and Technology*, M. J. Blanco and L. R. Santigosa, Eds. Woodhead Publishing, 2017, pp. 213–246.

- [55] M. Seitz, P. Cetin, and M. Eck, "Thermal Storage Concept for Solar Thermal Power Plants with Direct Steam Generation," *Energy Procedia*, vol. 49, pp. 993–1002, 2014.
- [56] T. Pirasaci and D. Y. Goswami, "Influence of design on performance of a latent heat storage system for a direct steam generation power plant," *Applied Energy*, vol. 162, pp. 644–652, Jan. 2016.
- [57] H. Michels and R. Pitz-Paal, "Cascaded latent heat storage for parabolic trough solar power plants," *Solar Energy*, vol. 81, no. 6, pp. 829–837, Jun. 2007.
- [58] T. Watanabe, H. Kikuchi, and A. Kanzawa, "Enhancement of charging and discharging rates in a latent heat storage system by use of PCM with different melting temperatures," *Heat Recovery Systems and CHP*, vol. 13, no. 1, pp. 57–66, Jan. 1993.
- [59] M. Johnson, J. Vogel, M. Hempel, A. Dengel, M. Seitz, and B. Hachmann, "High Temperature Latent Heat Thermal Energy Storage Integration in a Co-gen Plant," 2015.
- [60] M. Johnson, A. Dengel, B. Hachmann, M. Fiß, and D. Bauer, "Large-scale high temperature and power latent heat storage unit development," *AIP Conference Proceedings*, vol. 2126, no. 1, p. 200023, Jul. 2019.
- [61] L. Willwerth *et al.*, "Commissioning and tests of a mini CSP plant," in *AIP Conference Proceedings*, 2018, vol. 2033, p. 180012.
- [62] W.-D. Steinmann and R. Tamme, "Latent heat storage for solar steam systems," *Journal of Solar Energy Engineering, Transactions of the ASME*, vol. 130, no. 1, p. 011004, 2008.
- [63] R. Guédez, M. Arnaudo, M. Topel, R. Zanino, Z. Hassar, and B. Laumert, "Techno-economic performance evaluation of direct steam generation solar tower plants with thermal energy storage systems based on high-temperature concrete and encapsulated phase change materials," presented at the AIP Conference Proceedings, 2016, vol. 1734.
- [64] M. M. Weislogel and J. N. Chung, "Experimental investigation of condensation heat transfer in small arrays of PCM-filled spheres," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 34, no. 1, pp. 31–45, Jan. 1991.
- [65] S. Pincemin, R. Olives, X. Py, and M. Christ, "Highly conductive composites made of phase change materials and graphite for thermal storage," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 92, no. 6, pp. 603–613, Jun. 2008.
- [66] T. Bauer, R. Tamme, M. Christ, and O. Ottinger, "PCM-graphite composites for high temperature thermal energy storage," in *Proc. of ECOSTOCK, 10th International Conference on Thermal Energy Storage, Stockton, USA*, 2006.
- [67] K. S. do Couto Aktay, R. Tamme, and H. Müller-Steinhagen, "Thermal Conductivity of High-Temperature Multicomponent Materials with Phase Change," *Int J Thermophys*, vol. 29, no. 2, pp. 678–692, Apr. 2008.
- [68] R. Adinberg, D. Zvegilsky, and M. Epstein, "Heat transfer efficient thermal energy storage for steam generation," *Energy Conversion and Management*, vol. 51, no. 1, pp. 9–15, Jan. 2010.
- [69] V. Zipf, A. Neuhäuser, D. Willert, P. Nitz, S. Gschwander, and W. Platzler, "High temperature latent heat storage with a screw heat exchanger: Design of prototype," *Applied Energy*, vol. 109, pp. 462–469, Sep. 2013.
- [70] V. Zipf, A. Neuhäuser, C. Bachelier, R. Leithner, and W. Platzler, "Assessment of Different PCM Storage Configurations in a 50 MWel CSP Plant with Screw Heat Exchangers in a Combined Sensible and Latent Storage - Simulation Results," presented at the Energy Procedia, 2015, vol. 69, pp. 1078–1088.
- [71] V. Zipf, D. Willert, and A. Neuhäuser, "Active latent heat storage with a screw heat exchanger - Experimental results for heat transfer and concept for high pressure steam," presented at the AIP Conference Proceedings, 2016, vol. 1734.

- [72] H. Pointner, W.-D. Steinmann, and M. Eck, "Introduction of the PCM Flux Concept for Latent Heat Storage," *Energy Procedia*, vol. 57, pp. 643–652, Jan. 2014.
- [73] H. Pointner, W. D. Steinmann, M. Eck, and C. Bachelier, "Separation of Power and Capacity in Latent Heat Energy Storage," *Energy Procedia*, vol. 69, pp. 997–1005, May 2015.
- [74] H. Pointner and W.-D. Steinmann, "Experimental demonstration of an active latent heat storage concept," *Applied Energy*, vol. 168, pp. 661–671, Apr. 2016.
