الـــــــجمـــهورية الجـــــــــــزائـريـة الديمـــــقـراطـيـة الـشـــــــعـبـيـة

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التـــــــــــــعـــليـــم العـــــــــالي والبـــــــــحث العـــــلـــمـــي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

جـــــامعة أبي بـكـر بـلـقـــايـد – تـــلمســـــــــان –

Université Abou bakr Belkaïd – Tlemcen –

Faculté de TECHNOLOGIE

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du **diplôme** de

MASTER En : Génie Mécanique

Spécialité : Energie Renouvelable

Par :

MOKEDDEM OUAHIBA **SAADI ANIS**

Sujet

Étude, dimensionnement et simulation d'un système de stockage de l'hydrogène vert

Soutenu le 17 / 06 / 2025, devant le jury composé de :

Président	Guellil Hocine	MCA	Université de Tlemcen
Encadrant	Benseddik Lila	MCA	Université de Tlemcen
Co-Encadrant	Mokhtari Bounouar	Doctorant	Ecole National Polytechnique Oran
Examinateur	Ouarrad Soumia	MCB	Université de Tlemcen

Année universitaire : 2024/ 2025

Remerciements

Avant toute chose, nous remercions Allah Tout-Puissant pour Sa guidance et Son aide tout au long de ce travail.

Pour commencer, nous voulons adresser nos remerciements à ***Mme. BENSEDDIK LILA*** *et* ***Ms. MOKHTARI BOUNOUAR*** *pour leurs aides, conseils et pour l'orientation, la guidance, l'encouragement, ainsi que pour leurs précieux conseils lors de la réalisation de notre mémoire dans les meilleures conditions.*

Nous remercions également les membres du jury et pour leurs efforts et leurs soins apportés à notre travail.

Sans oublier de remercier toute l'équipe du laboratoire de Génie mécanique de l'université Abou Bekr Belkaid de Tlemcen. Et tous nos professeurs du département et aussi l'équipe du ALZINC -Ghazaouet qui ont contribué à notre formation.

Enfin, nous adressons nos plus sincères remerciements à nos familles : nos parents pour leur amour et leur soutien. Nos sœurs et nos frères et aussi nos amis pour leurs encouragements à poursuivre notre route et réaliser tous nos vœux.

Dédicace

Je dédie ce travail de la fin d'études :

A ma très chère maman qui sans eux je ne suis rien aujourd'hui

A mon père défunt, je dédie ce travail avec tout mon amour, en espérant qu'il soit fier de moi, là où il est.

A mon frère, ma sœur et ma famille

A ma chère amie Amira

Enfin pour tous les gens qui m'estiment espérant bien que je n'ai oublié

Personne dans cette courte page.

MOKEDDEM Ouahiba

Dédicace

Je dédie ce travail de la fin d'études :

A mes très chers parents qui sans eux je ne suis rien
aujourd'hui A mes frères, mes sœurs et ma famille

A mes amis

Enfin pour tous les gens qui m'estiment espérant bien que je n'ai oublié

Personne dans cette courte page.

SAADI Anis

الملخص

في إطار التوجه العالمي نحو تطوير مصادر طاقة مستدامة، تبرز أهمية الهيدروجين الأخضر كخيار استراتيجي نظيف وفعّال. يهدف هذا البحث إلى دراسة سلوك نظام تخزين الهيدروجين الأخضر المضغوط، من خلال النمذجة العددية والمحاكاة باستخدام برنامج ANSYS Fluent .

تم اختيار خزان من النوع الثالث، نظراً لاستخدامه الواسع في التطبيقات الصناعية والتنقل، مع التركيز على مرحلة التعبئة السريعة التي تشكل تحدياً من حيث السلامة والتغيرات الحرارية والضغطية.

تم اعتماد نموذج الغاز الحقيقي (Redlich-Kwong) ونموذج الاضطراب (k−ε) لمحاكاة الظواهر الفيزيائية بدقة.

أظهرت النتائج فعالية المنهجية المتبعة في تمثيل الواقع الفيزيائي، وأسهمت في اقتراح تحسينات تقنية من شأنها تعزيز أداء وسلامة أنظمة التخزين، مما يفتح آفاقاً جديدة نحو دمج الهيدروجين الأخضر في الحلول الطاقوية المستقبلية.

الكلمات المفتاحية: الهيدروجين الأخضر – خزان من النوع الثالث – ANSYS Fluent – نموذج (Redlich-Kwong) – نموذج (k−ε)

Abstract

In the context of the global transition towards sustainable energy sources, green hydrogen stands out as a strategic, clean, and efficient alternative. This research aims to investigate the behavior of a compressed green hydrogen storage system through numerical modeling and simulation using ANSYS Fluent.

A Type III storage tank was selected due to its widespread use in industrial and mobility applications, with a particular focus on the rapid filling phase, which poses safety and thermal challenges.

The (Redlich-Kwong) real gas equation and the (k-ε) turbulence model were employed to ensure accurate representation of the physical phenomena.

The findings validate the adopted methodology and suggest technical improvements that enhance storage performance and safety, contributing to the integration of green hydrogen into future energy systems.

Keywords: Green hydrogen – Type III tank – ANSYS Fluent – Redlich-Kwong model –(k-ε) model

Résumé

Dans le cadre de la transition énergétique mondiale vers des sources durables, l'hydrogène vert s'impose comme une alternative stratégique, propre et efficace. Ce travail de recherche vise à analyser le comportement d'un système de stockage d'hydrogène vert comprimé à travers une modélisation numérique et une simulation à l'aide du logiciel ANSYS Fluent.

Un réservoir de type III a été retenu, en raison de sa large utilisation dans les domaines industriels et de la mobilité, avec une attention particulière portée à la phase de remplissage rapide, connue pour ses défis en matière de sécurité et de variations thermiques.

L'équation d'état de (Redlich-Kwong) ainsi que le modèle de turbulence (k-ε) ont été utilisés pour modéliser avec précision les phénomènes physiques.

Les résultats obtenus valident la méthodologie appliquée et permettent de proposer des améliorations techniques susceptibles d'optimiser la performance et la sécurité des systèmes de stockage, en vue d'une intégration renforcée de l'hydrogène vert dans les solutions énergétiques de demain.
Mots-clés : Hydrogène vert – Réservoir de type III – ANSYS Fluent – Modèle de Redlich-Kwong – Modèle (k-ε)

Table des matières

Résumé

Liste des figures

Liste des tableaux

Liste des abréviations

Nomenclature

Introduction général 2

Chapitre I : Généralités sur l'hydrogène vert 5

I.1. Introduction 6

I.2. Définition de l'Hydrogène vert 6

I.3. Historique des définitions de l'hydrogène vert 7

I.4. Les différents types de l'hydrogène 8

I.5. Caractérisations de l'hydrogène 9

I.5.1. Propriété physique 9

I.5.2. Propriétés énergétiques 10

I.5.3. Isotopes de l'hydrogène 11

I.6. Production de l'hydrogène 11

I.7. Définition d'électrolyseur 12

I.7.1. Description du système 12

I.7.2. Principe de fonctionnement 12

I.7.3. Rendement et consommation du système 13

I.8. Les différents types d'électrolyseurs 14

I.8.1. L'électrolyseur alcalin 14

I.8.2. L'électrolyse PEM 14

I.8.3. L'électrolyseur à haute température par SOEC 15
I.9. Stockage de l'hydrogène 16
I.9.1. Stockage conventionnel 17
I.9.2. Stockage par adsorption 17
I.9.3. Stockage par hydrure 18
I.10. L'utilisation de l'hydrogène 19
I.9. Conclusion 21
Chapitre II : Revue de littérature sur les techniques de stockage de l'hydrogène 23
II.1. Introduction 24
II.2. Analyse des travaux scientifiques effectués 24
II.2.1 Facteurs de sécurité et performances 24
II.2.2 Stockage d'hydrogène (absorption, matériaux, structures) 24
II.2.3 Stockage dans réservoirs à haute pression et remplissage rapide 25
II.3 Analyse et synthèse bibliographique 42
II.4. Conclusion 42
Chapitre III : Simulation et résultats 43
III.1. Simulation du processus de remplissage 44
III.1.1. Structure cylindrique pour le stockage de l'hydrogène 45
III.1.2. Sensibilité de la grille 48
III.1.3. Analyse CFD : Hypothèses et considérations de modélisation 51
III.1.4. Conditions aux limites et conditions initiales 54
III.2. Résultats et discussions 56
III.2.1. Validation des résultats de simulation 56

III.2.2. Distribution de la température dans le réservoir..... 58
III.3. Conclusion..... 65
Conclusion générale..... 66
Bibliographie..... 68
Annexes..... 75

Liste des figures

Chapitre I :

Figure I.1 : Représentation du modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène 7
Figure I.2 : Représentation des différents types de l'hydrogène 9
Figure I.3 : Représentation de l'isotope de l'hydrogène 11
Figure I.4 : Méthodes de production d'hydrogène [20] 11
Figure I.5 : Schéma de principe de l'électrolyse 13
Figure I.6 : Schéma de l'électrolyse de l'eau alcaline 14
Figure I.7 : Principe schématique de l'électrolyse PEM 15
Figure I.8 : Principe de l'électrolyse à haute température selon le d'électrolyte.....16

Chapitre II :

Figure II.1 : Valeur de l'augmentation de température de tous les capteurs pendant le remplissage, de maintien et de décharge.....26
Figure II.2 : Température maximale et moyenne pendant le ravitaillement en carburant avec différents rapports longueur/diamètre [37] 27
Figure II.3 : Précision de la température maximale prédite à la position des CTs pour Pos1 et Pos2 28
Figure II.4 : Influence du matériau de la gaine sur la température du réservoir [39]..27
Figure II.5 : Corrélation généralisée entre la température et la masse par rapport aux deux essais analysés [39] 28
Figure II.6 : Débit massique à l'entrée en fonction du temps pour différents remplissages temps [42] 30
Figure II.7 : Six cas avec différentes durées de remplissage et les deux mêmes durées de retard de 15 secondes [43].....31
Figure II.8 : Résultat optimisé pour une pression initiale de 2 MPa et une température ambiante de 293 K. (a) Consommation d'énergie en fonction de différents paramètres.

(b) SOC avec différents paramètres. (c) Temps de remplissage en fonction de différents paramètres [45] 32
Figure II.9 : Contribution des paramètres du processus à la densité de stockage [46] 33
Figure II.10 : Comparaison de la distribution de la température du gaz avec différents modèles de turbulence (t =30 s) [47] 34
Figure II.11 : Température du gaz d'admission en fonction du temps (à gauche). Historique de la température du gaz du réservoir pendant le remplissage (à droite) 35
Figure II.12 : Distributions statistiques de la vitesse du gaz à proximité de la surface interne du réservoir 36
Figure II.13 : Répartition des contraintes dans le bossage et la chemise : (a) répartition des contraintes dans le bossage ; (b) répartition des contraintes dans la chemise 37
Figure II.14 : Résultats calculés par analyse de défaillance progressive : (a) défaillance de la fibre (b) défaillance de la matrice (c) défaillance par cisaillement 38
Figure II.15 : Température moyenne du gaz avec différents modèles de gaz réels [53] 38
Figure II.16 : Comparaison du changement de pression maximale avec le temps de remplissage pour tous les modèles de gaz [53].....40
Figure II.17 : Comparaison du changement de température maximal avec le temps de remplissage pour tous les modèles de gaz [53].....41

Chapitre III :

Figure III.1 : Modèle thermique théorique des bouteilles composites lors du processus de remplissage d'hydrogène 45
Figure III.2 : Structure du réservoir de stockage d'hydrogène comprimé 46
Figure III.3 : Conception initiale de la géométrie du réservoir dans SolidWorks 47
Figure III.4 : Maillage pour modèle 2D 48
Figure III.5 : Température maximale avec différents nombres de mailles 49
Figure III.6 : Détails de la grille (fluide, revêtement, isolation) 49
Figure III.7 : L'interface du logiciel ANSYS Fluent 52

Figure III.8 : Propriétés de l'hydrogène.....56
Figure III.9 : Comparaison entre l'expérience [36] et le résultat de la simulation.....58
Figure III.10 : Le changement de la distribution de la température en fonction du temps d'écoulement a) Temps d'écoulement =25 s, b) Temps d'écoulement =75 s, c) Temps d'écoulement=125 s, d) Temps d'écoulement =176 s.....59
Figure III.11 : Évolution de la vitesse d'entrée et de la température maximale pendant le processus de remplissage du réservoir d'hydrogène.....60
Figure III.12 : Influence de pression initiale différente pour un même taux de remplissage.....62
Figure III.13 : Influence d'une pression initiale différente pour une même durée de remplissage.....63
Figure III.14 : Effet de la variation du débit massique à l'entrée 63
Figure III.15 : Effet de la variation de la température.....64

Chapitre I

Tableau I.1: Quelques propriétés physiques de l'hydrogène 10

Chapitre III

Tableau III.2 : Dimensions du réservoir (m) 47

Tableau III.3 : Les propriétés matérielles du réservoir de stockage d'hydrogène comprimé 48

Tableau III.4 : Qualité du maillage.....50

Tableau III.5 : Différents paramètres variables 61

Liste des abréviations

ANSYS : Analysis System (logiciel de simulation)

CFD : Computational Fluid Dynamics

H_2 : Dihydrogène

PAC : Pile à combustible

SOC : State of Charge

PEM : Proton Exchange Membrane

RK : Redlich-Kwong (modèle de gaz réel)

SOEC : Solid Oxide Electrolysis Cell

NIST : National Institute of Standards and Technology

MPa : Mégapascal (unité de pression)

Kw : Kilowatt

Kwh : Kilowatt-heure

LZ : Luftschiff Zeppelin

CTs : Capteurs de Température (utilisé dans le contexte de mesures)

H_2O : Eau

e^- : Électron

O_2 : Dioxygène

PCI : Pouvoir Calorifique Inférieur

PCS : Pouvoir Calorifique Supérieur

Nomenclature

ρ : Densité (Kg/m³)

P : Pression (Pa)

T : Température (K)

V : Volume (m³)

m : Masse (Kg)

Q : Chaleur (J)

U : Énergie interne (J)

Cp : Chaleur spécifique à pression constante (J/Kg.K)

Cv : Chaleur spécifique à volume constant (J/Kg.K)

R : Constante des gaz parfaits (J/mol.K)

k : Conductivité thermique (W/m.K)

μ : Viscosité dynamique (Pa.s)

ε : Taux de dissipation de l'énergie turbulente (m²/s³)

k (turbulence) : Énergie cinétique turbulente (m²/s²)

t : Temps (s)

v : Vitesse (m/s)

h : Enthalpie (J/Kg)

E : Énergie totale (J)

τ : Tenseur de contrainte visqueuse (Pa)

λ : Conductivité thermique (W/m.K)

g : Accélération gravitationnelle (m/s²)

Introduction générale

Ces dernières années, l'augmentation de la population mondiale a entraîné une hausse demande de la production d'énergie. Dans un contexte marqué par l'épuisement progressif des ressources fossiles et l'augmentation continue des émissions de gaz à effet de serre, la question de la transition énergétique s'impose comme un enjeu majeur à l'échelle mondiale.

Les conséquences environnementales des combustibles fossiles ont déclenché une transition vers des sources d'énergie respectueuses de l'environnement et à faible teneur en carbone. Parmi ces options, l'hydrogène est apparu comme un vecteur énergétique important en raison de sa disponibilité abondante, de l'absence d'émissions de carbone, de son efficacité énergétique impressionnante et de son respect de l'environnement. Reconnu comme un vecteur énergétique potentiel pour l'avenir, la combustion de l'hydrogène ne produit que de la vapeur d'eau, ce qui en fait une option tout à fait adaptée à diverses applications, comme le propulseur des futurs véhicules automobiles.

Aujourd'hui, la grande majorité de l'énergie consommée dans le monde provient encore de sources non renouvelables, accentuant les impacts environnementaux et économiques. Face à cette problématique, l'hydrogène se présente comme une alternative énergétique propre, polyvalente et prometteuse.

Parmi les différentes formes d'hydrogène, l'hydrogène vert, produit à partir de l'électrolyse de l'eau en utilisant des énergies renouvelables (solaire, éolienne, hydraulique), suscite un intérêt croissant en raison de son caractère décarboné et de sa capacité à être stocké et transporté. Cependant, l'un des principaux défis associés à cette technologie reste le stockage sûr et efficace de ce gaz, notamment sous forme comprimée à haute pression.

