

Etude numérique des transferts thermiques dans un réservoir à base d'hydrure métallique équipé d'un matériau à changement de phase

Sofiène Mellouli, Rabie Ghnay, Abdelmajid Jemni

Laboratoire d'Etudes des Systèmes Thermiques et Energétiques ENIM Monastir, Tunisie
mellouli_sofiene@yahoo.fr; rabie.ghnay@gmail.com; abdelmajid.jemni@enim.rnu.tn

Résumé :

Les matériaux à changement de phase (MCP) sont utilisés dans plusieurs applications en vue du stockage de la chaleur. Afin de démontrer la faisabilité d'intégrer un MCP dans un réservoir à base d'hydrure métallique pour stocker la chaleur dégagée lors de l'absorption de l'hydrogène pour la récupérer lors de la désorption, un modèle mathématique bidimensionnel est présenté. Un code de calcul est développé et exploité pour prévoir le processus de couplage thermique entre un domaine d'hydrure de magnésium et un domaine de MCP.

Mots clés :

Hydrure métallique, matériau à changement de phase MCP, fusion, stockage de chaleur.

1. Introduction

Pour faire face d'une part au double défi de réduire les émissions de gaz à effet de serre qui menacent les équilibres climatiques et environnementaux, et d'autre part, par la future pénurie en énergie fossile, plusieurs actions sont envisageables, parmi lesquelles on trouve l'exploitation des sources d'énergies renouvelables. Pour bien exploiter ces sources dans des applications industrielles, de vastes programmes de recherche ont été lancés afin d'utiliser l'hydrogène comme un vecteur énergétique. Si l'hydrogène devait s'imposer à terme, comme vecteur énergétique, le problème de son stockage doit être résolu de façon satisfaisante. A court et à moyen terme, il semble donc que la possibilité de stockage dans les hydrures métalliques est à considérer sérieusement avec plus de sécurité aux techniques conventionnelles.

L'hydrure de magnésium est un matériau convenable pour le stockage de l'hydrogène à grande échelle. Puisqu'il a une enthalpie de réaction très élevée ($\Delta H = - 75 \text{ kJ/mol H}_2$). Cette valeur correspond à plus de 30% du Pouvoir Calorifique Inférieur (PCI) de l'hydrogène et représente donc un coût énergétique très élevé. L'idée consiste à stocker la chaleur dégagée lors du processus de chargement pour la récupérer par la suite, puisque cette énergie devra être fournie au système lors de la désorption [1-3]. L'objectif est de rendre ce mode de stockage compétitif en termes de coût énergétique.

Le stockage de la chaleur sous forme d'enthalpie de fusion est une technologie très largement étudiée dans la mesure où elle permet de disposer de capacités massiques et volumiques de stockage beaucoup plus importantes qu'en utilisant la chaleur sensible. Un brevet, sur le stockage de la chaleur dégagée par l'absorption d'un hydrure, a été déposé par Gary Sandrock en 1986 [4]. En effet différentes configurations de réservoirs ont été testées, en utilisant soit la chaleur sensible de l'eau, soit un matériau à changement de phase de type sel fondu (sulfate de sodium) pour stocker la chaleur de réaction d'un hydrure.

Dans cette étude, nous avons étudié, d'étudier la possibilité de stocker la chaleur, dégagée lors de chargement en hydrogène, dans un MCP pour la récupérer lors de déchargement du réservoir.

Après avoir décrit le modèle mathématique des phénomènes d'absorption d'hydrogène au sein du lit d'hydrure, et de la fusion dans le domaine MCP, on expose les résultats relatifs au couplage des transferts entre les deux domaines étudiés.

2. Etude numérique

2.1. Géométrie étudiée

Le réservoir étudié est composé de deux cylindres coaxiaux (Figure 1), le cylindre central est rempli de poudre d'hydrure de magnésium et la partie extérieure contenant le MCP.