- [75] N. Provatas, N. Goldenfeld, and J. Dantzig, "Adaptive Mesh Refinement Computation of Solidification Microstructures Using Dynamic Data Structures," *Journal of Computational Physics*, vol. 148, no. 1, pp. 265–290, Jan. 1999.
- [76] N. Palle and J. A. Dantzig, "An adaptive mesh refinement scheme for solidification problems," *MMTA*, vol. 27, no. 3, pp. 707–717, Mar. 1996.
- [77] S. R. Idelsohn, M. A. Storti, and L. A. Crivelli, "Numerical methods in phase-change problems," *ARCO*, vol. 1, no. 1, pp. 49–74, Mar. 1994.
- [78] S. Jana, S. Ray, and F. Durst, "A numerical method to compute solidification and melting processes," *Applied Mathematical Modelling*, vol. 31, no. 1, pp. 93–119, Jan. 2007.
- [79] J. A. Mackenzie and M. L. Robertson, "The Numerical Solution of One-Dimensional Phase Change Problems Using an Adaptive Moving Mesh Method," *Journal of Computational Physics*, vol. 161, no. 2, pp. 537–557, Jul. 2000.
- [80] J. A. Mackenzie and M. L. Robertson, "A Moving Mesh Method for the Solution of the One-Dimensional Phase-Field Equations," *Journal of Computational Physics*, vol. 181, no. 2, pp. 526–544, Sep. 2002.
- [81] G. Beckett, J. A. Mackenzie, and M. L. Robertson, "A Moving Mesh Finite Element Method for the Solution of Two-Dimensional Stefan Problems," *Journal of Computational Physics*, vol. 168, no. 2, pp. 500–518, Apr. 2001.
- [82] G. Tryggvason *et al.*, "A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow," *Journal of Computational Physics*, vol. 169, no. 2, pp. 708–759, May 2001.
- [83] C.-Y. Li, S. V. Garimella, and J. E. Simpson, "Fixed-grid front-tracking algorithm for solidification problems, part I: Method and validation," *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, vol. 43, no. 2, pp. 117–141, 2003.
- [84] C.-Y. Li, S. V. Garimella, and J. E. Simpson, "Fixed-grid front-tracking algorithm for solidification problems, part II: directional solidification with melt convection," *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, vol. 43, no. 2, pp. 143–166, 2003.
- [85] L. Klimeš, T. Mauder, P. Charvát, and J. Štětina, "Front tracking in modelling of latent heat thermal energy storage: Assessment of accuracy and efficiency, benchmarking and GPU-based acceleration," *Energy*, vol. 155, pp. 297–311, Jul. 2018.
- [86] E. Javierre, C. Vuik, F. J. Vermolen, and S. van der Zwaag, "A comparison of numerical models for one-dimensional Stefan problems," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 192, no. 2, pp. 445–459, Aug. 2006.
- [87] F. Gibou, R. Fedkiw, R. Caflisch, and S. Osher, "A Level Set Approach for the Numerical Simulation of Dendritic Growth," *Journal of Scientific Computing*, vol. 19, no. 1–3, pp. 183–199, Dec. 2003.
- [88] L. Tan and N. Zabarar, "A level set simulation of dendritic solidification with combined features of front-tracking and fixed-domain methods," *Journal of Computational Physics*, vol. 211, no. 1, pp. 36–63, Jan. 2006.
- [89] S. Chen, B. Merriman, S. Osher, and P. Smereka, "A Simple Level Set Method for Solving Stefan Problems," *Journal of Computational Physics*, vol. 135, no. 1, pp. 8–29, Jul. 1997.
- [90] J. López, P. Gómez, and J. Hernández, "A volume of fluid approach for crystal growth simulation," *Journal of Computational Physics*, vol. 229, no. 19, pp. 6663–6672, Sep. 2010.

- [91] S. Karagadde, A. Bhattacharya, G. Tomar, and P. Dutta, "A coupled VOF-IBM-enthalpy approach for modeling motion and growth of equiaxed dendrites in a solidifying melt," *Journal of Computational Physics*, vol. 231, no. 10, pp. 3987–4000, May 2012.
- [92] M. Fabbri and V. R. Voller, "The Phase-Field Method in the Sharp-Interface Limit: A Comparison between Model Potentials," *Journal of Computational Physics*, vol. 130, no. 2, pp. 256–265, Jan. 1997.
- [93] J. Ni and C. Beckermann, "A volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification," *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 22, no. 3, pp. 349–361, 1991.
- [94] P. Bousquet-Melou, B. Goyeau, M. Quintard, F. Fichot, and D. Gobin, "Average momentum equation for interdendritic flow in a solidifying columnar mushy zone," *International journal of heat and mass transfer*, vol. 45, no. 17, pp. 3651–3665, 2002.