Ce mémoire a pour objectif principal de modéliser, dimensionner et simuler un système de stockage de l'hydrogène vert. Pour cela, une attention particulière est portée à l'étude du remplissage rapide d'un réservoir de type III, couramment utilisé dans les applications liées à la mobilité ou à l'industrie. Cette phase de remplissage induit des variations importantes de température et de pression, nécessitant une modélisation rigoureuse afin d'assurer la sécurité et l'efficacité du système.

Afin de mener cette étude, nous avons utilisé le logiciel ANSYS Fluent, outil de simulation CFD (Computational Fluid Dynamics), permettant de reproduire les phénomènes physiques et thermodynamiques se produisant lors du remplissage. Le modèle mis en place prend en compte les caractéristiques réelles du gaz à travers l'équation d'état de Redlich-Kwong, les conditions thermiques des parois du réservoir, ainsi que les propriétés des matériaux utilisés (aluminium, fibre de carbone). Le modèle de turbulence k-ε standard a été utilisé pour simuler les effets liés à l'écoulement du gaz à haute vitesse.

Ce travail s'organise comme suit :

Dans le premier chapitre, nous avons présenté les généralités sur l'hydrogène vert, ses caractéristiques, les types d'électrolyseurs utilisés pour sa production, Nous avons également étudié les méthodes de stockage disponibles.

Dans le deuxième chapitre, notre étude s'est davantage concentrée sur la technologie de stockage de l'hydrogène en citant plusieurs littératures qui touchent ce domaine à savoir le remplissage rapide et les réservoirs à haute pression.

Dans le troisième chapitre, nous avons consacré notre étude au dimensionnement, où nous avons présenté le programme ANSYS Fluent qui nous a permis d'identifier les éléments du réservoir de remplissage, et enfin nous avons comparé les résultats obtenus avec ceux de la littérature.

Enfin, une conclusion générale couronne ce travail, à travers laquelle des résultats et des perspectives sont mis en relief pour une meilleure prise en charge des problèmes de même nature.

Chapitre I : Généralités sur l'hydrogène vert

I.1. Introduction

Aujourd'hui, l'énergie utilisée par nos sociétés est issue à 80 % des énergies fossiles (gaz naturel, pétrole, charbon) et 20 % dans les énergies dites renouvelables (biomasse, nucléaire, hydraulique, et dans une moindre mesure renouvelable de type solaire ou éolienne). A moins de modifier ses comportements de production et de consommation d'énergie, le développement et la pérennité des sociétés humaines à long. [1]

Dans ce chapitre, nous explorerons plus en détail l'hydrogène vert ainsi que d'autres formes d'hydrogène, tout en examinant les différents types d'électrolyseurs utilisés pour sa production.

I.2. Définition de l'Hydrogène vert

Élément chimique le plus abondant dans l'univers, l'hydrogène (H) est classé en première place du tableau de Mendeleïev. Il s'agit de l'atome le plus simple et le plus léger : il est constitué d'un noyau contenant un proton et d'un électron périphérique.

La molécule H_2 de dihydrogène, constituée de deux atomes d'hydrogène, est aussi communément appelée « hydrogène » (nous emploierons cette terminologie dans la fiche). C'est cette molécule H_2 qui fait l'objet d'une exploitation chimique et suscite un fort intérêt énergétique, tant par ses possibilités d'usage que de stockage.

Doté d'un seul électron périphérique, H est chimiquement l'atome le plus réducteur et peut se lier à pratiquement tous les éléments, et d'abord à lui-même, pour former la molécule de dihydrogène H_2 dont la couche périphérique à deux électrons possède la stabilité du premier niveau d'équilibre quantique. Mais la masse du dihydrogène n'est pas suffisante pour qu'il soit retenu par l'attraction terrestre.

Selon les connaissances actuelles, il est très peu présent sous forme H_2 dans la croûte (2/1000 des atomes) comme dans l'atmosphère (0,5 ppm) alors qu'il est l'atome le plus répandu dans l'Univers dont il constitue plus de 90% des atomes et 75% de la masse. [2]

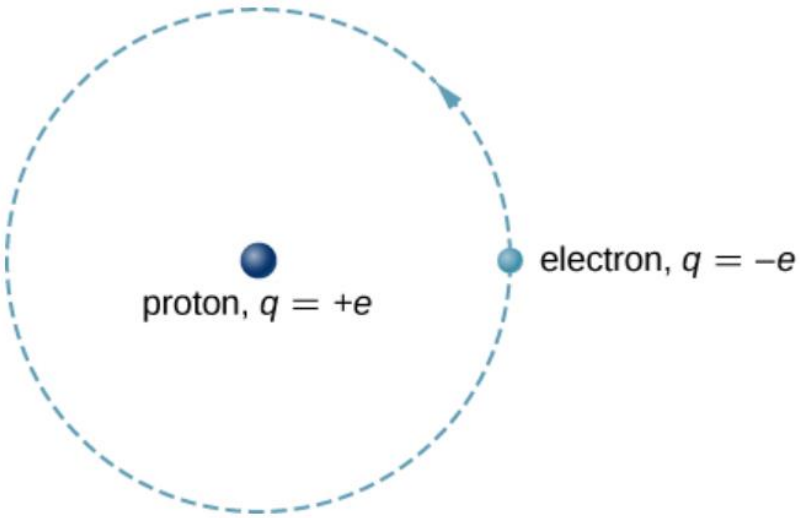


Figure I.1 : Représentation du modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène

I.3. Historique des définitions de l'hydrogène vert

- **1671** : Première intuition : Robert Boyle rapporte que les vapeurs dégagées par la dissolution de fer dans l'acide chlorhydrique sont hautement inflammables. [3]
- **1766** : Découverte de l'hydrogène par Henry Cavendish qui isole le gaz. [4]
- **1781** : Démonstration par Cavendish de la formation d'eau lorsque l'hydrogène brûle. Le chimiste français Antoine Lavoisier appelle le gaz hydrogène. [5]
- **1839** : Découverte de la pile à hydrogène. [6]
- **1898** : Première liquéfaction de l'hydrogène obtenue par l'anglais Sir James Dewar. [7]
- **1929** : Premier vol d'un dirigeable à hydrogène, le LZ 127 Graf Zeppelin, marquant une étape importante dans l'utilisation de l'hydrogène pour l'aviation. [8]
- **1937** : Catastrophe du Hindenburg, un dirigeable à hydrogène, qui prend feu lors de son arrivée à Lake Hurst, New Jersey, marquant un coup d'arrêt aux dirigeables à hydrogène pour le transport de passagers. [9]
- **1960** : Début de l'utilisation de l'hydrogène dans les piles à combustible pour les missions spatiales de la NASA, notamment le programme Apollo, fournissant électricité et eau aux astronautes. [10]

- **1970** : Invention du terme « économie hydrogène » par l'économiste John Bockris, envisageant l'hydrogène comme un vecteur énergétique central pour l'avenir. [11]
- **2003** : Lancement de l'Initiative hydrogène par le président américain George W. Bush, visant à accélérer le développement des technologies de l'hydrogène et des piles à combustible. [12]
- **2015** : Mise en circulation de la Toyota Mirai, l'une des premières voitures à hydrogène produites en série, marquant une avancée significative pour l'hydrogène dans les transports. [13]
- **2020** : Publication de la stratégie européenne pour l'hydrogène, avec des objectifs ambitieux pour la production d'hydrogène vert et le développement des infrastructures correspondantes, consolidant l'hydrogène comme un élément clé de la transition énergétique en Europe. [14]
- **2023** : Publication en France par le gouvernement de la nouvelle stratégie nationale pour le déploiement de l'hydrogène décarboné. [15]

I.4. Les différents types de l'hydrogène

Vous avez peut-être déjà entendu parler d'hydrogène vert, gris, jaune ou bleu. Ces couleurs permettaient de différencier les techniques de production du dihydrogène en les classant de la plus carbonée à la moins carbonée.

Aujourd'hui, les terminologies ont évolué de manière plus parlante :

- **L'hydrogène gris :** est désormais qualifié d'hydrogène "fossile" : il s'agit du mode de production d'H2 le plus courant (95 %) en France et qui consiste à exploiter des ressources d'origine fossile par procédé thermochimique.
- **L'hydrogène bleu et jaune :** sont aujourd'hui qualifiés de "bas-carbone" : le premier est lui aussi produit à partir d'énergies fossiles mais capte et stocke les émissions de CO2 émises durant sa fabrication ; alors que le second est produit à partir d'électricité du réseau, dont une large part est d'origine nucléaire.

- **L'hydrogène vert :** est aujourd'hui qualifié de "renouvelable" car il est produit à partir de l'électrolyse de l'eau, un procédé qui a recours aux énergies renouvelables (solaire, hydraulique, éolienne etc.). [16]

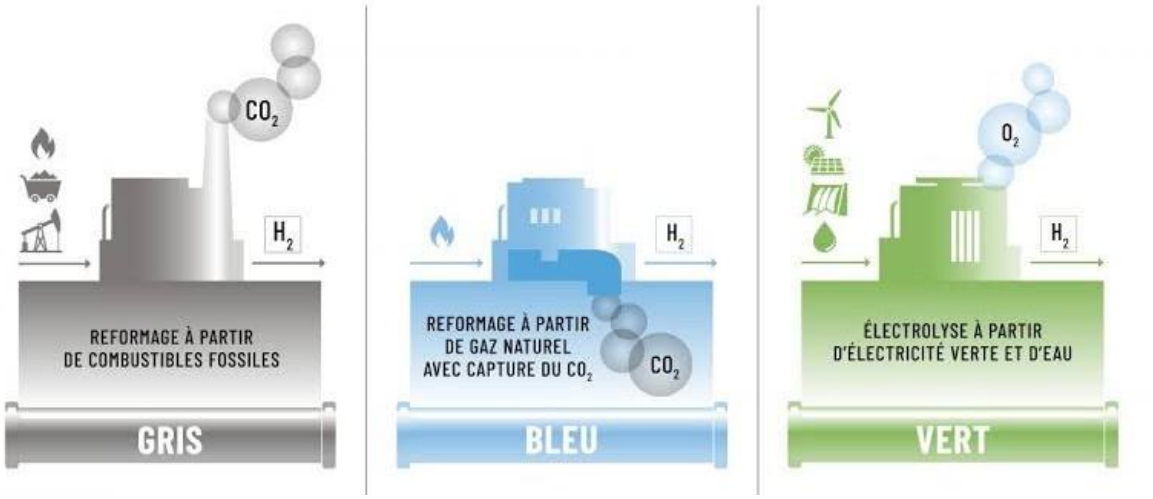


Figure I.2 : Représentation des différents types de l'hydrogène

I.5. Caractérisations de l'hydrogène

I.5.1. Propriété physique

L'hydrogène, à l'état1 standard, se présente sous une forme gazeuse et possède des **propriétés physiques** distinctes :

- **État :** L'hydrogène est un gaz à température ambiante
- **Point de fusion :** -259,16 °C
- **Point d'ébullition :** -252,87 °C
- **Masse volumique :** 0,08988 g/L à 0 °C.
- **Caractéristiques :** Incolore, inodore et sans saveur. [17]

Tableau I.1: Quelques propriétés physiques de l'hydrogène

Propriété	Valeur numérique	
PCI	3 kWh/Nm^3	33.33 kWh/kg
PCS	3.55 kWh/Nm^3	39.41 kWh/kg
Densité gazeuse à 20,3 °K	1.34 kg/m^3	
Densité gazeuse à 273 °K	0.08988 kg/Nm^3	
Densité liquide à 20.3 °K	70.8 kg/m^3	
Densité solide à 14.01 °K	85.8 kg/Nm^3	
Chaleur spécifique gaz (25°C) (Cp)	14.3 J/kg °C	
Chaleur spécifique liquide (-256°C) (Cp)	8.1 kJ/kg °C	
Chaleur spécifique solide (-259.8°C) (Cp)	2.63 kJ/kg °C	
Chaleur spécifique (Cv)	10 300 J/kg K	
Conductivité thermique du gaz	0.1897 W/ (mK)	
Chaleur d'évaporation	445.4 kJ/kg	
Chaleur latente de fusion au point triple	58.09 kJ/kg	
Energie théorique de liquéfaction	14 112 J/g (3.92kWh/kg)	
Electronégativité (Pauling)	2.1	
Masse atomique	1.0079 g/ mol	
Constante du gaz	4 124.5 J/kg °K	
Température de solidification	14.01 °K	
Température d'ébullition (1.013 bar)	20.268 °K	
Température critique	33.30 °K	
Pression critique	12.8 atm	

I.5.2. Propriétés énergétiques

L'hydrogène est très énergétique.

À masse égale, il libère environ 3 fois plus d'énergie que l'essence :

• 1 Kg de pétrole = 12 Kwh ;

• 1 Kg d'hydrogène = 33 Kwh.

Remarquons que cette énergie est dégagée dans des réactions chimiques, c'est-à-dire des réactions des atomes entre eux. Si l'on regarde dans le noyau des atomes, les réactions ne sont plus chimiques mais nucléaires et l'ordre de grandeur des énergies impliquées est incommensurable.

I.5.3. Isotopes de l'hydrogène

Les trois isotopes de l'hydrogène ont la même configuration électronique. C'est pourquoi ils présentent pratiquement les mêmes propriétés chimiques, mais leurs propriétés physiques diffèrent largement en raison de leurs différences de masse. Parmi les trois isotopes, le protium est l'isotope de l'hydrogène le plus courant, que l'on trouve en abondance dans la nature. [19]

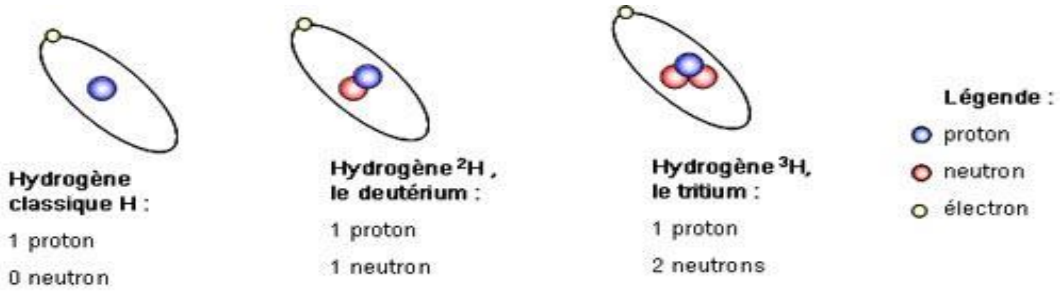


Figure I.3: Représentation de l'isotope de l'hydrogène

I.6. Production de l'hydrogène

En effet, plusieurs technologies sont employées pour produire de l'hydrogène, chacune ayant ses avantages et ses limites. Voici un aperçu des principales méthodes de production d'hydrogène :

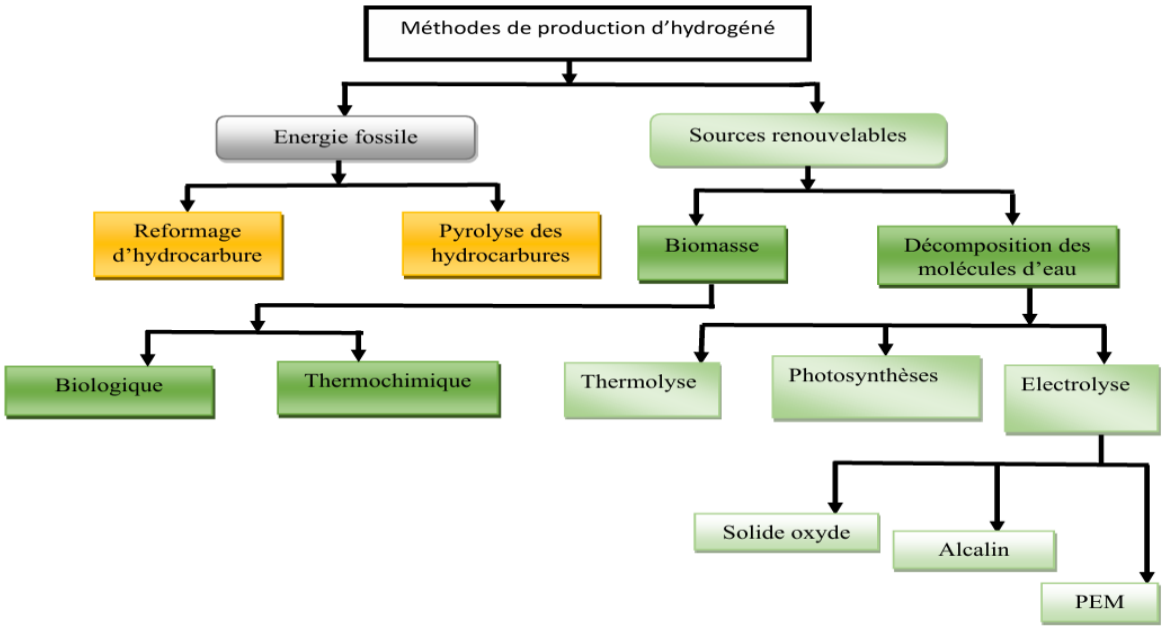


Figure I.4: Méthodes de production d'hydrogène [20]

I.7. Définition d'électrolyseur

I.7.1. Description du système

L'électrolyse de l'eau est un processus électrochimique dans lequel l'électricité est appliquée pour séparer les atomes d'hydrogène et oxygène à partir de l'eau. Il représente l'une des approches les plus simples et efficaces pour produire de l'hydrogène. Cette procédure est totalement propre et elle produise un hydrogène de haute pureté [21].