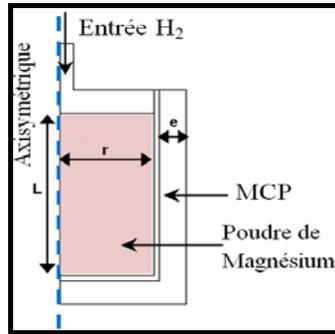


Figure 1 : Géométrie du réservoir étudié

2.2. Modèle mathématique

Le modèle numérique de ce réservoir est développé en 2D axisymétrique sur deux domaines, l'un correspondant à l'hydrure de magnésium, l'autre au matériau à changement de phase (Figure 1).

2.2. 1. Les équations du domaine hydrure:

L'équation de la chaleur :

$$(\rho C_p)_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda_{eff} \text{grad}(T)) + S_{MgH_2} \quad (1)$$

Le terme source, domaine hydrure :

$$S_{MgH_2} = \frac{\rho_{MgH_2} \omega_i (1 - \varepsilon) \Delta H_{MgH_2}}{M} \frac{dx}{dt} \quad (2)$$

La vitesse d'hydruration est :

$$\frac{dx}{dt} = f(P_{eq}, T) \quad (3)$$

La pression d'équilibre est :

$$P_{eq}(T) = P^\circ \cdot e^{\left(\frac{\Delta H^\circ}{RT} - \frac{\Delta S^\circ}{R} \right)} \quad (4)$$

Le nombre adimensionnel N relatif à la prise en compte de l'écoulement dans un réservoir d'hydrure [5]:

$$N = \frac{\lambda \cdot M \cdot L^2 \cdot \mu}{P \cdot \frac{\Delta H^2}{RT_{eq}^2} \cdot \rho_g \cdot K \cdot r^2} \quad (5)$$

N est un nombre adimensionnel, développé par A. Chaise et al [5], donnant un ordre de grandeur de l'erreur commise par un modèle qui néglige les effets d'écoulement dans le réacteur.

Le critère « $N \ll 1$ », la circulation d'hydrogène dans la poudre de magnésium et ses effets sont négligés [5].

2.2. 2. Les équations du domaine MCP :

Equation de l'énergie :

$$\rho_{MCP} C_{pMCP} \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda_{MCP} \text{grad}(T)) + S_{MCP} \quad (6)$$

La fraction liquide F :

$$F = \begin{cases} 0 & \text{si } T < T_{\text{solidus}} \\ 1 & \text{si } T < T_{\text{fusion}} \\ (T - T_{\text{solidus}}) / (T_{\text{fusion}} - T_{\text{solidus}}) & \text{si } T_{\text{fusion}} < T < T_{\text{solidus}} \end{cases} \quad (7)$$

Le volume de MCP nécessaire à stocker l'enthalpie de réaction est :

$$V_{\text{MCP}} = - \frac{\omega_l \Delta H_{\text{MgH}_2}}{\rho_{\text{MCP}} M_{\text{H}_2} \Delta H_{\text{MCP}}} \quad (8)$$

2.2. 3. Conditions initiales et aux limites

Initialement, les températures : de la poudre, du gaz et du domaine MCP ($\text{Mg}_{69}\text{Zn}_{28}\text{Al}_{03}$) sont supposées uniformes à travers le réservoir : $T_{\text{Hydrure}} = T_{\text{H}_2} = T_{\text{MCP}} = T_{\text{Fusion}} = 607 \text{ K}$

Les parois extérieures du réservoir sont adiabatiques. La pression d'hydrogène appliquée est 8 bars.

2.3. Méthode de résolution

Le logiciel commercial Fluent a été exploité pour développer un modèle numérique de ce réservoir. Un fichier de calcul (UDF: User Defined Function) en langage C regroupant les modèles de cinétique réactionnel a été développé et intégré au calcul de Fluent. La figure 2 présente l'algorithme de résolution du système d'équations.