- [95] W. D. Bennon and F. P. Incropera, "A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems—I. Model formulation," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 30, no. 10, pp. 2161–2170, 1987.
- [96] Z. Ma and Y. Zhang, "Solid velocity correction schemes for a temperature transforming model for convection phase change," *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, vol. 16, no. 2, pp. 204–225, 2006.
- [97] V. R. Voller, M. Cross, and N. C. Markatos, "An enthalpy method for convection/diffusion phase change," *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, vol. 24, no. 1, pp. 271–284, Jan. 1987.
- [98] D. K. Gartling, "Finite element analysis of convective heat transfer problems with change of phase," presented at the Numer Methods in Laminar and Turbul Flow, Swansea, Wales, 1978, pp. 489–500.
- [99] V. R. Voller and C. Prakash, "A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 30, no. 8, pp. 1709–1719, Aug. 1987.
- [100] R. Mehrabian, M. Keane, and M. C. Flemings, "Interdendritic fluid flow and macrosegregation; influence of gravity," *Metall and Materi Trans*, vol. 1, no. 5, pp. 1209–1220, May 1970.
- [101] L. Clavier, E. Arquis, J. P. Caltagirone, and D. Gobin, "A fixed grid method for the numerical solution of phase change problems," *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, vol. 37, no. 24, pp. 4247–4261, Dec. 1994.
- [102] V. Voller and M. Cross, "Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 24, no. 3, pp. 545–556, Mar. 1981.
- [103] Z.-X. Gong, S. Devahastin, and A. S. Mujumdar, "Enhanced heat transfer in free convection-dominated melting in a rectangular cavity with an isothermal vertical wall," *Applied Thermal Engineering*, vol. 19, no. 12, pp. 1237–1251, Dec. 1999.
- [104] S. Gibout, E. Franquet, J.-P. Bédécarrats, and J.-P. Dumas, "Comparison of different modelings of pure substances during melting in a DSC experiment," *Thermochimica Acta*, vol. 528, pp. 1–8, Jan. 2012.
- [105] S. Gibout, E. Franquet, W. Maréchal, and J.-P. Dumas, "On the use of a reduced model for the simulation of melting of solutions in DSC experiments," *Thermochimica Acta*, vol. 566, pp. 118–123, Aug. 2013.
- [106] A. Bhattacharya, A. Kiran, S. Karagadde, and P. Dutta, "An enthalpy method for modeling eutectic solidification," *Journal of Computational Physics*, vol. 262, pp. 217–230, Apr. 2014.
- [107] E. Feulvarch and J.-M. Bergheau, "An Implicit Fixed-Grid Method for the Finite-Element Analysis of Heat Transfer Involving Phase Changes," *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, vol. 51, no. 6, pp. 585–610, Apr. 2007.

- [108] S. L. Lee and R. y. Tzong, "An enthalpy formulation for phase change problems with a large thermal diffusivity jump across the interface," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 34, no. 6, pp. 1491–1502, Jun. 1991.
- [109] F. Rösler and D. Brüggemann, "Shell-and-tube type latent heat thermal energy storage: numerical analysis and comparison with experiments," *Heat and Mass Transfer*, vol. 47, no. 8, pp. 1027–1033, Aug. 2011.
- [110] T. W. Clyne and W. Kurz, "Solute redistribution during solidification with rapid solid state diffusion," *MTA*, vol. 12, no. 6, pp. 965–971, Jun. 1981.
- [111] "ANSYS Fluent Theory Guide Release 17.2." 2016.
- [112] V. R. Voller and C. R. Swaminathan, "General Source-Based Method for Solidification Phase Change," *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, vol. 19, no. 2, pp. 175–189, Jan. 1991.
- [113] M. Salcudean and Z. Abdullah, "On the numerical modelling of heat transfer during solidification processes," *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, vol. 25, no. 2, pp. 445–473, Jun. 1988.
- [114] H. Niyas and P. Muthukumar, "Novel encapsulation technique to upscale latent heat storage capacity in steam accumulators," presented at the ISES Solar World Congress 2015, Conference Proceedings, 2015, pp. 1560–1566.
- [115] M. Iten, S. Liu, and A. Shukla, "Experimental validation of an air-PCM storage unit comparing the effective heat capacity and enthalpy methods through CFD simulations," *Energy*, vol. 155, pp. 495–503, Jul. 2018.
- [116] C. Bonacina, G. Comini, A. Fasano, and M. Primicerio, "Numerical solution of phase-change problems," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 16, no. 10, pp. 1825–1832, Oct. 1973.
- [117] M. Longeon, A. Soupart, J.-F. Fourmigué, A. Bruch, and P. Marty, "Experimental and numerical study of annular PCM storage in the presence of natural convection," *Applied Energy*, vol. 112, pp. 175–184, Dec. 2013.
- [118] D. Poirier and M. Salcudean, "On Numerical Methods Used in Mathematical Modeling of Phase Change in Liquid Metals," *Journal of Heat Transfer*, vol. 110, no. 3, pp. 562–570, 1988.