I.7.2. Principe de fonctionnement

L'électrolyse de l'eau est une réaction électrochimique de décomposition de l'eau en hydrogène et en oxygène. Elle est possible par le passage d'un courant continu à travers deux électrodes immergées dans un électrolyte liquide ou solide. Les technologies en concurrence sont de deux natures, l'une porte sur le type d'électrolyte et l'autre sur le type de structure (monopolaire ou bipolaire). [22- 23].

Quelle que soit la dimension de la cellule d'électrolyse, le principe de fonctionnement reste le même :

- La cathode, en graphite, est responsable de la production d'hydrogène.
- L'anode, également en graphite et de polarité positive, génère l'oxygène.

La cellule est connectée à l'électricité fournie par le panneau photovoltaïque. L'hydrogène produit est ensuite stocké dans un tube gradué jusqu'à ce qu'il soit plein. Pour assurer un bon fonctionnement de l'électrolyseur, il est nécessaire d'ajouter de l'eau déminéralisée à chaque cycle.

$$H_2O + \text{énergie électrique} \rightarrow H_2 + 1/2\ [O]_2 + \text{chaleur}$$

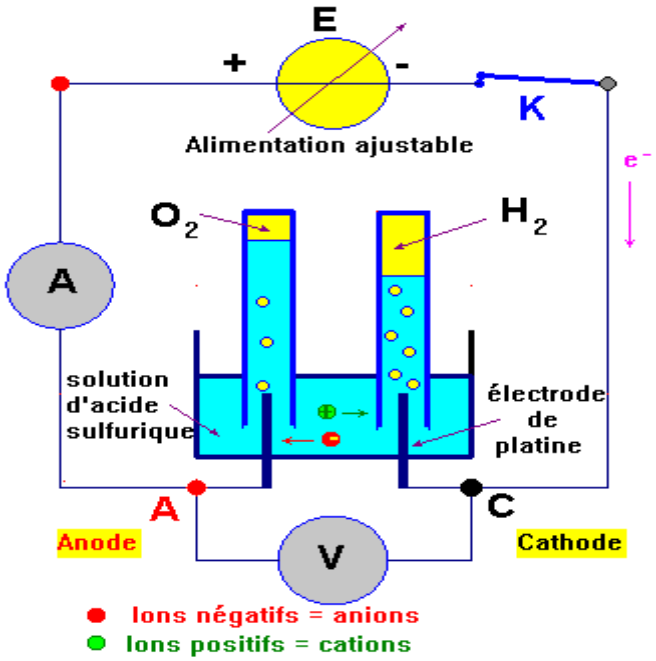


Figure I.5 : Schéma de principe de l'électrolyse

I.7.3. Rendement et consommation du système

Dépendant de la tension électrique et du compromis effectué par le producteur avec le taux de production d'hydrogène, les rendements des électrolyseurs actuels s'étalent de 62% à 89% selon les technologies et les conditions, notamment celles de l'eau en entrée [24]. Ainsi, 4 à 5 Kwh et 1 litre d'eau sont consommés par normo-mètre cube produit dans les électrolyseurs industriels.

Finalement, la production d'un kilogramme d'hydrogène, permettant un déplacement de 100 kilomètres pour tout véhicule léger à pile à combustible, nécessite de 44 à 55 Kwh d'électricité et 11 litres d'eau. L'électrolyse constitue le procédé de production d'hydrogène décartonné le plus mature technologiquement. Toutefois, il ne contribue actuellement qu'à 1% de la production volontaire d'hydrogène du fait d'un manque d'investissements et de coûts dissuasifs.

I.8. Les différents types d'électrolyseurs

I.8.1. L'électrolyseur alcalin

L'électrolyse alcaline est la technologie la plus répandue pour la production d'hydrogène électrolytique mais également pour la production de nombreux composés chimiques dont le chlore. Elle bénéficie ainsi d'une très grande maturité industrielle. Dans un électrolyseur à technologie alcaline, l'électrolyte est une solution aqueuse d'hydroxyde de potassium (KOH). La conduction ionique est alors assurée par les ions hydroxyde (OH-) et potassium (K+). [25]

Les réactions anodiques et cathodiques sont décrites ci-dessous :

A l'anode : $\mathbf{2\ OH^- \rightarrow \frac{1}{2}\ O_2 + H_2O + 2\ e^-}$

A la cathode : $\mathbf{2\ H_2 + 2\ e^- \rightarrow H_2 + 2\ OH^-}$

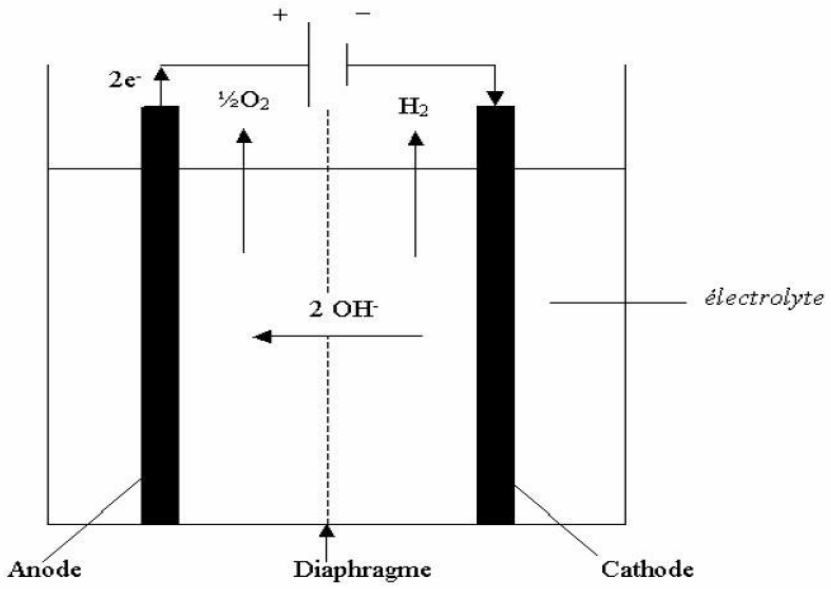


Figure I.6 : Schéma de l'électrolyse de l'eau alcaline

I.8.2. L'électrolyse PEM

Le principe de fonctionnement d'un électrolyseur PEM (Proton Exchange Membrane) est fondé sur le même concept qu'une pile à combustible PEM. La principale caractéristique de l'électrolyseur PEM est son électrolyte solide, constitué d'une membrane polymère. Il assure ainsi la conduction des ions hydronium (H3O+)

produits à l'anode et permet la séparation des gaz produits (H2 et O2), selon les réactions ci-dessous : [25]

A l'anode :**$3\ H_2O \rightarrow ½\ O_2 + 2\ H_3O^+ + 2\ e^-$**

A la cathode :**$2\ H_3O^+ + 2\ e^- \rightarrow H_2 + 2\ H_2O$**

Le principe de l'électrolyse PEM est décrit schématiquement par la figure ci-après. Les performances de l'électrolyseur PEM dépendent essentiellement des caractéristiques de la membrane et des catalyseurs utilisés. Ces deux composants constituent encore aujourd'hui les principaux verrous technologiques de l'électrolyse PEM. [25]

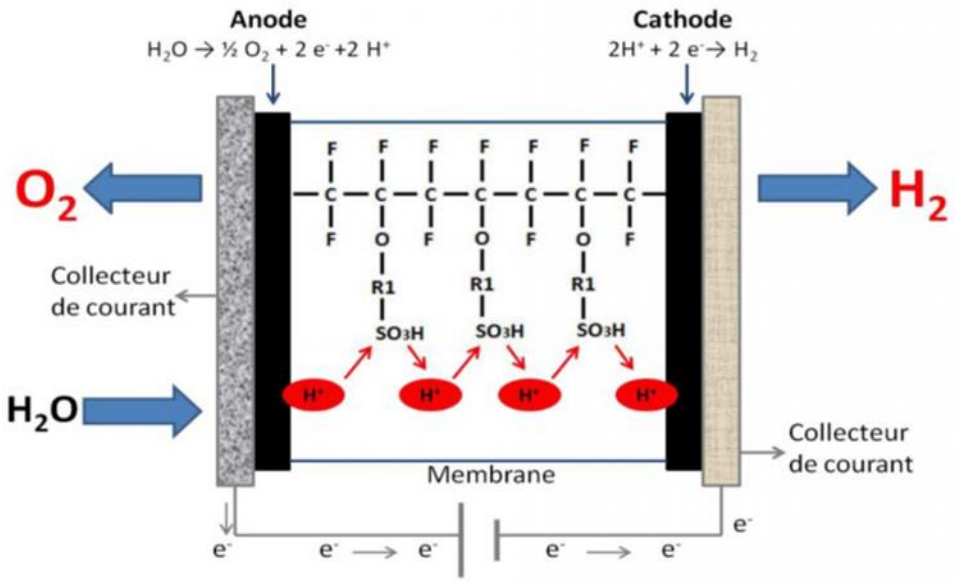


Figure I.7: Principe schématique de l'électrolyse PEM

I.8.3. L'électrolyseur à haute température par SOEC

Le principe de l'électrolyse à haute température repose sur la décomposition des molécules d'eau sous forme vapeur au niveau de la cathode. Cette décomposition dépend alors de la nature de l'électrolyte. Celui-ci peut assurer soit une conduction protonique soit une conduction d'ions superoxydes O2-. Les réactions mises en jeu au niveau des électrodes sont décrites ci-dessous en fonction du type d'électrolyte : [25]

Électrolyte à conduction d'ions superoxydes

A l'anode : $\mathbf{2\ O^{2-} \rightarrow O_2 + 4\ e^-}$

A la cathode :$\mathbf{2\ H_2O + 4\ e^- \rightarrow 2\ O^{2-} + 2\ H_2}$

Électrolyte à conduction protonique

A l'anode : $\mathbf{2\ H_2O \rightarrow 4\ H^+ + O_2 + 4\ e^-}$

A la cathode :$\mathbf{4\ H^+O + 4\ e^- \rightarrow 2\ H_2}$

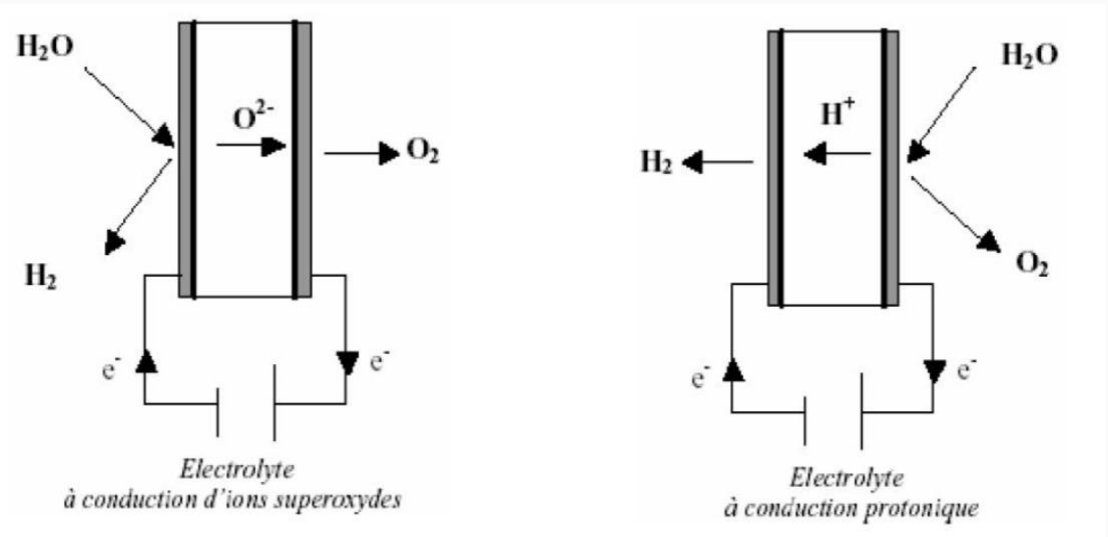


Figure I.8: Principe de l'électrolyse à haute température selon le type d'électrolyte

I.9. Stockage de l'hydrogène

Le concept de stockage de l'hydrogène désigne toutes les formes de mise en réserve du dihydrogène en vue de sa mise à disposition ultérieure comme produit chimique ou vecteur énergétique. Plusieurs possibilités de stockage existent, chacun d'eux a ses propres avantages et des inconvénients.

Sous forme de gaz, le dihydrogène doit être fortement comprimé quant au dihydrogène liquide il nécessite une très basse température et au final pour l'hydrogène solide il nécessite d'être lié à d'autres composants, notamment sous la forme d'hydrure. [26]

I.9.1. Stockage conventionnel

C'est le mode le plus utilisé. Il est surtout approprié pour de grandes quantités. Il y'a deux méthodes différentes :

- **Stockage sous compression :** dans ce cas, l'hydrogène est encore sous forme gazeuse. Il est comprimé à une pression variante entre 200 bars et 350 bars. A cette pression, la densité d'hydrogène dépasse 11 Kg/m3, ce qui représente une augmentation de la densité d'un facteur 130 fois plus élevé que la densité à une pression normale. La densité volumique reste au moins faible pour les applications de transport. Cependant, les réservoirs capables de supporter les pressions supérieures à 450 bars sont en cours de développement. De plus, afin de réduire (alléger) plus le poids du système de stockage, les développements sont en cours pour l'introduction de polymères et des fibres de carbone dans la structure des réservoirs qui sont actuellement en métal alliage.

- **Stockage sous forme liquide :** l'hydrogène est liquéfié à 20K avant son stockage dans un réservoir d'acier à double paroi. L'espace entre les murs est rempli de matériaux isolants, d'azote liquide ou conservé sous vide. Les matériaux composites sont sous développements pour fabriquer des réservoirs plus légers sous forme liquide. La densité de l'hydrogènes 'élève à environ 71Kg/m3, ce qui rend possible d'avoir des citernes répondant aux exigences du secteur de transport une fois le problème des pertes résolu. Cependant, la nécessité de maintenir la température basse et limité les pertes de vaporisation d'une part, et réduire le cout énergétique exorbitant de la liquéfaction d'autre part, fait que ce mode de stockage se conforme de manière optimale aux critères de stockage pour une consommation d'énergie d'hydrogène à grande d'échelle [27].

I.9.2. Stockage par adsorption

Il s'effectue par la concentration d'hydrogène par absorption à la surface d'un adsorbant approprié. Si l'adsorption de l'hydrogène par une grande variété de matériaux

est en théorie possible, seule l'adsorption par le carbone est significative et peut alors être considère pour les applications technologiques.

Dans les conditions normales, des densités d'environ 0.5% en poids ont été obtenues. Mais à très basse température et haute pression, la densité augmente jusqu'à 8%. Donc, pour que ce mode de stockage soit efficace, il est important de développé des adsorbants avec de grandes zones spécifiques. Dans ce sens, les nanotubes et les nano fibres sont sous considération pour le stockage de l'hydrogène. Ces matériaux, bien que prometteurs, sont toujours à l'état de recherche et développement [27].