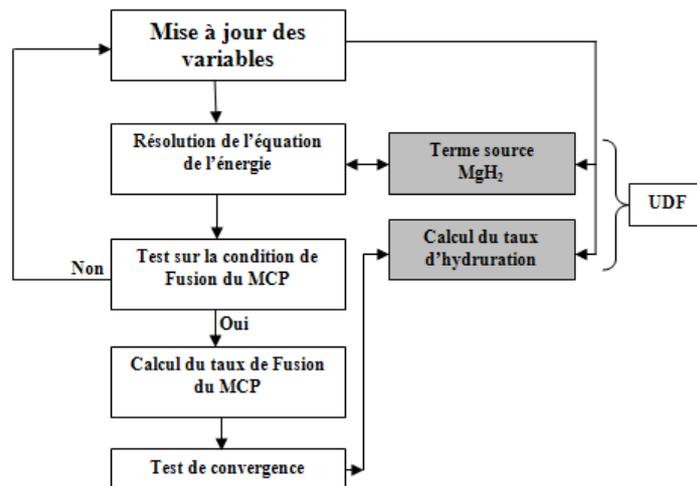


Figure 2 : Algorithme de résolution du système d'équations

3. Validation du modèle

Le modèle numérique élaboré a été validé avec les résultats expérimentaux de Chaise et al. [5]. La figure 3 montre que le modèle numérique peut prédire d'une façon assez satisfaisante les résultats expérimentaux.

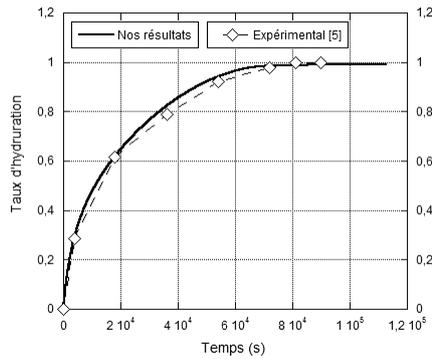


Figure 3 : Validation du modèle

4. Résultats et discussion

L'objectif de cette étude est de stocker la totalité de la chaleur, dégagée lors de l'absorption de l'hydrogène.

Dans le but de prévoir le processus de couplage thermique entre un domaine d'hydrure de magnésium et un domaine de MCP. Deux configurations, contenant la même masse de magnésium et des volumes de MCP différents, ont été testées :

Configuration 1 : le volume du domaine MCP est insuffisant pour stocker la totalité de la chaleur de réaction. Les dimensions du réservoir ($L = 3,5$ cm ; $r = 1,75$ cm ; $e = 0,5$ cm)

Configuration 2 : le volume du domaine MCP est suffisant pour absorber la totalité de la chaleur thermique. Les dimensions du réservoir ($L = 3,5$ cm ; $r = 1,75$ cm ; $e = 1$ cm)

La figure 4 représente les contours de température, de taux d'hydruration (domaine hydrure) et de titre de fusion (domaine MCP) après 820 s de chargement en hydrogène. On constate qu'il y a une formation de fronts d'hydruration et de fusion au niveau de la paroi intermédiaire de deux domaines.

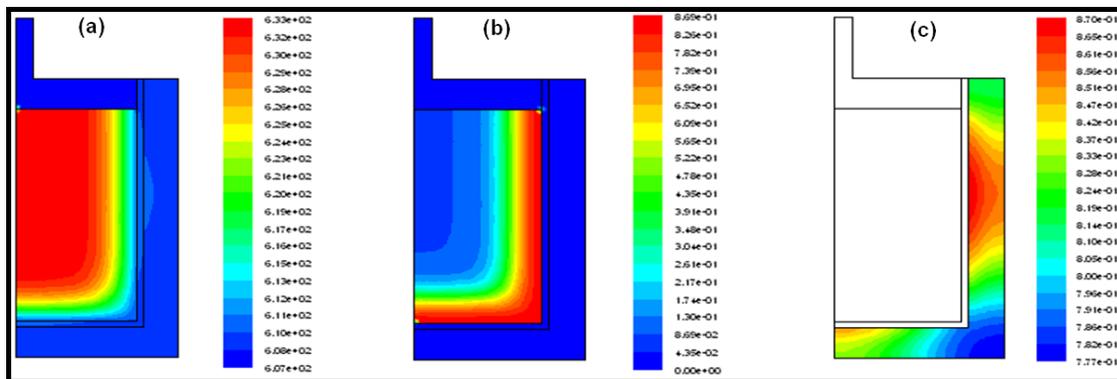


Figure 4 : Contours de température (a), d'hydruration (b) et de titre de fusion (c) à $t = 820$ s