- [119] J. F. T. Pittman and G. P. Whitham, "Enthalpy gradient methods for capturing latent heat in phase change simulations using biquadratic isoparametric finite elements," *Int Jnl of Num Meth for HFF*, vol. 4, no. 1, pp. 85–94, Jan. 1994.
- [120] G. Comini, S. Del Giudice, R. W. Lewis, and O. C. Zienkiewicz, "Finite element solution of non-linear heat conduction problems with special reference to phase change," *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, vol. 8, no. 3, pp. 613–624, Jan. 1974.
- [121] S. Del Giudice, G. Comini, and R. W. Lewis, "Finite element simulation of freezing processes in soils," *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, vol. 2, no. 3, pp. 223–235, Jul. 1978.
- [122] K. Morgan, R. W. Lewis, and O. C. Zienkiewicz, "An improved algorithm for heat conduction problems with phase change," *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, vol. 12, no. 7, pp. 1191–1195, Jan. 1978.
- [123] N. Hannoun, V. Alexiades, and T. Z. Mai, "Resolving the controversy over tin and gallium melting in a rectangular cavity heated from the side," *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals*, vol. 44, no. 3, pp. 253–276, 2003.
- [124] Y. Cao, A. Faghri, and Won Soon Chang, "A numerical analysis of Stefan problems for generalized multi-dimensional phase-change structures using the enthalpy transforming model," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 32, no. 7, pp. 1289–1298, Jul. 1989.
- [125] V. R. Voller, C. R. Swaminathan, and B. G. Thomas, "Fixed grid techniques for phase change problems: A review," *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, vol. 30, no. 4, pp. 875–898, Sep. 1990.

- [126] Q. T. Pham, "Comparison of general-purpose finite-element methods for the Stefan problem," *Numerical Heat Transfer*, vol. 27, no. 4, pp. 417–435, 1995.
- [127] J. M. Delhaye, M. Giot, and M. L. Riethmuller, *Thermohydraulics of two-phase systems for industrial design and nuclear engineering*. Washington; New York: Hemisphere Pub. Corp. ; McGraw-Hill, 1981.
- [128] D. Bestion and C. Morel, "Balance equations," in *Thermal-Hydraulics of Water Cooled Nuclear Reactors*, Elsevier, 2017, pp. 167–244.
- [129] R. Cundapí, S. L. Moya, and L. Valenzuela, "Approaches to modelling a solar field for direct generation of industrial steam," *Renewable Energy*, vol. 103, pp. 666–681, Apr. 2017.
- [130] B. Epple, R. Leithner, H. Müller, K. Ponweiser, H. Walter, and A. Werner, "Conversion and Transport of Mass, Energy, Momentum, and Materials," in *Numerical Simulation of Power Plants and Firing Systems*, Springer, Vienna, 2017, pp. 17–160.
- [131] Y. Taitel and A. E. Dukler, "A model for predicting flow regime transitions in horizontal and near horizontal gas-liquid flow," *AIChE J.*, vol. 22, no. 1, pp. 47–55, Jan. 1976.
- [132] L. Wojtan, T. Ursenbacher, and J. R. Thome, "Investigation of flow boiling in horizontal tubes: Part I—A new diabatic two-phase flow pattern map," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 48, no. 14, pp. 2955–2969, Jul. 2005.
- [133] A. Frein, L. Pistocchini, V. Tatay, and M. Motta, "Modeling and Sizing of a MW Solar DSG plant," *Energy Procedia*, vol. 91, pp. 620–629, Jun. 2016.
- [134] J. J. Serrano-Aguilera, L. Valenzuela, and L. Parras, "Thermal 3D model for Direct Solar Steam Generation under superheated conditions," *Applied Energy*, vol. 132, pp. 370–382, Nov. 2014.
- [135] T. Hirsch, W.-D. Steinmann, and M. Eck, "Simulation of transient two-phase flow in parabolic trough collectors using Modelica," in *Proceedings of the 4th International Modelica Conference*, 2005.
- [136] F. Escanes, C. D. Pérez-Segarra, and A. Oliva, "Numerical simulation of capillary-tube expansion devices," *International Journal of Refrigeration*, vol. 18, no. 2, pp. 113–122, Feb. 1995.
- [137] O. García-Valladares, C. D. Pérez-Segarra, and J. Rigola, "Numerical simulation of double-pipe condensers and evaporators," *International Journal of Refrigeration*, vol. 27, no. 6, pp. 656–670, Sep. 2004.
- [138] M. Lin, J. Reinhold, N. Monnerie, and S. Haussener, "Modeling and design guidelines for direct steam generation solar receivers," *Applied Energy*, vol. 216, pp. 761–776, Apr. 2018.
- [139] D. Bestion, "The physical closure laws in the CATHARE code," *Nuclear Engineering and Design*, vol. 124, no. 3, pp. 229–245, Dec. 1990.