I.9.3. Stockage par hydrure

C'est le stockage sous forme atomique de l'hydrogène dans des composés connus sous le nom d'hydrure. Pendant le processus de formation de ce dernier, la réaction suivante a lieu :

$$M + x/2\ H_2 \rightarrow MH_x + \Delta H \quad \text{.....(I.1)}$$

Le processus de décharge d'hydrogène peut être représenté par la réaction suivante :

$$MH_x + \Delta H \rightarrow M + x/2\ H_2 \quad \text{.....(I.2)}$$

Lors des processus de chargement et déchargement, la pression P est liée à la température T par l'équation de Van't Hoff :

$$\ln P = \Delta H/RT - \Delta S/R \quad \text{.....(I.3)}$$

M : métal ou alliage (exemples : $LaNi_5$, TiFe, Mg, etc.)

H_2 : hydrogène moléculaire

MH_x : hydrure métallique formé (hydrogène stocké sous forme solide)

ΔH : chaleur dégagée ou absorbée pendant la réaction (enthalpie)

ΔS : l'entropie du processus d'hydrate

R : est la constante du gaz

Il y' a deux classes d'hydrure. Il y'a les hydrures métalliques et les hydrures complexes :

- **Hydrures métalliques :** ce sont des hydrures à liaisons métalliques. Ces hydrures, agissant comme une éponge, sont capables d'absorber les atomes d'hydrogène dans les défauts du réseau. L'absorption d'hydrogène, connue aussi comme l'hydrate, a lieu à des températures et pressions caractéristiques. Plusieurs familles d'hydrures de métal existent ou sont en cours de développement. Si la capacité de stockage des hydrures métalliques est très satisfaisante, leur densité volumique et leur capacité de désorption sont loin de cela.
- **Hydrures complexes :** ils sont des structures avec des métaux alcalins (généralement lithium et sodium). L'hydrogène est un élément du groupe 13 (généralement le bore et aluminium). Son stockage dans les hydrures complexes est effectué par des réactions chimiques et l'occupation du site sans treillis comme le cas dans les hydrures métalliques. Dans ce cas, le processus est également limité par les faibles densités d'énergie, la lenteur cinétique de remplissage et cout élevé des hydrures.
- **Autres procédés de stockage :** Autres types d'hydrures tels que la famille des Amin boranes (NHX BHX) sont en cours de développement. Ils constituent un moyen très prometteur de stockage de l'hydrogène en particulier pour les applications. En effet, certains de ces hydrures, tels que le composé NH3 BH3 peuvent absorber au moins 20% en poids, sont stables dans des conditions normales et peuvent absorber à des températures modérées.

L'hydrogène est utilisable soit directement dans des moteurs à combustion interne soit comme combustible dans une pile à combustible (PAC). Une PAC est un générateur électrochimique d'énergie permettant de transformer directement l'énergie chimique d'un combustible (hydrogène, hydrocarbures, alcools, …) en énergie électrique et thermique sans apport d'énergie extérieure [27].

I.10. L'utilisation de l'hydrogène

L'hydrogène produit par électrolyse peut être utilisé dans de nombreux secteurs. Par exemple, il peut être utilisé comme matière première dans plusieurs procédés industriels.

Le marché mondial de la matière première d'hydrogène a été récemment estimé à 115 milliards USD et devrait augmenter de manière significative au cours des prochaines années pour atteindre 155 milliards USD d'ici 2022 [28].

La demande annuelle mondiale en hydrogène était d'environ 8 ex joules, en 2015 [29]. Les principales productions industrielles, dans lesquelles l'hydrogène est utilisé, sont :

- **Produits chimiques :** la production d'ammoniac, de polymères et de résines les principaux marchés de l'hydrogène industriel.
- **Raffinage :** L'hydrogène est utilisé pour les procédés d'hydrocraquage et d'hydrotraitement (désulfuration des carburants). Les raffineries représentent le deuxième consommateur d'hydrogène industriel.
- **Fer et acier :** un procédé innovant, appelé réduction directe du fer via l'hydrogène

La plus grande part de la demande en hydrogène provient des secteurs de la chimie et du raffinage. D'autres secteurs industriels utilisent également de l'hydrogène, mais leur part cumulée dans la demande mondiale est faible (seulement 1 % [28]). Il s'agit notamment de : fabrication de verre, de produits alimentaires (hydrogénation des graisses), de produits chimiques en vrac et de spécialité, de semi-conducteurs, de refroidissement de gros générateurs électriques fixes, de carburant propulseur pour véhicules aérospatiaux, etc.

Par conséquent, les grands secteurs industriels, tels que les raffineries et la production de produits chimiques, devraient être les premiers marchés clés du passage de l'électricité à l'hydrogène. En particulier, Al-Subaie et al. [30]

Ont affirmé que l'hydrogène peut être consommé instantanément par les industries du raffinage du pétrole et de la chimie sans qu'il soit nécessaire d'augmenter la pénétration du marché des FCEV.

À l'heure actuelle, l'hydrogène utilisé comme matière première industrielle est principalement produit sur site dans des usines dédiées ou comme sous-produit d'autres procédés (20 à 30 % [29]). Par exemple, en Australie, l'hydrogène est produit en grande partie par gazéification du charbon.

Selon le Conseil de l'hydrogène [29], d'ici 2050, la demande d'hydrogène dans les seules applications actuelles pourrait atteindre 70 millions de tonnes (28 EJ), tirée par l'augmentation de la consommation mondiale.

I.9. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exploré les fondamentaux de l'hydrogène vert, depuis sa définition et ses différentes formes jusqu'à ses méthodes de production. L'électrolyse de l'eau s'est révélée être une approche prometteuse pour générer un hydrogène propre, bien qu'elle présente encore des défis technologiques et économiques à surmonter.

Le stockage de l'hydrogène constitue également un enjeu majeur pour son utilisation à grande échelle. Différentes méthodes ont été abordées, notamment le stockage sous forme gazeuse, liquide, par adsorption ou sous forme d'hydrures. Chacune de ces solutions présente des avantages et des limites en termes de sécurité, d'efficacité et de faisabilité industrielle.

Ainsi, la maîtrise des technologies de production et de stockage est essentielle pour faire de l'hydrogène une véritable alternative énergétique durable. Les chapitres suivants permettront d'approfondir son rôle dans la transition énergétique et ses diverses applications industrielles et environnementales

Chapitre II : Revue de littérature sur les techniques de stockage de l'hydrogène

II.1. Introduction

De nombreuses recherches se sont concentrées sur l'amélioration des méthodes de stockage de l'hydrogène, qui sont essentielles pour son utilisation pratique. En raison de sa faible densité volumique et de ses propriétés physico-chimiques particulières (diffusivité, inflammabilité, interaction avec les matériaux), diverses technologies ont été développées pour assurer un stockage sûr, efficace et économique.

Dans cette partie nous allons balayer plusieurs travaux scientifiques publiés dans la littérature dans le but de comprendre les différentes méthodes de stockage de l'hydrogène.

II.2. Analyse des travaux scientifiques effectués

II.2.1 Facteurs de sécurité et performances

Cumber et al.[31] s'est attaché à représenter efficacement l'interaction entre la turbulence et le rayonnement dans les flammes de jets d'hydrogène subsoniques, offrant ainsi des perspectives précieuses sur les facteurs de sécurité et de performance. Ricci et al.[32] soulignent l'interdisciplinarité du domaine dans la transition vers des systèmes énergétiques basés sur l'hydrogène par l'intégration du progrès technologique, l'évaluation des risques et les points de vue du public. Sekaran et al. [33] ont mené une étude sur les facteurs à prendre en compte lors de la conception des réservoirs d'hydrogène liquide pour les systèmes de propulsion turboélectriques distribués, en se concentrant sur les difficultés particulières associées à l'utilisation de l'hydrogène liquide comme carburant. D'importants efforts de recherche ont été consacrés à la compréhension et à l'amélioration des technologies de l'hydrogène.

II.2.2 Stockage d'hydrogène (absorption, matériaux, structures)

Dai et al.[34] ont créé des techniques de calcul pour modéliser l'absorption d'hydrogène dans les réacteurs métal-H2, contribuant ainsi à la progression de notre compréhension du stockage de l'hydrogène à l'état solide. Chibani et al.[35] ont étudié l'impact de divers améliorateurs de transfert thermique sur le stockage de l'hydrogène

dans des conteneurs de charbon actif grâce à l'utilisation d'un stockage d'énergie thermique latente basé sur un matériau à changement de phase.

L'utilisation de l'hydrogène en tant que source d'énergie primaire a stimulé des recherches et des progrès considérables. Parmi ces options, les réservoirs de stockage d'hydrogène comprimé sont privilégiés en raison de leur efficacité énergétique supérieure, de leur fiabilité, de leur légèreté et de leur conception simple. Il existe actuellement cinq catégories distinctes de réservoirs sous pression pour le stockage de l'hydrogène comprimé, classées en fonction des caractéristiques de leurs matériaux.

Les réservoirs sous pression de type 3 et 4 sont particulièrement appréciés pour leur poids réduit et leur capacité à stocker de l'hydrogène à des pressions élevées. Cet article propose un examen complet des efforts de recherche axés sur la simulation et l'analyse du processus de remplissage rapide de l'hydrogène. Des méthodologies de dynamique des fluides numérique (CFD), telles que le modèle de gaz réel Redlich-Kwong et le modèle de turbulence k-epsilon, ont été utilisées pour explorer les fluctuations de température pendant le ravitaillement. Les résultats de ces études fournissent des indications précieuses sur l'impact de divers facteurs sur l'élévation de la température à l'intérieur des bouteilles de stockage d'hydrogène

II.2.3 Stockage dans réservoirs à haute pression et remplissage rapide

Liu et al.[36] ont déterminé que la compréhension et la régulation des fluctuations de température au cours du processus de ravitaillement en hydrogène sont de la plus haute importance. Leurs résultats empiriques offrent des perspectives significatives pour l'amélioration de procédures de ravitaillement en hydrogène plus sûres et plus efficaces. La Figure II.1 montre l'augmentation de température obtenue à partir de tous les capteurs. L'augmentation de la température à l'extérieur du cylindre est en retard par rapport à l'intérieur d'environ 250 secondes. Comme il est difficile d'obtenir la température à l'intérieur du cylindre, certains chercheurs pensent qu'il est possible d'étudier la température à l'extérieur des parois du cylindre afin de comprendre la température à l'intérieur du cylindre. Liu et al.[36] pensent que cette méthode n'est pas facile à mettre en œuvre. En effet, lorsque la température à l'intérieur du cylindre atteint son maximum, la température à l'extérieur du cylindre augmente.

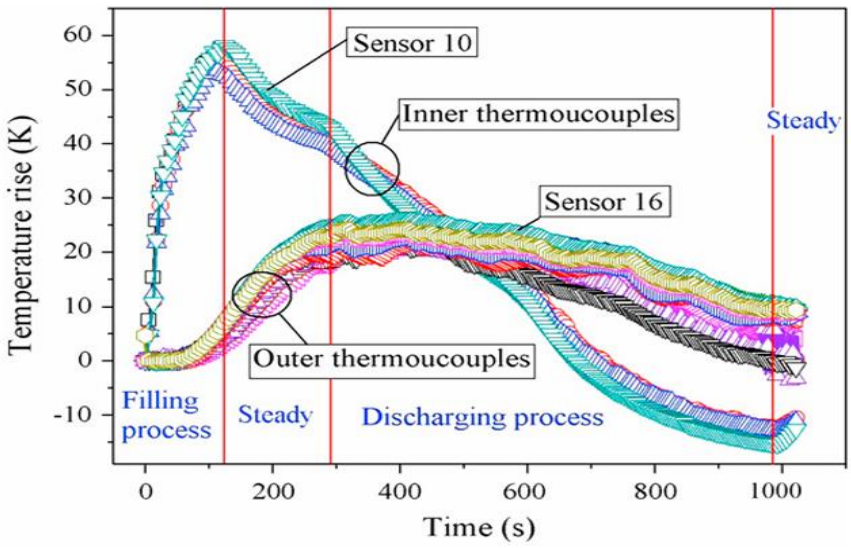


Figure II.1 : Valeur de l'augmentation de température de tous les capteurs pendant le remplissage, de maintien et de décharge

Li et al.[37] ont utilisé le modèle de gaz réel Redlich-Kwong et le modèle de turbulence k-epsilon pour simuler le processus de remplissage de carburant tout en ignorant les effets de la gravité. Fluent, un programme de CFD, a été utilisé pour la simulation. L'étude a permis d'observer des variations de température dans les bouteilles sous pression en fonction de leur taille, de leur diamètre et de leur débit.

La bouteille présentant un rapport longueur/diamètre plus élevé subit une augmentation de température plus importante pendant le ravitaillement, tandis que la bouteille présentant un rapport longueur/diamètre plus faible a la température la plus élevée à la fin du ravitaillement. La température diminue pendant le ravitaillement avec un débit croissant par rapport au ravitaillement avec un débit constant, et les résultats de l'analyse ont été comparés à la fois au modèle théorique et aux résultats expérimentaux. La figure II.2 montre l'évolution des températures maximales et moyennes pour l_l/D_i=3,6 l_l/D_i = 3,6l_l/D_i=3,6 et l_l/D_i=2,0l_l/D_i = 2,0l_l/D_i=2,0. Dans les deux cas, la température maximale dépasse largement la température moyenne pendant le ravitaillement. La température moyenne suit une tendance exponentielle avec le temps d'écoulement.

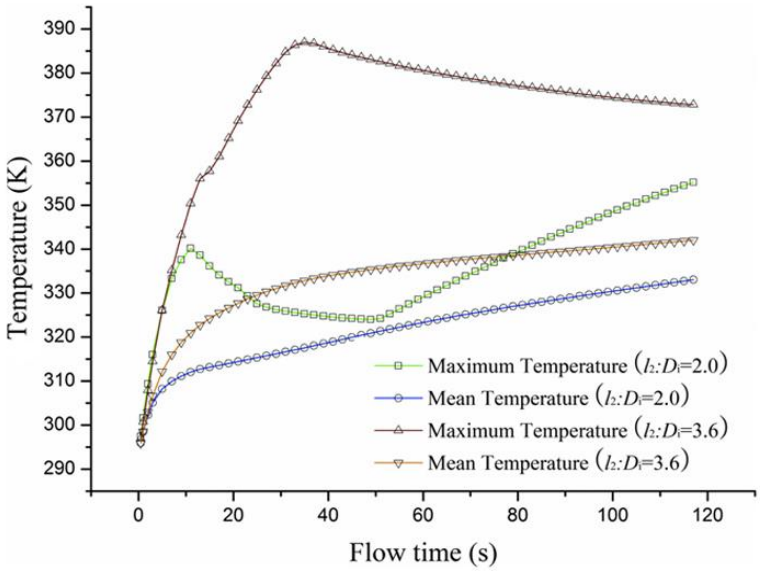


Figure II.2 : Température maximale et moyenne pendant le ravitaillement en carburant avec différents rapports longueur/diamètre [37]

Galassi et al.[38] ont utilisé la dynamique des fluides numérique (CFD) pour modéliser le remplissage rapide d'hydrogène dans un récipient sous pression de type 4 de 70 MPa, en utilisant l'équation des gaz réels de Redliche-Kwong, le modèle de turbulence k-epsilon modifié et en tenant compte des effets de la gravité.

La précision du modèle a été évaluée en comparant la simulation aux données expérimentales. L'étude a évalué l'état de fonctionnement à deux moments distincts du remplissage, et a constaté que la variation de la température à l'intérieur du réservoir correspondait aux données expérimentales dans les deux cas, et que les taux d'erreur étaient minimes (Figure II.3).