La figure 5 correspond à l'évolution temporelle de taux d'hydruration et du titre de fusion en fonction du temps pour les deux configurations : d'après la figure 5.a dès 1100 secondes, le MCP est totalement fondu alors que seulement 65 % du matériau est hydruré. C'est ensuite l'énergie sensible du MCP qui permet de stocker la chaleur de réaction (Figure 6). La différence de température entre l'hydrure de magnésium et le MCP diminue progressivement, ce qui ralentit la réaction d'absorption.

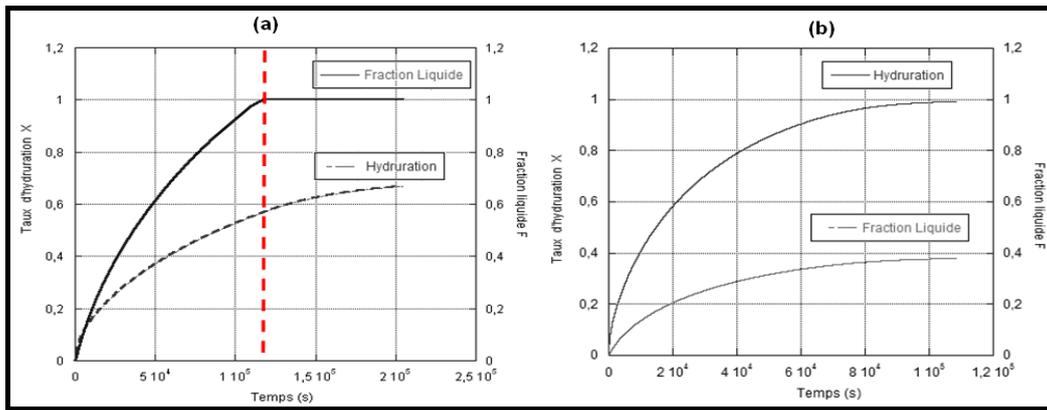


Figure 5 : Evolution temporelle du taux d'hydruration et du titre de fusion du MCP :
(a) configuration 1 et (b) configuration 2

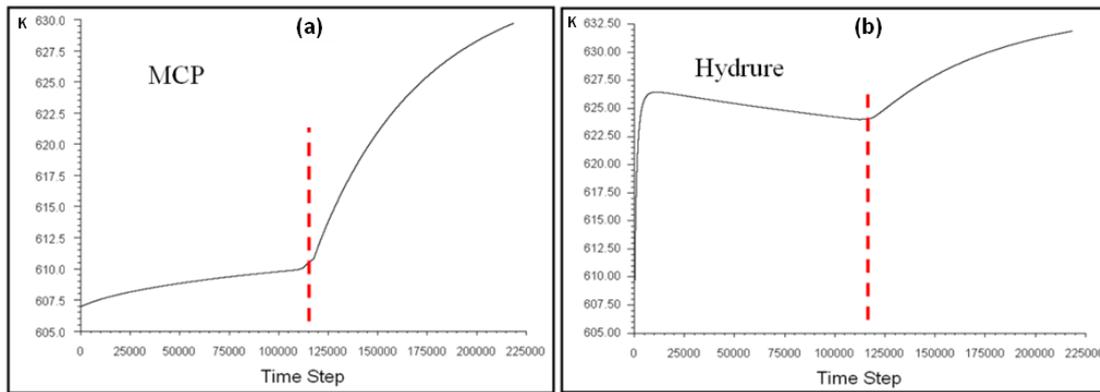


Figure 6 : Evolution temporelle de la température moyenne (configuration 1) :
(a) pour le domaine MCP et (b) pour le domaine d'hydrure de magnésium

La deuxième configuration a été simulée dans les mêmes conditions que la première. Selon la figure 5.b le domaine de magnésium est complètement hydruré car la totalité de la chaleur dégagée est stockée par la fusion du MCP (Figure 7).