- [140] F. Alobaid, N. Mertens, R. Starkloff, T. Lanz, C. Heinze, and B. Epple, "Progress in dynamic simulation of thermal power plants," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 59, pp. 79–162, Mar. 2017.
- [141] C. Kim and R. P. Roy, "Two-phase flow dynamics by a five-equation drift-flux model," *Letters in Heat and Mass Transfer*, vol. 8, no. 1, pp. 57–68, Jan. 1981.
- [142] T. Hibiki and M. Ishii, "One-dimensional drift-flux model and constitutive equations for relative motion between phases in various two-phase flow regimes," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 46, no. 25, pp. 4935–4948, Dec. 2003.
- [143] L. Zou, H. Zhao, and H. Zhang, "Numerical implementation, verification and validation of two-phase flow four-equation drift flux model with Jacobian-free Newton–Krylov method," *Annals of Nuclear Energy*, vol. 87, no. Part 2, pp. 707–719, Jan. 2016.
- [144] G. Espinosa-Paredes, J. Alvarez-Ramirez, A. Nuñez-Carrera, A. Garcia-Gutierrez, and E. J. Martinez-Mendez, "Dynamic Comparison of Three- and Four-Equation Reactor Core Models in

- a Full-Scope Power Plant Training Simulator," *Nuclear Technology*, vol. 145, no. 2, pp. 150–162, Feb. 2004.
- [145] R. Berry, L. Zou, H. Zhao, and D. Andrs, "RELAP-7: Demonstrating Seven-Equation, Two-Phase," Idaho National Laboratory (INL), 2013.
- [146] "RELAP-7 - Overview." [Online]. Available: <https://relap7.inl.gov/SitePages/Overview.aspx>. [Accessed: 23-Apr-2018].
- [147] "Apros - Dynamic Process Simulation Software for Nuclear and Thermal Power Plant Applications." [Online]. Available: <http://www.apros.fi/en/>. [Accessed: 23-Apr-2018].
- [148] "The Computer Code ATHLET | GRS - Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH." [Online]. Available: <https://www.grs.de/en/computer-code-athlet>. [Accessed: 23-Apr-2018].
- [149] N. Zuber and J. A. Findlay, "Average Volumetric Concentration in Two-Phase Flow Systems," *J. Heat Transfer*, vol. 87, no. 4, pp. 453–468, Nov. 1965.
- [150] U. Brockmeier, A. Schaffrath, and H. Unger, "Verification of the two-phase stratified-flow model in athlet by separate effect tests," *Nuclear Engineering and Design*, vol. 154, no. 1, pp. 43–50, Feb. 1995.
- [151] G. Xia, Y. Yuan, M. Peng, X. Lv, and L. Sun, "Numerical studies of a helical coil once-through steam generator," *Annals of Nuclear Energy*, vol. 109, pp. 52–60, Nov. 2017.
- [152] J. M. Jensen and H. Tummescheit, "Moving Boundary Models for Dynamic Simulations of Two-Phase Flows," May 2002.
- [153] J. I. Zapata, J. Pye, and K. Lovegrove, "A transient model for the heat exchange in a solar thermal once through cavity receiver," *Solar Energy*, vol. 93, pp. 280–293, Jul. 2013.
- [154] T. L. McKinley and A. G. Alleyne, "An advanced nonlinear switched heat exchanger model for vapor compression cycles using the moving-boundary method," *International Journal of Refrigeration*, vol. 31, no. 7, pp. 1253–1264, Nov. 2008.
- [155] H. Pangborn, A. G. Alleyne, and N. Wu, "A comparison between finite volume and switched moving boundary approaches for dynamic vapor compression system modeling," *International Journal of Refrigeration*, vol. 53, pp. 101–114, May 2015.
- [156] J. Bonilla, S. Dormido, and F. E. Cellier, "Switching moving boundary models for two-phase flow evaporators and condensers," *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, vol. 20, no. 3, pp. 743–768, Mar. 2015.
- [157] M. A. Abdalla, "A four-region, moving-boundary model of a once-through, helical-coil steam generator," *Annals of Nuclear Energy*, vol. 21, no. 9, pp. 541–562, Sep. 1994.
- [158] G. Berry, "Model of a once-through steam generator with moving boundaries and a variable number of nodes," Argonne National Lab., IL (USA), CONF-831111-6, Jan. 1983.
- [159] L. J. Yebra, M. Berenguel, and S. Dormido, "Extended moving boundary models for two-phase flows," *IFAC Proceedings Volumes*, vol. 38, no. 1, pp. 368–373, Jan. 2005.
- [160] A. Crespo, C. Barreneche, M. Ibarra, and W. Platzer, "Latent thermal energy storage for solar process heat applications at medium-high temperatures – A review," *Solar Energy*, Jul. 2018.
- [161] A. Kaizawa *et al.*, "Thermal and flow behaviors in heat transportation container using phase change material," *Energy Conversion and Management*, vol. 49, no. 4, pp. 698–706, Apr. 2008.