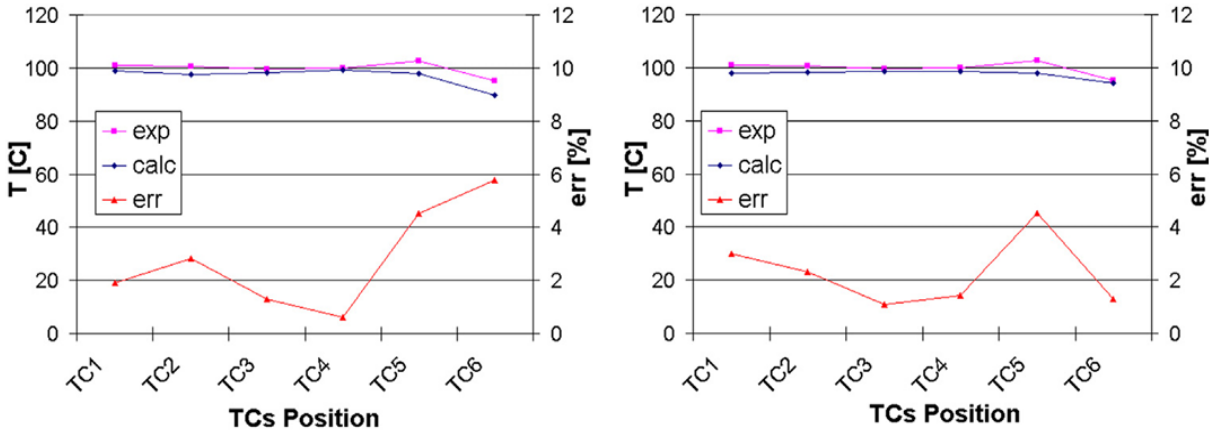


Figure II.3 : Précision de la température maximale prédite à la position des CTs pour Pos1 et Pos2

Heitsch et al.[39] ont effectué une simulation du processus de remplissage rapide des réservoirs d'hydrogène à l'aide du logiciel de dynamique des fluides numérique (CFD) disponible dans le commerce, CFX. Leur recherche a consisté en deux études distinctes, explorant l'impact de la pression initiale du gaz et du matériau du revêtement sur l'augmentation de la température du gaz à l'intérieur du réservoir comme le montrent figure II.4 et figure II.5.

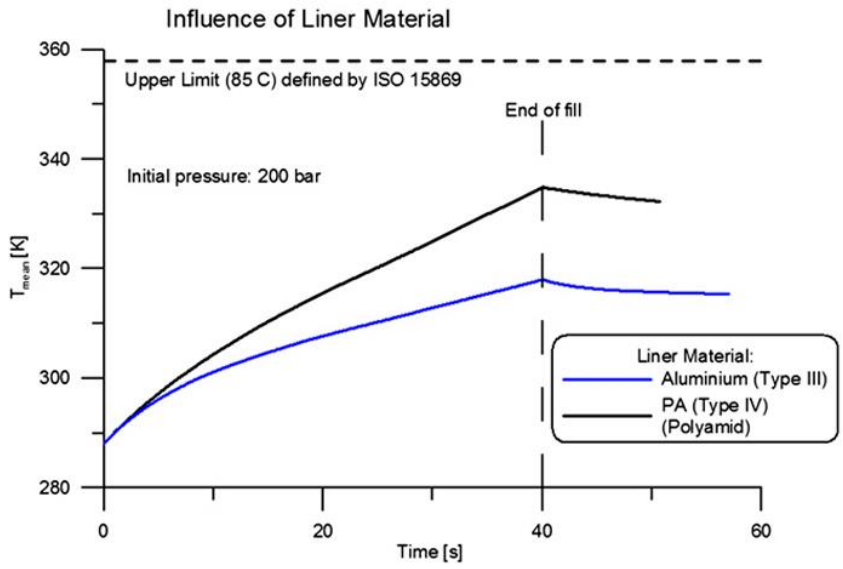


Figure II.4 : Influence du matériau de la gaine sur la température du réservoir [39]

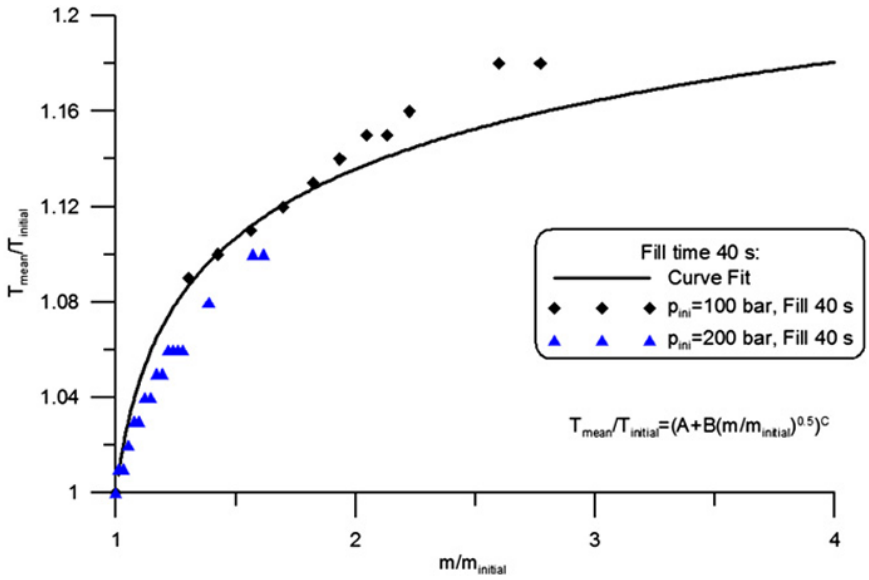


Figure II.5: Corrélation généralisée entre la température et la masse par rapport aux deux essais analysés [39]

Dicken et Mérida [40]-[41] ont présenté une formulation axisymétrique bidimensionnelle simplifiée d'une bouteille d'hydrogène pressurisée à 35 MPa pour estimer l'augmentation de la température et de la pression du gaz au cours du processus de remplissage.

Zhao et al.[42] ont mené une étude sur le remplissage rapide d'une bouteille de véhicule à pile à hydrogène de 70 MPa à l'aide d'un modèle CFD axisymétrique 2D. Leur recherche s'est concentrée sur l'étude des réponses thermodynamiques au cours du processus de remplissage rapide en modifiant le modèle d'augmentation de la pression et la période de remplissage. La simulation a utilisé un modèle de turbulence actualisé varepsilon et a utilisé les données de la base de données du National Institute of Standards and Technology pour déterminer les caractéristiques thermodynamiques et l'équation d'état de l'hydrogène gazeux. Les résultats ont révélé que, dans le cadre d'un modèle d'augmentation linéaire de la pression avec des temps de remplissage variables, la température maximale finale du gaz augmentait à mesure que le temps de remplissage diminuait (Figure II.6).

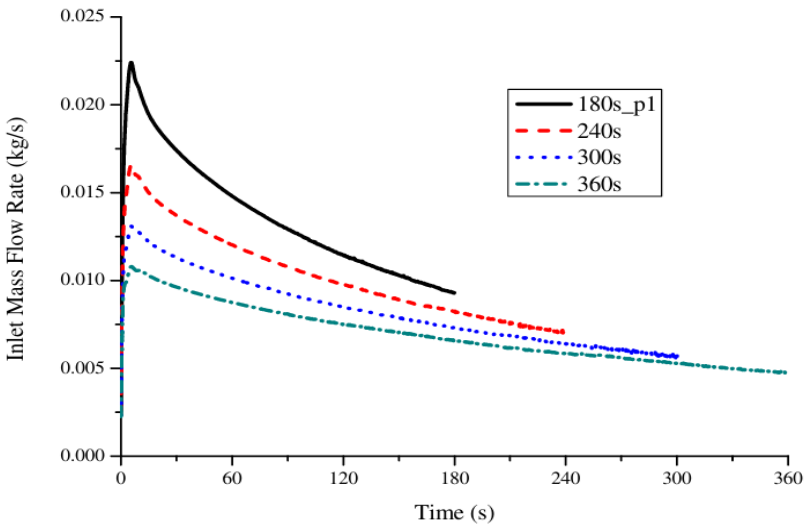


Figure II.6 : Débit massique à l'entrée en fonction du temps pour différents remplissages temps [42]

Wu et al. [43] ont utilisé un modèle de simulation CFD 3D pour étudier l'augmentation de la température à différents débits massiques. L'augmentation de la température à différents débits massiques. Le modèle CFD tient compte de la base de données des gaz réels du NIST, du modèle standard k-ε et de l'effet de gravité. Ils ont étudié une technique de remplissage en deux étapes, différée dans le temps et basée sur le contrôle du débit massique. Ils ont divisé la procédure de remplissage en trois étapes et établi des points de retard distincts. Ils ont découvert que le temps de retard avait un impact significatif sur l'augmentation de la température lorsqu'ils comparaient l'augmentation de la température de différents états. Ils ont donc conclu que la technique la plus plausible consistait en deux points de retard de 30 et 85 secondes, séparés par un intervalle de 15 secondes. En utilisant cette stratégie, ils ont constaté que la recharge était terminée en 155 s, ce qui a permis de réduire le temps de recharge. La Figure II.7 montre les six cas avec différentes durées de remplissage et les deux mêmes durées de retard de 15 secondes.

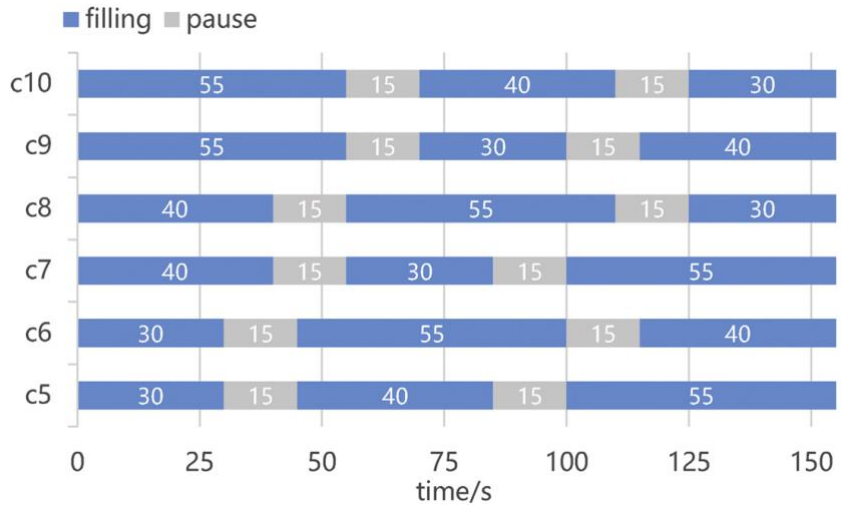


Figure II.7 : Six cas avec différentes durées de remplissage et les deux mêmes durées de retard de 15 secondes [43]

En outre, Bai et al.[44] et Luo et al. [45] ont formulé un modèle simplifié pour étudier l'augmentation de la température pendant le ravitaillement rapide en hydrogène. Leurs conclusions indiquent que le coefficient de commutation de pression et la température de pré-refroidissement exercent une influence considérable sur la durée du ravitaillement, les conditions thermiques et l'état de charge. En utilisant un algorithme d'optimisation multi-objectif, ils ont réussi à accélérer les processus de ravitaillement, à réduire la consommation d'énergie et à améliorer l'état de charge.

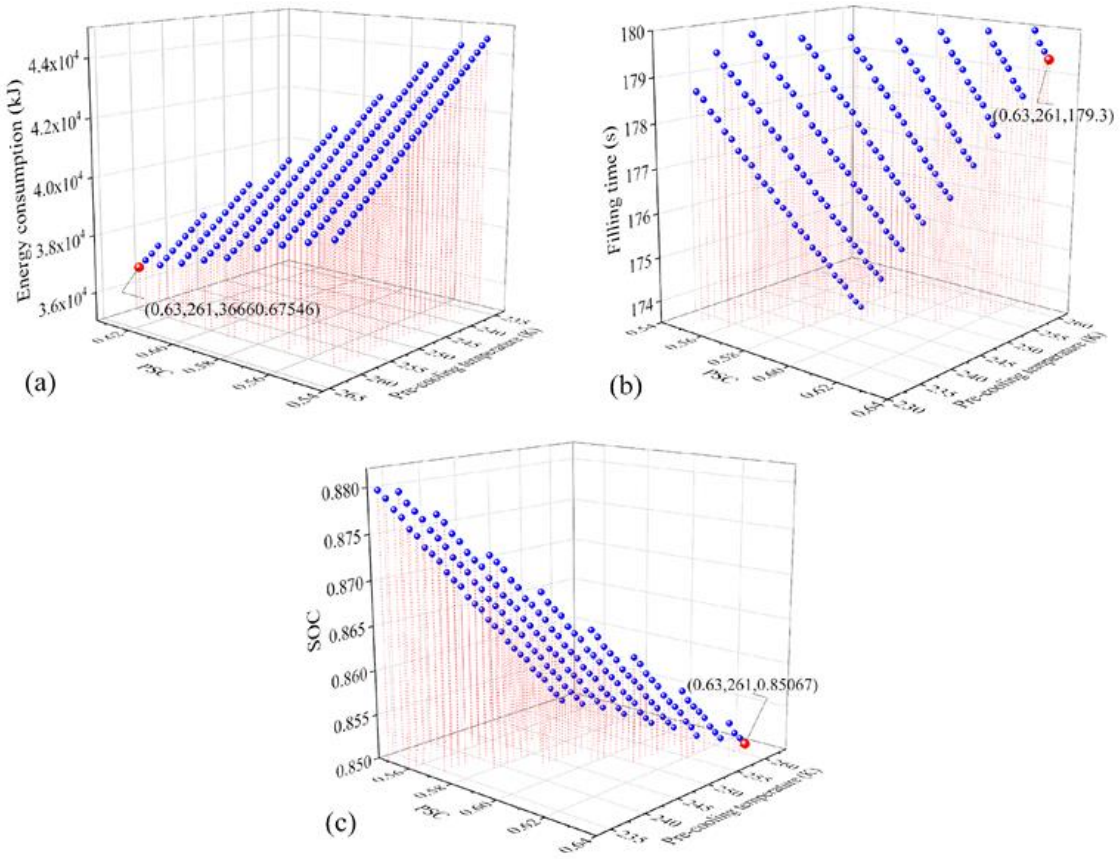


Figure II.8 : Résultat optimisé pour une pression initiale de 2 MPa et une température ambiante de 293 K. (a) Consommation d'énergie en fonction de différents paramètres. (b) SOC avec différents paramètres. (c) Temps de remplissage en fonction de différents paramètres [45]

Sapre et al.[46] ont examiné l'influence de paramètres tels que la température d'alimentation en hydrogène et le taux de remplissage sur la densité de stockage de l'hydrogène. Leurs conclusions indiquent que la pression, le temps de remplissage et la température d'alimentation contribuent de manière significative à une densité de stockage élevée, le taux de charge jouant un rôle efficace dans l'augmentation. Cela suggère une nouvelle approche du comportement de l'alimentation en carburant dans les réservoirs de stockage de type IV pour les véhicules à pile à combustible (Figure II.9).

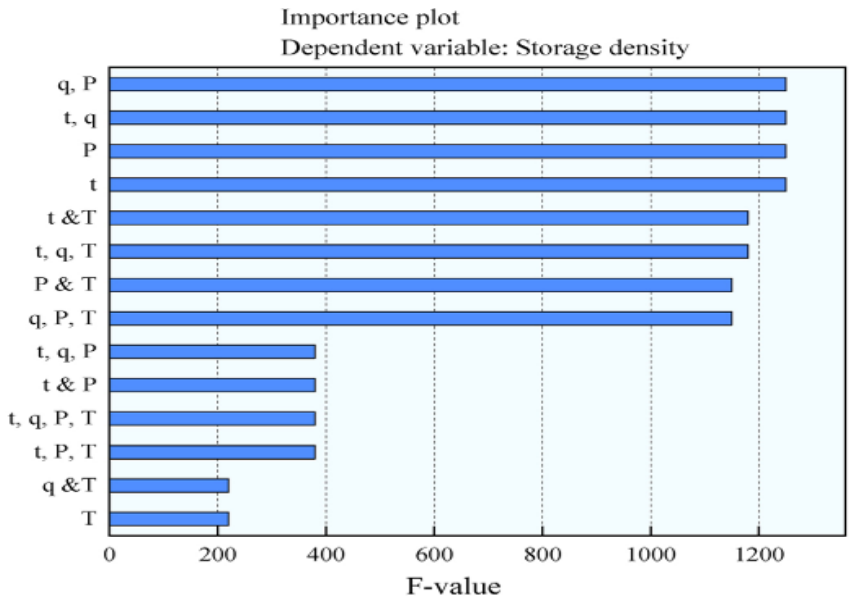


Figure II.9 : Contribution des paramètres du processus à la densité de stockage [46]

Dans leur étude, Suryan et al.[47] ont évalué la concordance entre la simulation et les résultats expérimentaux concernant cinq modèles de turbulence discrets dans le domaine de la dynamique des fluides numérique (CFD). Figure II.10 montre la distribution de la température obtenue avec les différents modèles à 30 s. La région du panache d'entrée, plus froide, et la région de la masse, à haute température, sont nettement prises en compte par tous les modèles de turbulence considérés dans leur étude.