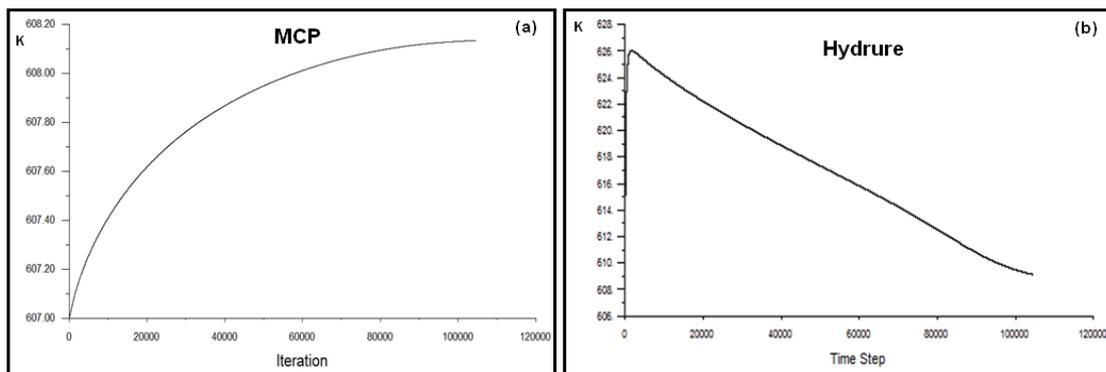


Figure 7 : Evolution temporelle de la température moyenne (configuration 2):
(a) pour le domaine d'hydrure de magnésium et (b) pour le domaine MCP

5. Conclusion

Un modèle mathématique bidimensionnel instationnaire est développé. Un code de calcul en Fluent® a été élaboré et appliqué pour simuler le comportement dynamique d'un réservoir d'hydrure de magnésium avec récupération de la chaleur d'absorption par un matériau à changement de phase MCP. On a montré qu'un bon choix des paramètres géométriques du domaine MCP, tels que le volume, est nécessaire.

Nomenclature

C_p chaleur spécifique, $J/kg.K^{-1}$

ΔH enthalpie molaire de réaction, J/mol

K perméabilité, m^2

M masse molaire de l'hydrogène, kg/mol

N erreur commise par un modèle qui néglige les effets d'écoulement

P pression d'hydrogène, Pa

P_{eq} pression d'équilibre, Pa

R constante universelle des gaz = $8.314 J/mol.K$

S terme source de réaction, $mol/m.s$

ΔS entropie molaire de réaction dans les conditions standards, $J/mol.K$

ωt pourcentage massique maximum d'hydrogène dans le matériau, %

x taux d'hydruration

Symboles grecs

λ conductivité thermique, $W/m.K$

μ viscosité dynamique $Pa.s$

ρ masse volumique, kg/m^3

$d x/dt$ vitesse d'hydruration, s^{-1}

Indices et exposants

eq équilibre

eff effective

$^\circ$ standard

g gaz

0 initial

Références

[1] A.Chaise. "Etude expérimentale et numérique de réservoirs d'hydrure de magnésium", Thèse de l'Université J. Fourier, Grenoble, 2008.

[2] P. Marty, J-F. Fourmigue, P. de Rango, D. Fruchart, J. Charbonnier. "Numerical simulation of heat and mass transfer during the absorption of hydrogen in a magnesium hydride". Energy Conversion and Management 47 (2006) 3632-3643.

[3] F. Askri, A. Jemni, S. Ben Nasrallah. "Study of two-dimensional and dynamic heat and mass transfer in a metal-hydrogen reactor". Int. J. Hydrogen Energy 28 (2003) 537-557

[4] G.D.Sandrock, Edwin Snape, "Reaction heat storage method for hydride tank", WO 4566281, United State Patent.

[5] A. Chaise, P. deRango, Ph. Marty, D. Fruchart. Experimental and numerical study of a magnesium hydride tank. Int. J. Hydrogen Energy 35(2010) 6311 -6322.