- [162] M. Martinelli, F. Bentivoglio, R. Couturier, J.-F. Fourmigué, and P. Marty, "Experimental study of an externally finned tube with internal heat transfer enhancement for phase change thermal energy storage," *J. Phys.: Conf. Ser.*, vol. 745, p. 032029, Sep. 2016.
- [163] P. C. Carman, "Fluid flow through granular beds," *Process Safety and Environmental Protection: Transactions of the Institution of Chemical Engineers, Part B*, vol. 75, no. Suppl, pp. S32–S48, 1997.

- [164] S. F. Hosseinizadeh, A. A. Rabienataj Darzi, F. L. Tan, and J. M. Khodadadi, "Unconstrained melting inside a sphere," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 63, pp. 55–64, Jan. 2013.
- [165] H. Shmueli, G. Ziskind, and R. Letan, "Melting in a vertical cylindrical tube: Numerical investigation and comparison with experiments," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 53, no. 19–20, pp. 4082–4091, Sep. 2010.
- [166] S. Tiari, S. Qiu, and M. Mahdavi, "Numerical study of finned heat pipe-assisted thermal energy storage system with high temperature phase change material," *Energy Conversion and Management*, vol. 89, pp. 833–842, Jan. 2015.
- [167] S. Tiari and S. Qiu, "Three-dimensional simulation of high temperature latent heat thermal energy storage system assisted by finned heat pipes," *Energy Conversion and Management*, vol. 105, pp. 260–271, Nov. 2015.
- [168] E. Assis, L. Katsman, G. Ziskind, and R. Letan, "Numerical and experimental study of melting in a spherical shell," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 50, no. 9–10, pp. 1790–1804, May 2007.
- [169] F. Fornarelli, S. M. Camporeale, and B. Fortunato, "Simplified theoretical model to predict the melting time of a shell-and-tube LHTES," *Applied Thermal Engineering*, vol. 153, pp. 51–57, May 2019.
- [170] J. Yang, X. Du, L. Yang, and Y. Yang, "Numerical analysis on the thermal behavior of high temperature latent heat thermal energy storage system," *Solar Energy*, vol. 98, pp. 543–552, Dec. 2013.
- [171] X. Li, R. Huang, X. Miao, X. Wang, Y. Liu, and X. Zhang, "Investigation of the dynamic characteristics of a thermal energy storage unit filled with multiple phase change materials," *Thermal Science*, vol. 22, no. Suppl. 2, pp. 527–533, 2018.
- [172] I. Jmal and M. Baccar, "Numerical investigation of PCM solidification in a finned rectangular heat exchanger including natural convection," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 127, pp. 714–727, Dec. 2018.
- [173] A. R. Archibold, M. M. Rahman, D. Y. Goswami, and E. K. Stefanakos, "Analysis of heat transfer and fluid flow during melting inside a spherical container for thermal energy storage," *Applied Thermal Engineering*, vol. 64, no. 1–2, pp. 396–407, Mar. 2014.
- [174] A. F. Elmozoughi, L. Solomon, A. Oztekin, and S. Neti, "Encapsulated phase change material for high temperature thermal energy storage – Heat transfer analysis," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 78, pp. 1135–1144, Nov. 2014.
- [175] V. Shatikian, G. Ziskind, and R. Letan, "Numerical investigation of a PCM-based heat sink with internal fins," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 48, no. 17, pp. 3689–3706, Aug. 2005.
- [176] X. Yang, T. Xiong, J. L. Dong, W. X. Li, and Y. Wang, "Investigation of the Dynamic Melting Process in a Thermal Energy Storage Unit Using a Helical Coil Heat Exchanger," *Energies*, vol. 10, no. 8, p. 1129, Aug. 2017.
- [177] A. M. Sefidan, A. Sojoudi, S. C. Saha, and M. Cholette, "Multi-layer PCM solidification in a finned triplex tube considering natural convection," *Applied Thermal Engineering*, vol. 123, pp. 901–916, Aug. 2017.
- [178] M. Augspurger, J. Becker, J. Buchholz, and H. S. Udaykumar, "Three-dimensional numerical and experimental investigation of the behavior of solar salts within thermal storage devices during phase change," *Applied Thermal Engineering*, vol. 143, pp. 791–811, Oct. 2018.
- [179] Z. Khan, Z. Khan, and K. Tabeshf, "Parametric investigations to enhance thermal performance of paraffin through a novel geometrical configuration of shell and tube latent thermal storage system," *Energy Conversion and Management*, vol. 127, pp. 355–365, Nov. 2016.

- [180] E. Assis, G. Ziskind, and R. Letan, "Numerical and experimental study of solidification in a spherical shell," *Journal of Heat Transfer*, vol. 131, no. 2, pp. 1–5, 2009.