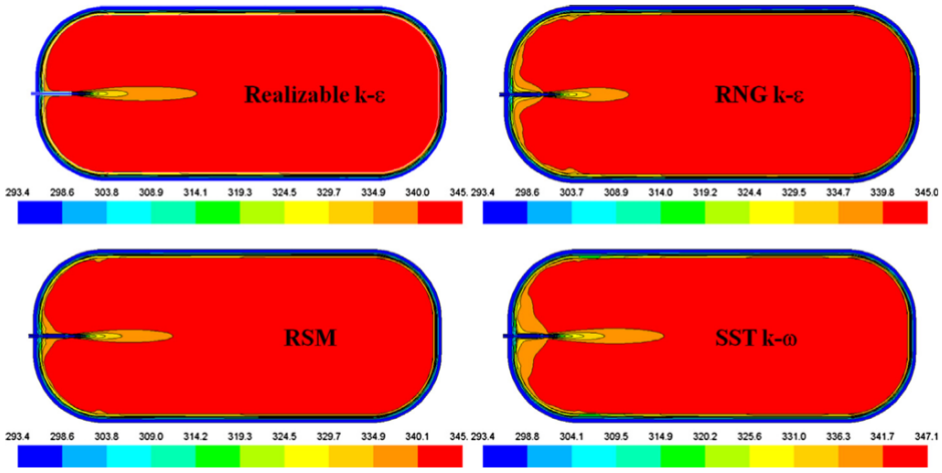


Figure II.10 : Comparaison de la distribution de la température du gaz avec différents modèles de turbulence (t =30 s) [47]

Melieo et Baraldi [48] ont examiné diverses stratégies de remplissage pour les bouteilles de gaz, en tenant compte des paramètres de pression et de température du gaz injecté. L'étude s'est concentrée sur l'analyse des effets de différentes combinaisons de pression et de température au cours du processus de remplissage.

Melideo et al. [49] ont effectué une simulation CFD d'un réservoir de type 3, 40L rempli et déchargé. Ils ont également comparé la précision des résultats de la simulation aux données expérimentales. La plage de température pour la conception est de -40 ◦C à 85 ◦C pour des raisons de sécurité. Pour la simulation, ils ont utilisé le logiciel Ansys CFX. En ce qui concerne le remplissage, deux scénarios ont été envisagés. Dans le premier cas, le pré-refroidissement a été appliqué à la température initiale, puis le remplissage a eu lieu, et dans le second cas, le processus de pré-refroidissement a été appliqué après un certain temps pendant le remplissage. Malgré le fait que les états de pré-refroidissement étaient différents dans les deux situations, la température finale du gaz ne différait que de la température initiale (Figure II.11). Dans les deux situations, la température finale du gaz ne différait que de quelques degrés. Ils ont évalué deux scénarios alternatifs pour le déchargement. La température initiale a été fixée à 20 ◦C, le réservoir a été rempli à pleine capacité et l'étude a été réalisée dans deux conditions

de débit massique différentes. Dans les deux cas, la température la plus élevée a été atteinte dans la partie supérieure du réservoir.

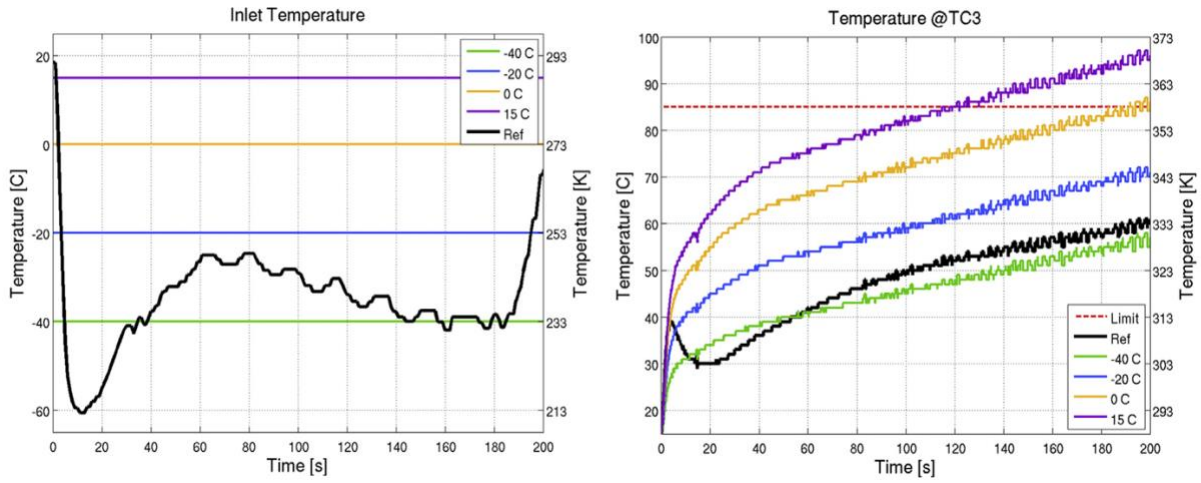


Figure II.11 : Température du gaz d'admission en fonction du temps (à gauche). Historique de la température du gaz du réservoir pendant le remplissage (à droite)

Dans leur étude, Ranong et al.[50] ont effectué une analyse numérique pour étudier la corrélation entre la vitesse sur la paroi intérieure et la vitesse à l'entrée pendant le chargement de l'hydrogène gazeux. Ils ont présenté la relation entre la distribution de la vitesse sur la paroi et la vitesse à l'entrée. Comme l'illustre la Figure II.12, la distribution statistique de la vitesse présente un degré remarquable d'indépendance par rapport à la durée du processus de remplissage. Ce phénomène est également applicable aux débits massiques variables et aux conditions thermiques d'entrée. L'universalité de la distribution statistique de la vitesse a été confirmée par des études supplémentaires qui prennent en compte les durées de remplissage brèves et prolongées des réservoirs de véhicules avec de l'hydrogène comprimé.

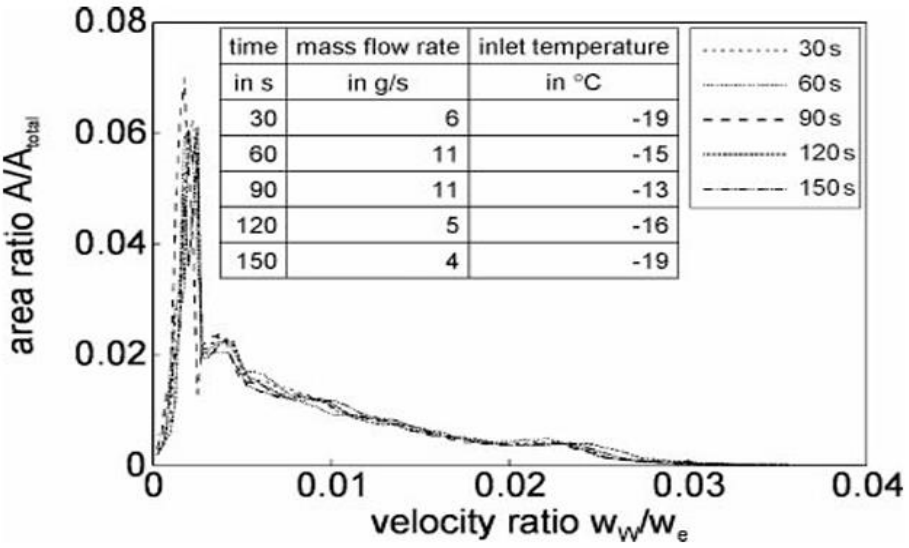


Figure II.12 : Distributions statistiques de la vitesse du gaz à proximité de la surface interne du réservoir

Zhang et al.[51] ont présenté une approche pour vérifier la distribution de l'épaisseur dans le dôme et la pression exercée par la charge dans les revêtements d'un réservoir de stockage d'hydrogène de type IV, avec une magnitude de 70 MPa. L'étude comprend l'utilisation de divers critères de défaillance dans l'analyse par éléments finis, avec l'intention d'évaluer l'arrangement conçu et, en fin de compte, de fournir un pronostic précis de la défaillance de la couche composite. La figure II.13 montre la contrainte de Mises sur le bossage et le liner. Sous une pression interne de 70 MPa, la contrainte maximale du bossage est de 295,7 MPa, ce qui ne dépasse pas la limite d'élasticité des matériaux. La contrainte maximale du liner est de 49,2 MPa au niveau des parties du dôme, ce qui est inférieur à la limite d'élasticité. Les résultats démontrent que la séquence d'empilement conçue satisfait aux critères de résistance du réservoir d'hydrogène. La figure II.14 présente les résultats basés sur le modèle d'endommagement progressif, indiquant que seules la rupture de la matrice et la rupture par cisaillement de certaines couches composites se produisent dans la partie cylindrique sous une pression interne de 175 MPa. Cependant, la rupture des fibres ne se produit pas, ce qui montre que le réservoir de stockage n'éclate pas. Par conséquent, on estime qu'un tel modèle, conçu à l'aide des méthodes proposées dans cet article, satisfait aux exigences de conception.

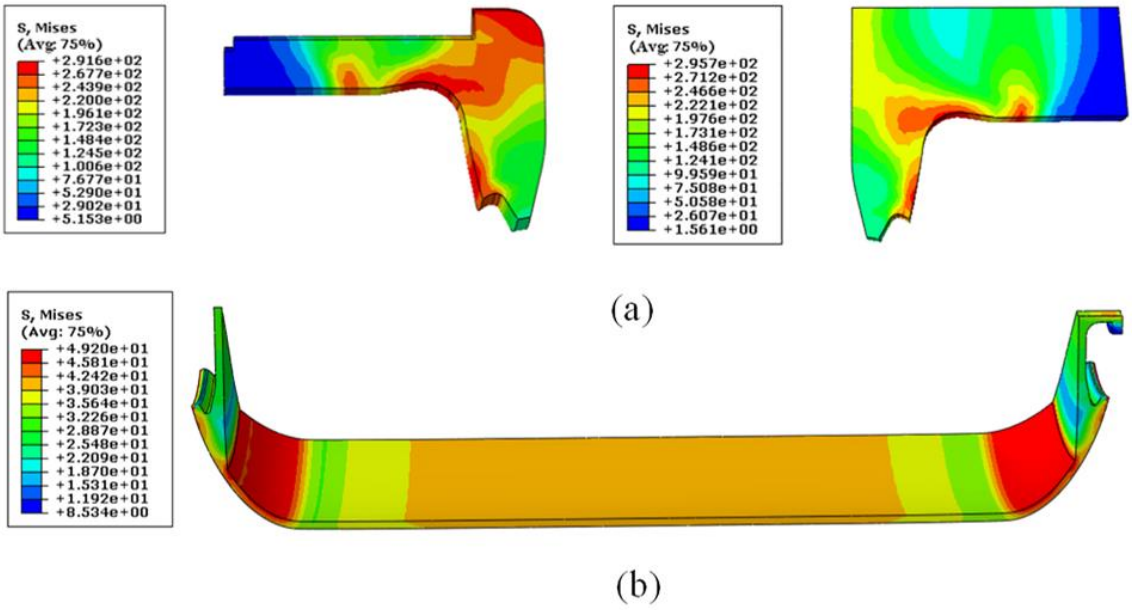


Figure II.13 : Répartition des contraintes dans le bossage et la chemise : (a) répartition des contraintes dans le bossage ; (b) répartition des contraintes dans la chemise

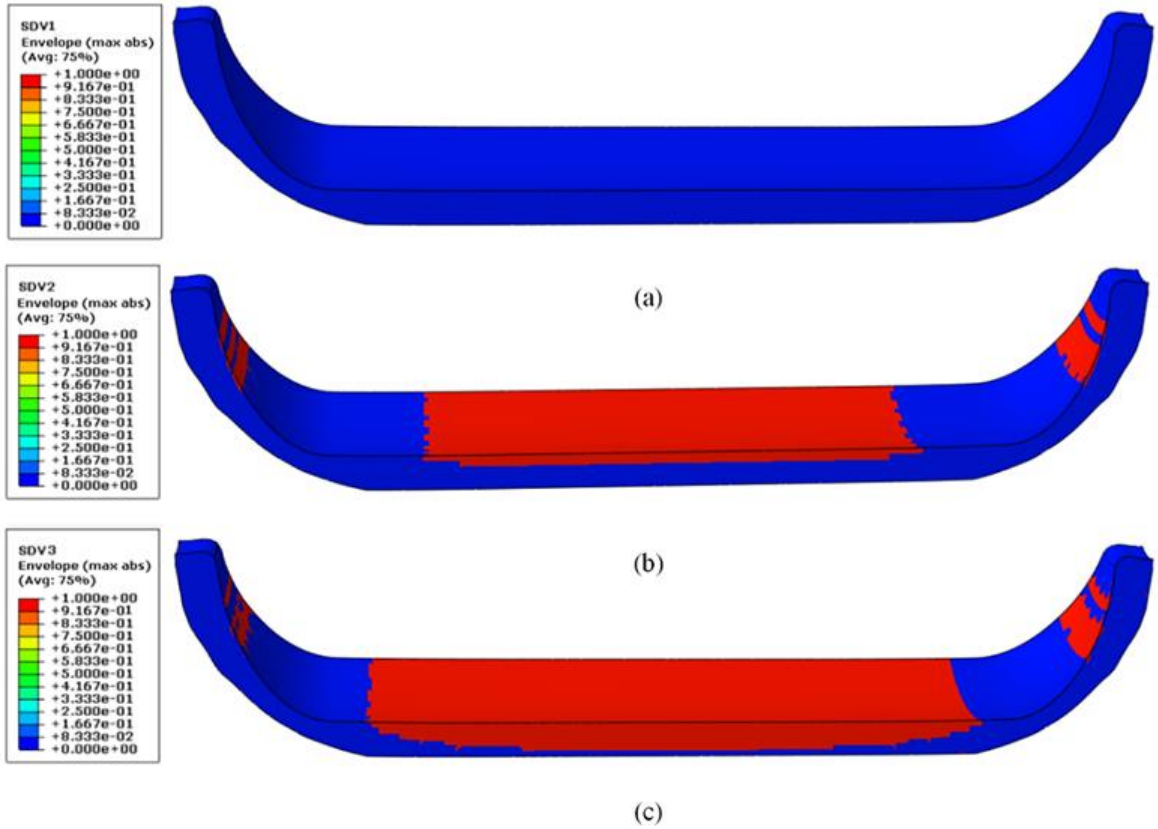


Figure II.14 : Résultats calculés par analyse de défaillance progressive : (a) défaillance de la fibre (b) défaillance de la matrice (c) défaillance par cisaillement

Aguilera et al.[52] ont mené une étude pour explorer l'impact des propriétés thermiques des gaines et des techniques de pré-refroidissement des gaines lors du remplissage rapide des réservoirs d'hydrogène. Dans les applications liées au transport, le remplissage rapide de réservoirs d'hydrogène à haute pression sur une courte durée entraîne une augmentation significative de la température. Cette augmentation de la température peut compromettre l'intégrité structurelle du système de stockage et la sécurité globale du processus de remplissage. Cette recherche présente et évalue des approches alternatives et économes en énergie pour la gestion thermique pendant le remplissage rapide des réservoirs d'hydrogène.

Ces stratégies comprennent des modifications des propriétés thermiques du revêtement du réservoir et l'utilisation des systèmes de réfrigération embarqués existants. Les résultats de cette étude démontrent que les solutions proposées offrent des

alternatives robustes et efficaces aux méthodes traditionnelles de pré-refroidissement de l'hydrogène.

Bilgili et al. [53] ont étudié l'impact de différents modèles de gaz réels sur le remplissage des réservoirs d'hydrogène à l'aide de simulations CFD. Ils ont constaté que si la température et la pression n'étaient pratiquement pas affectées par le choix de l'équation d'état, le temps de remplissage variait légèrement. Par rapport au modèle Redlich-Kwong, les durées de remplissage ont augmenté de 1,3 % (Soave-RK), 1,5 % (Aungier-RK), 5,85 % (Peng-Robinson) et 24,2 % (gaz idéal), soulignant l'importance d'une modélisation précise du gaz. Figure II.15 montre la comparaison de l'étude numérique avec les résultats expérimentaux de Dicken et al. [40]. Ici, quatre équations de gaz réelles différentes montrent un incrément de température similaire par rapport au temps. L'étude expérimentale révèle des résultats de température plus élevés que les résultats numériques. Les différences entre les résultats numériques et expérimentaux au milieu de la solution sont élevées, mais à la fin de la solution, cette différence diminue. En particulier, autour de l'intervalle de temps de 35 à 40 s, les résultats numériques et expérimentaux convergent les uns vers les autres.

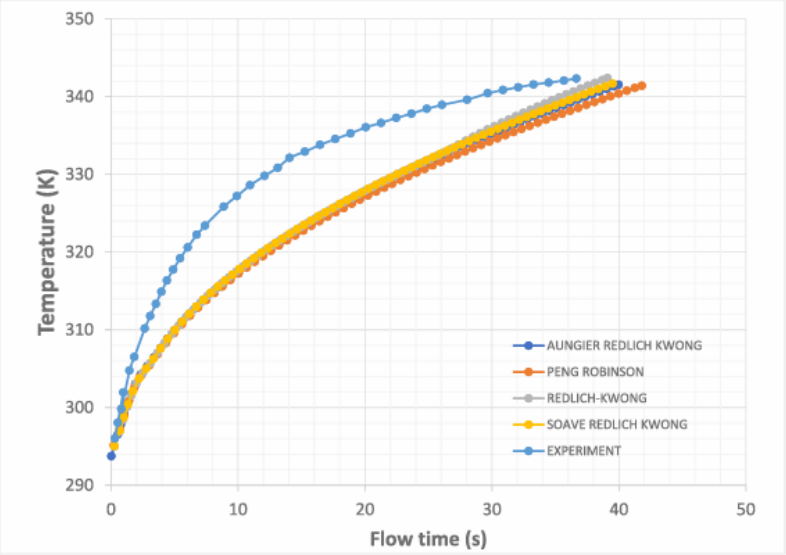


Figure II.15 : Température moyenne du gaz avec différents modèles de gaz réels [53]

Des calculs numériques ont été effectués à l'aide de quatre équations de gaz réel et de gaz idéal différentes. La comparaison de la variation de la pression maximale en fonction du temps pour chaque équation de gaz réel est illustrée à la figure 16. Comme le montre la Figure II.16, l'utilisation de l'équation de gaz idéal permet d'atteindre la pression finale de 35 MPa après un temps de remplissage plus long (217,7 s) que pour les équations de gaz réel. On constate que les équations de gaz réel donnent des résultats très proches, avec très peu de différences (moins de 10 s). L'équation de gaz PR atteint 35 MPa un peu plus tard (185,6 s) que les autres équations de gaz réel (SRK 177,6 s, ARK 178 s, RK 175,35 s). La variation de la température maximale au fil du temps est illustrée à la Figure 2.17. Des valeurs de température similaires ont été obtenues grâce à des simulations réalisées avec des équations de gaz réelles (SRK 339,2 K, PR 339,04 K, ARK 339 K, RK 339,7 K). Suite à la simulation réalisée avec l'équation des gaz parfaits, la valeur de température maximale atteinte présente une faible différence (336,1 K). En bref, lorsque l'on compare les équations réelles des gaz résultant du remplissage, l'écart de température est inférieur à 1 K.

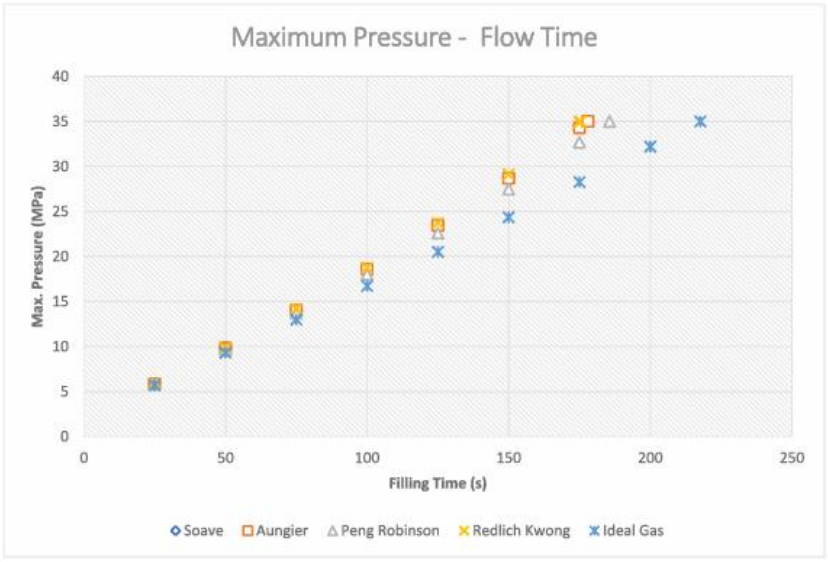


Figure II.16 : Comparaison du changement de pression maximale avec le temps de remplissage pour tous les modèles de gaz [53]

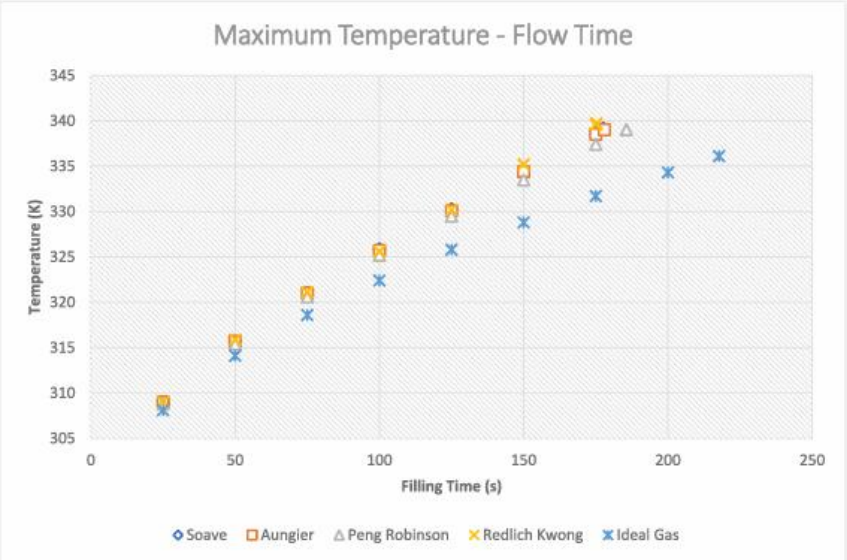


Figure II.17 : Comparaison du changement de température maximal avec le temps de remplissage pour tous les modèles de gaz [53]

Le stockage de l'hydrogène et le remplissage rapide restent des défis majeurs pour le développement de véhicules à hydrogène efficaces et sûrs. Parmi les différentes méthodes de stockage, les réservoirs d'hydrogène comprimé sont les plus largement adoptés en raison de leur équilibre entre poids, capacité et performances.

Cependant, le remplissage rapide introduit des contraintes thermiques et structurelles dues à l'élévation de température, principalement dues à la compression et à l'effet Joule-Thomson.

Des recherches récentes se sont concentrées sur l'amélioration de la sécurité et de l'efficacité de ce procédé grâce à des simulations numériques, notamment à l'aide de modèles CFD. Ces études soulignent l'importance de facteurs tels que le temps de remplissage, le coefficient de commutation de pression (CCP), la température d'entrée et les propriétés du gaz. Si différentes équations d'état du gaz réel ont un impact minimal sur les profils de pression et de température, elles influencent le temps de remplissage à des degrés divers, soulignant la nécessité d'une modélisation thermodynamique précise.

Globalement, l'optimisation des stratégies de remplissage, grâce à la modélisation du gaz réel, à la gestion thermique (par exemple, le pré-refroidissement) et au contrôle en

cascade, joue un rôle essentiel pour développer des solutions de stockage de l'hydrogène pratiques et évolutives pour la mobilité propre du futur.

II.3 Analyse et synthèse bibliographique

L'analyse des références révèle une large couverture des différentes approches de stockage de l'hydrogène, en particulier autour des technologies à haute pression et des stratégies de remplissage rapide. Une majorité des travaux ([36] – [50]) se concentrent sur la modélisation thermodynamique et CFD du remplissage de réservoirs sous haute pression (type III et IV), mettant en évidence les défis liés à la montée en température, à la distribution thermique transitoire et à l'optimisation du procédé pour garantir sécurité et performance.

D'autres études ([33], [34], [35], [51] et [53]) explorent le stockage solide ou cryogénique, intégrant des aspects de conception de réservoirs, de matériaux absorbants, ou encore de gestion thermique avancée. Ces contributions soulignent l'importance croissante des solutions alternatives au stockage par compression, notamment pour répondre aux exigences de densité énergétique et de sécurité dans les systèmes embarqués ou stationnaires. Enfin, quelques références ([31], [32]) offrent un éclairage complémentaire sur la modélisation fondamentale ou les dimensions sociotechniques de la transition vers l'hydrogène, enrichissant la compréhension globale du sujet.

II.4. Conclusion

L'étude des références sélectionnées met en évidence la diversité des travaux de recherche portant sur les technologies de stockage de l'hydrogène, illustrant les avancées récentes tant sur le plan expérimental que numérique. Une part substantielle de ces contributions se concentre sur le stockage par compression, notamment à travers la modélisation CFD du remplissage rapide de réservoirs sous haute pression (type III et IV). Ces travaux analysent finement les phénomènes thermiques transitoires, les effets des conditions de remplissage et les stratégies d'optimisation en vue d'améliorer la sécurité, la durabilité et l'efficacité énergétique des systèmes.

Chapitre III : Simulation et résultats

III.1. Simulation du processus de remplissage

Dans la présente étude, nous procédons à un examen approfondi des fluctuations dynamiques de la température du gaz à l'intérieur du réservoir au cours du processus rapide de remplissage de l'hydrogène comprimé. Les variations de température observées peuvent être attribuées à quatre facteurs thermodynamiques distincts, comme le montre la Figure III.1.

Premièrement, l'hydrogène possède des caractéristiques uniques qui le distinguent des autres gaz en raison de son coefficient Joule-Thomson négatif. Lorsque l'hydrogène traverse le dispositif d'étranglement pour passer d'un réservoir à haute pression à un réservoir à basse pression, il subit une augmentation de température, communément appelée effet Joule-Thomson. Cet effet est dû au coefficient Joule-Thomson négatif, particulièrement visible à des températures supérieures à 195 K dans la plage de température de remplissage de l'hydrogène, au cours du processus de transfert.

Deuxièmement, l'augmentation de la température pendant le remplissage résulte de la conversion de l'énergie cinétique. L'hydrogène, lorsqu'il est soumis à une pression et à une vitesse élevée, subit une compression dans le réservoir de stockage, convertissant son énergie cinétique en énergie interne et entraînant une augmentation de la température.

Troisièmement, le remplissage continu de gaz à haute pression dans la bouteille contribue à l'élévation de la température par compression. Il convient de noter que ce troisième facteur a la plus grande influence parmi tous les facteurs affectant l'augmentation de la température. Enfin, un quatrième facteur concerne le transfert de chaleur du réservoir d'hydrogène à l'environnement pendant le processus de remplissage. Ce transfert de chaleur se produit par convection entre la paroi extérieure du réservoir d'hydrogène et l'environnement, ainsi que par conduction de la chaleur à l'intérieur de la paroi.

En outre, la convection a lieu entre l'hydrogène et la paroi intérieure du réservoir. Ces mécanismes complexes de transfert de chaleur atténuent collectivement l'augmentation

globale de la température, soulignant la nature complexe de la dynamique de la température dans le contexte des processus de remplissage de l'hydrogène.

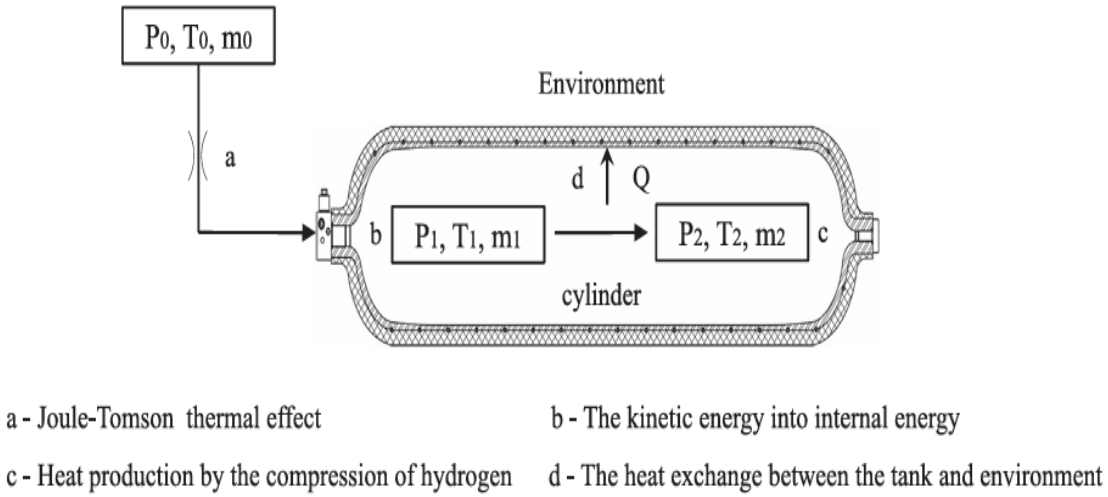


Figure III.1 : Modèle thermique théorique des bouteilles composites lors du processus de remplissage d'hydrogène

III.1.1. Structure cylindrique pour le stockage de l'hydrogène

La bifurcation de la géométrie du modèle entraîne la division de la structure globale en deux domaines distincts. Le premier est le domaine fluide, chargé de contenir et de transporter l'hydrogène gazeux dans le système. Le second est le domaine solide, englobant à la fois le revêtement en aluminium et les zones stratifiées sur la paroi du réservoir et le tube d'admission. Le revêtement en aluminium est conçu pour assurer l'intégrité structurelle et la stabilité tout au long du fonctionnement. Les zones stratifiées sont constituées d'un mélange composite de fibres de carbone, choisi pour leur résistance et leur résilience combinées à diverses forces et pressions (Figure III.2).

Cette étude porte sur un réservoir de stockage d'hydrogène de Type 3 d'un volume de 74 litres et d'une pression maximale de 35 MPa, dans le but d'analyser l'influence de diverses conditions aux limites sur le processus de remplissage. L'étude examine en particulier comment les changements de la température initiale, de la pression initiale et du débit massique d'entrée affectent la dynamique thermique et de pression pendant le

remplissage rapide. En faisant varier systématiquement ces paramètres, la simulation fournit des informations essentielles sur le comportement thermique, la distribution de la pression et les implications potentielles en termes de sécurité associées à différents scénarios opérationnels. Ces résultats contribuent à l'optimisation des stratégies de remplissage et à l'amélioration des performances globales et de la sécurité des systèmes de stockage d'hydrogène dans des conditions de haute pression.

Les dimensions spécifiques du réservoir sont présentées dans le tableau III.1. Les propriétés des matériaux (aluminium et fibre de carbone) sont détaillées dans le tableau III.2. Ces propriétés jouent un rôle crucial dans les caractéristiques thermiques et structurelles des composants des réservoirs de stockage d'hydrogène. Les informations présentées dans ce tableau sont indispensables pour optimiser la conception et la composition des réservoirs, afin qu'ils répondent aux exigences de performance les plus strictes, voire les dépassent.