- [181] L. Kumar *et al.*, "Experimental investigations on melting of lead in a cuboid with constant heat flux boundary condition using thermal neutron radiography," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 61, pp. 15–27, Nov. 2012.
- [182] C. Chabot and L. Gosselin, "Solid-liquid phase change around a tube with periodic heating and cooling: Scale analysis, numerical simulations and correlations," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 112, pp. 345–357, Feb. 2017.
- [183] O. Ben-David, A. Levy, B. Mikhailovich, and A. Azulay, "3D numerical and experimental study of gallium melting in a rectangular container," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 67, pp. 260–271, Dec. 2013.
- [184] M. Kumar and D. J. Krishna, "Influence of Mushy Zone Constant on Thermohydraulics of a PCM," *Energy Procedia*, vol. 109, pp. 314–321, Mar. 2017.
- [185] M. Hameter and H. Walter, "Influence of the Mushy Zone Constant on the Numerical Simulation of the Melting and Solidification Process of Phase Change Materials," in *Computer Aided Chemical Engineering*, vol. 38, Supplement C vols., Z. Kravanja and M. Bogataj, Eds. Elsevier, 2016, pp. 439–444.
- [186] S. Arena, E. Casti, J. Gasia, L. F. Cabeza, and G. Cau, "Numerical simulation of a finned-tube LHTES system: influence of the mushy zone constant on the phase change behaviour," *Energy Procedia*, vol. 126, no. Supplement C, pp. 517–524, Sep. 2017.
- [187] K. Schüller, B. Berkels, and J. Kowalski, "Integrated Modeling and Validation for Phase Change with Natural Convection," in *Recent Advances in Computational Engineering*, 2018, pp. 127–144.
- [188] S. Gibout, E. Franquet, D. Haillot, J.-P. Bédécarrats, and J.-P. Dumas, "Challenges of the Usual Graphical Methods Used to Characterize Phase Change Materials by Differential Scanning Calorimetry," *Applied Sciences*, vol. 8, no. 1, p. 66, Jan. 2018.
- [189] C. Castellón, E. Günther, H. Mehling, S. Hiebler, and L. F. Cabeza, "Determination of the enthalpy of PCM as a function of temperature using a heat-flux DSC—A study of different measurement procedures and their accuracy," *International Journal of Energy Research*, vol. 32, no. 13, pp. 1258–1265, Jul. 2008.
- [190] E. Günther, S. Hiebler, H. Mehling, and R. Redlich, "Enthalpy of Phase Change Materials as a Function of Temperature: Required Accuracy and Suitable Measurement Methods," *Int J Thermophys*, vol. 30, no. 4, pp. 1257–1269, Aug. 2009.
- [191] A. C. Kheirabadi and D. Groulx, "The Effect of the Mushy-Zone Constant on Simulated Phase Change Heat Transfer," in *Proceedings of CHT-15*, Rutgers University, Piscataway, USA, 2015.
- [192] C. Gau and R. Viskanta, "Melting and Solidification of a Pure Metal on a Vertical Wall," *J. Heat Transf.-Trans. ASME*, vol. 108, no. 1, pp. 174–181, Feb. 1986.
- [193] "Rubitherm GmbH." [Online]. Available: <http://www.rubitherm.eu/en/>. [Accessed: 21-Dec-2017].
- [194] C. Gau and R. Viskanta, "Effect of natural convection on solidification from above and melting from below of a pure metal," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 28, no. 3, pp. 573–587, Mar. 1985.
- [195] H. O. Baled *et al.*, "Viscosity of n-hexadecane, n-octadecane and n-eicosane at pressures up to 243MPa and temperatures up to 534K," *The Journal of Chemical Thermodynamics*, vol. 72, no. Supplement C, pp. 108–116, May 2014.
- [196] C. Vélez, M. Khayet, and J. M. Ortiz de Zárate, "Temperature-dependent thermal properties of solid/liquid phase change even-numbered n-alkanes: n-Hexadecane, n-octadecane and n-eicosane," *Applied Energy*, vol. 143, no. Supplement C, pp. 383–394, Apr. 2015.

- [197] S. Himran, A. Suwono, and G. A. Mansoori, "Characterization of alkanes and paraffin waxes for application as phase change energy storage medium," *Energy Sources*, vol. 16, no. 1, pp. 117–128, 1994.
- [198] A. Genovese, G. Amarasinghe, M. Glewis, D. Mainwaring, and R. A. Shanks, "Crystallisation, melting, recrystallisation and polymorphism of n-eicosane for application as a phase change material," *Thermochimica Acta*, vol. 443, no. 2, pp. 235–244, Apr. 2006.
- [199] J. A. González, M. Zawadzki, and U. Domanska, "Thermodynamics of mixtures containing polycyclic aromatic hydrocarbons," *Journal of Molecular Liquids*, vol. 143, no. 2, pp. 134–140, Oct. 2008.
- [200] P. Zhang, Z. W. Ma, and R. Z. Wang, "An overview of phase change material slurries: MPCs and CHS," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 14, no. 2, pp. 598–614, Feb. 2010.
- [201] "WebBook de Chimie NIST." [Online]. Available: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>. [Accessed: 21-Dec-2017].
- [202] "Fournisseur de Matériaux pour la Recherche et le Développement - Goodfellow." [Online]. Available: <http://www.goodfellow.com/fr/>. [Accessed: 21-Dec-2017].
- [203] "Online Materials Information Resource - MatWeb." [Online]. Available: <http://www.matweb.com/>. [Accessed: 21-Dec-2017].
- [204] "GraphClick - Graph and Movie Digitizer for Mac OS X - Free Download." [Online]. Available: <http://www.arizona-software.ch/graphclick/>. [Accessed: 30-Aug-2018].
- [205] F. Jiang, X. Wang, and D. Wu, "Design and synthesis of magnetic microcapsules based on n-eicosane core and Fe₃O₄/SiO₂ hybrid shell for dual-functional phase change materials," *Applied Energy*, vol. 134, pp. 456–468, Dec. 2014.
- [206] J. L. Wright, "A Correlation to Quantify Convective Heat Transfer Between Vertical Window Glazings," *ASHRAE Transactions*, vol. 102, Part 1, pp. 940–946, 1996.
- [207] S. W. Churchill and H. H. S. Chu, "Correlating equations for laminar and turbulent free convection from a vertical plate," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 18, no. 11, pp. 1323–1329, Nov. 1975.
- [208] T. Hirata and K. Nishida, "An analysis of heat transfer using equivalent thermal conductivity of liquid phase during melting inside an isothermally heated horizontal cylinder," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 32, no. 9, pp. 1663–1670, Sep. 1989.
- [209] M. A. Woldesemayat and A. J. Ghajar, "Comparison of void fraction correlations for different flow patterns in horizontal and upward inclined pipes," *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 33, no. 4, pp. 347–370, Apr. 2007.
- [210] "IAPWS R7-97(2012): IAPWS-IF97 Industrial Formulation for Thermodynamic Properties of Water and Steam." [Online]. Available: <http://www.iapws.org/relguide/IF97-Rev.html>. [Accessed: 13-Mar-2019].
- [211] K. Jacobson, "Thermodynamic properties of water and steam," 18-Nov-2018. [Online]. Available: <https://github.com/KurtJacobson/XSteam>.
- [212] T. Bauer, D. Laing, and R. Tamme, "Characterization of Sodium Nitrate as Phase Change Material," *International Journal of Thermophysics*, vol. 33, no. 1, pp. 91–104, Jan. 2012.
- [213] A. Lomonaco, D. Hailot, E. Pernot, E. Franquet, and J.-P. Bédécarrats, "Sodium nitrate thermal behavior in latent heat thermal energy storage: A study of the impact of sodium nitrite on melting temperature and enthalpy," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 149, pp. 81–87, May 2016.
- [214] V. M. B. Nunes, C. S. Queirós, M. J. V. Lourenço, F. J. V. Santos, and C. A. Nieto de Castro, "Molten salts as engineering fluids – A review: Part I. Molten alkali nitrates," *Applied Energy*, vol. 183, pp. 603–611, Dec. 2016.

- [215] T. Jriri, J. Rogez, C. Bergman, and J. C. Mathieu, "Thermodynamic study of the condensed phases of NaNO₃, KNO₃ and CsNO₃ and their transitions," *Thermochimica Acta*, vol. 266, pp. 147–161, Nov. 1995.
- [216] W. Nusselt, *Die Oberflächenkondensation des Wasserdampfes*. VDI, 1916.
- [217] S. S. Kutateladze, *Fundamentals of Heat Transfer*. Academic Press, New York, 1963.
- [218] D. A. Labuntsov, "Heat transfer in film condensation of pure steam on vertical surfaces and horizontal tubes," *Teploenergetika*, vol. 4, no. 7, pp. 72–80, 1957.
- [219] W. H. Mac Adams, *Transmission de la chaleur*. Dunod, 1975.
- [220] V. Gnielinski, "New equations for heat and mass transfer in turbulent pipe and channel flow," *Int. Chem. Eng.*, vol. 16, no. 2, pp. 359–368, 1976.
- [221] G. K. Filonenko, "Hydraulic resistance in pipes," *Teploenergetika*, vol. 1, no. 4, pp. 40–44, 1954.
- [222] J. Bonnin, "Écoulement des fluides dans les tuyauteries," *Techniques de l'ingénieur Stockage et transfert des fluides des machines hydrauliques et thermiques*, vol. base documentaire : TIB174DUO., no. ref. article : a738, 1983.

ECOLE DOCTORALE :
Ecole Doctorale Sciences Exactes et leurs Applications
ED 211

LABORATOIRE :
Laboratoire de Stockage Thermique, CEA / LITEN, Grenoble
Laboratoire de Thermique, Energétique et Procédés (LaTEP), Pau