Figure III.2 : Structure du réservoir de stockage d'hydrogène comprimé

Tableau III.1 : Dimensions du réservoir (m)

DIMENSION	VALEUR (M)
LONGUEUR DU RESERVOIR	0.893
DIAMETRE INTERIEUR DU RESERVOIR	0.358
DIAMETRE EXTERIEUR DU RESERVOIR	0.396
DIAMETRE INTERIEUR DU TUBE D'ADMISSION	0.01
ÉPAISSEUR DE LA PAROI DU TUBE	0.004
LONGUEUR DU TUBE FAISANT SAILLIE DANS LE RESERVOIR	0.082

Comme le montre la Figure III.3, la géométrie a été initialement créée dans SolidWorks, puis exportée vers ANSYS en utilisant le format Parasolid (.x_t) pour assurer la compatibilité et préserver l'intégrité géométrique.

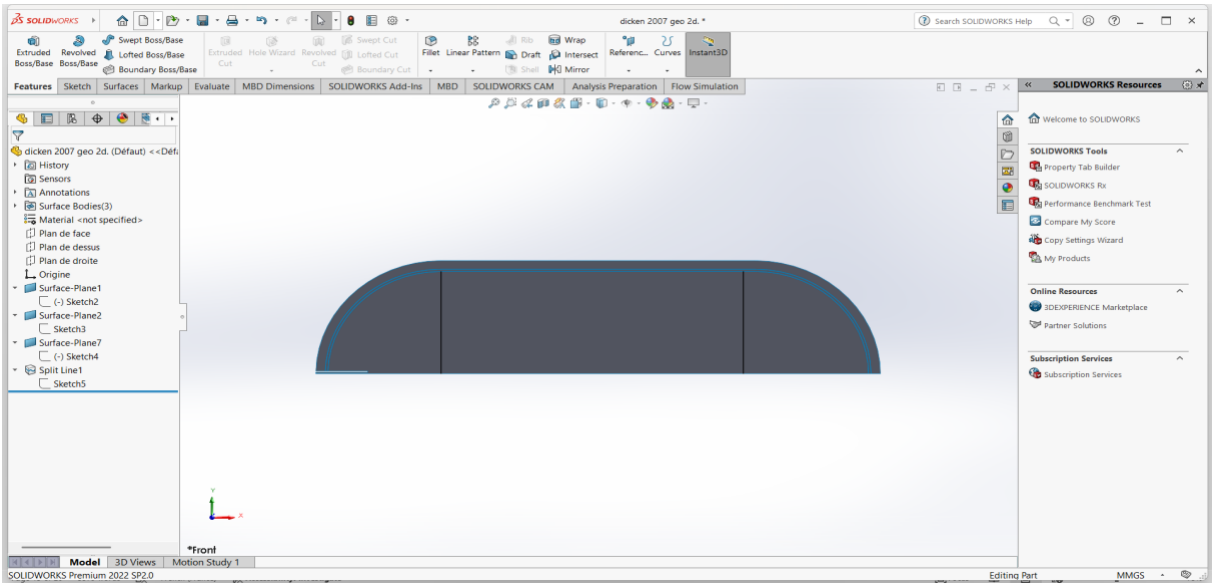


Figure III.3 : Conception initiale de la géométrie du réservoir dans SolidWorks

Tableau III.2 : Les propriétés matérielles du réservoir de stockage d'hydrogène comprimé

Matériel	Density (kg/m^3)	Chaleur spécifique (J/kg. K)	Conductivité thermique(W/m.K)	Épaisseur (m)
Aluminium	2700	902	238	0.004
Fibre de carbone	1513	920	3.72	0.015

III.1.2. Sensibilité de la grille

L'intégralité de la structure géométrique est discrétisée grâce à l'utilisation d'une grille quadrilatérale, comme l'illustre la Figure III.4.

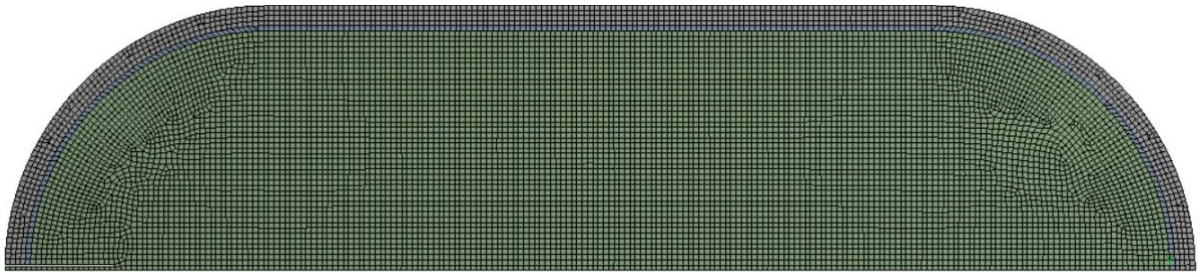


Figure III.4 : Maillage pour modèle 2D

Le test d'indépendance des mailles est appliqué à la géométrie pour 5 nombres différents de mailles. Les valeurs maximales de température sont résolues pour différents nombres de mailles. On constate que l'adoption d'une grille de 11757 cellules conduit à une valeur de température maximale presque identique à celle des grilles de 18956 cellules et de 26522 cellules. Cela montre que l'augmentation de la densité des mailles au-delà de 11757 cellules a peu d'influence sur la température maximale (Figure 3.5). Par conséquent, la grille de 11757 cellules est acceptée comme solution géométrique pour réduire le temps de calcul.

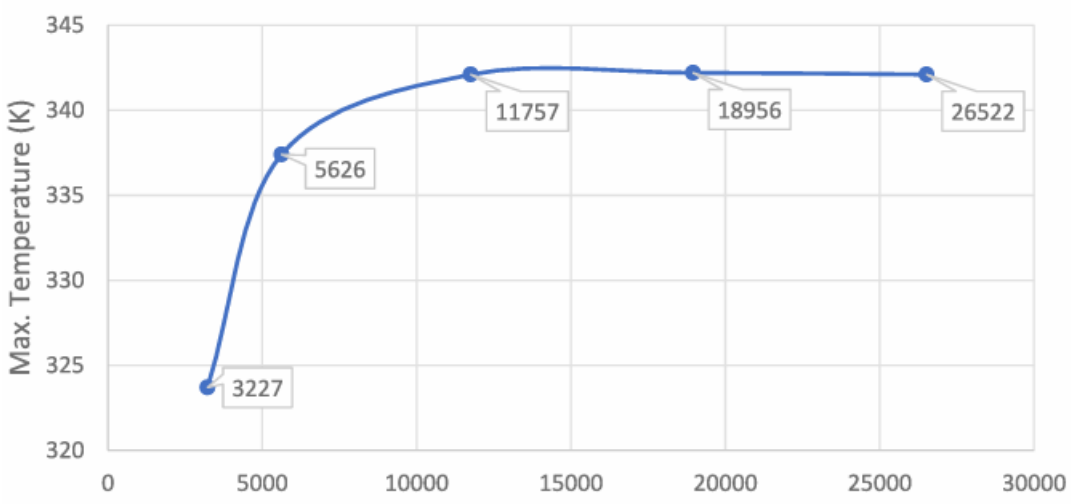


Figure III.5 : Température maximale avec différents nombres de mailles

La représentation visuelle de la figure 3.6 nous offre un examen complet et détaillé de l'imbrication et de l'interconnexion complexes entre les différents matériaux (fluide, revêtement et isolation) qui forment le contact maillé.

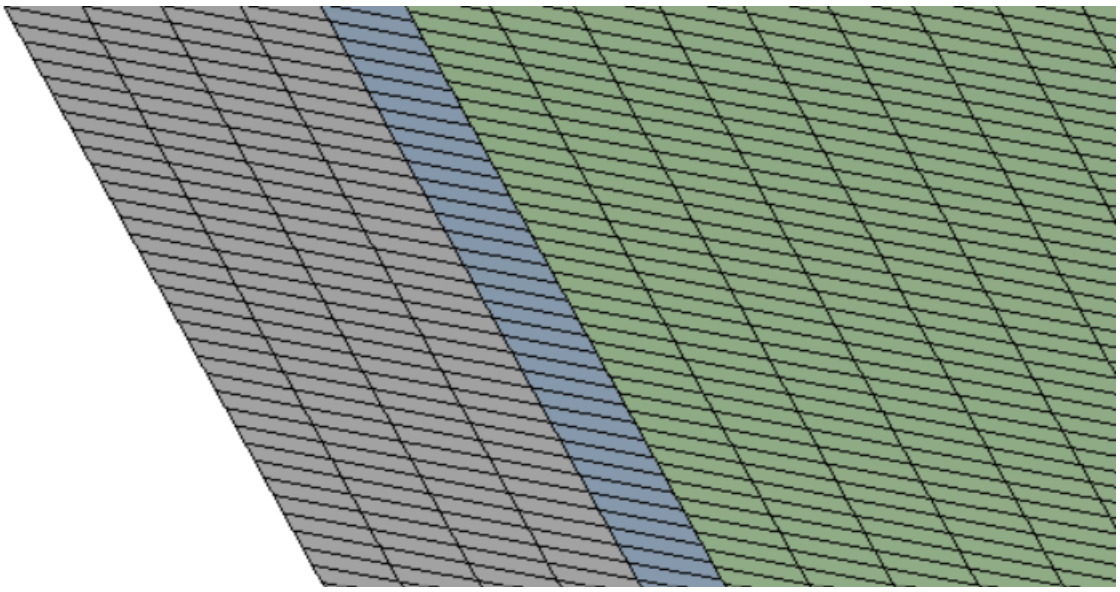


Figure III.6 : Détails de la grille (fluide, revêtement, isolation)

- **Qualité de la maillage**

Le tableau 3.3 présente trois paramètres critiques relatifs à la qualité du maillage : la qualité des éléments, la qualité orthogonale et l'asymétrie. Les résultats indiquent une qualité globale louable du maillage. Plus précisément, la qualité des éléments varie de 0,50 à 0,99, avec une moyenne notable de 0,97, ce qui suggère que la proportion prédominante de cellules se rapproche de leur configuration géométrique optimale. La qualité orthogonale, essentielle au maintien de la stabilité numérique dans les simulations de dynamique des fluides numérique (CFD), présente des valeurs tout aussi louables, variant entre 0,68 et 1, avec un score moyen de 0,99. En ce qui concerne l'asymétrie, elle présente une valeur minimale de $1{,}3\times10^{-10}$, une valeur maximale de 0,57 et une moyenne de $6{,}71\times10^{-2}$. Ces mesures indiquent une distorsion minimale des cellules et la valeur maximale reste nettement inférieure au seuil critique de 0,75. De plus, la valeur minimale se situe dans les limites acceptables, garantissant ainsi l'absence de cellules excessivement déformées. Par conséquent, ces résultats permettent de conclure que le maillage utilisé répond favorablement aux critères de qualité nécessaires pour garantir la précision et la stabilité des simulations [54].

Tableau III.3 : Qualité du maillage

	MIN	MAX	MOYENNE
QUALITE DES ELEMENTS	0.50	0.99	0.97
QUALITE ORTHOGONALE	0.68	1	0.99
SKEWNESS	$1.3*10^{-10}$	0.57	$6.71*10^{-2}$

III.1.3. Analyse CFD : Hypothèses et considérations de modélisation

En plus de l'analyse du réservoir de stockage d'hydrogène compressible à l'aide de la dynamique des fluides numérique (CFD) en 2D, l'étude utilisant le logiciel ANSYS Fluent améliore la compréhension globale du comportement du système. L'utilisation de l'analyse 2D permet d'obtenir des informations précieuses sur les tendances générales et les principales caractéristiques du processus de remplissage. La décision d'effectuer des simulations CFD en 2D découle de la nécessité de capturer les changements thermodynamiques essentiels qui se produisent pendant le remplissage rapide d'hydrogène. Plus précisément, les variations de température et de pression, telles qu'élucidées dans la section précédente, peuvent être représentées efficacement par une simulation en 2D. Cette étude vise à fournir une compréhension approfondie et détaillée du comportement dynamique du réservoir de stockage d'hydrogène compressible tout au long du processus de remplissage.

- **ANSYS Fluent**

ANSYS Fluent constitue une plateforme logicielle sophistiquée de dynamique des fluides informatique (CFD) utilisée pour modéliser la dynamique des fluides, le transfert thermique et les interactions chimiques dans des configurations géométriques complexes. Créé par ANSYS Inc., Fluent fournit une gamme d'instruments sophistiqués pour la simulation de la turbulence, des écoulements polyphasiques, de la combustion, ainsi que des mouvements de fluides compressibles et incompressibles, ainsi que de divers autres phénomènes physiques. Ce logiciel est largement utilisé dans de nombreuses disciplines de l'ingénierie, notamment l'aéronautique, l'ingénierie automobile, la production d'énergie et le traitement chimique, dans le but d'analyser et d'améliorer les systèmes et les processus associés à la dynamique des fluides. Figure III.7 montre l'interface du logiciel ANSYS Fluent. Elle illustre l'environnement de travail dans lequel les paramètres de simulation, les modèles physiques et les conditions aux limites sont définis avant le lancement du calcul.

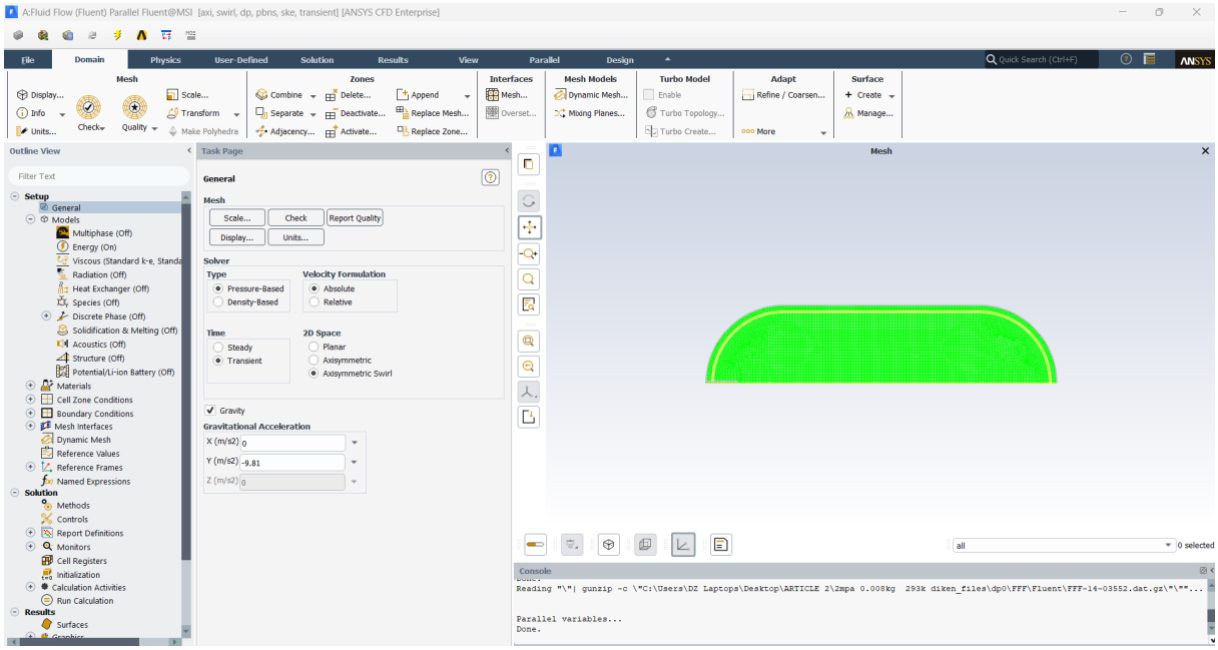


Figure III.7 : L'interface du logiciel ANSYS Fluent

- **Équations fondamentales**

Le logiciel ANSYS Fluent 2020 R2 a été utilisé, s'appuyant sur la méthode des volumes finis (FVM) décrite dans [55]. L'objectif de la simulation était de reproduire le processus de chargement de l'hydrogène dans un réservoir de stockage. L'équation qui régit ce phénomène est présentée ci-dessous.

➢ L'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \forall.(\rho \mathrm{u}) = 0 \text{ ..... (III.1)}$$

➢ Équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial(\rho \mathrm{u})}{\partial t} + \nabla.(\rho \mathrm{uu}) = -\nabla p + \nabla.(\tau) + \rho g \text{..... (III.2)}$$

➢ Équation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla.(\rho \mathrm{u} E) = \nabla.(\lambda \nabla T) + \nabla.(\mu \nabla \mathrm{u}) + \rho \mathrm{u}.g \text{..... (III.3)}$$

Où t est le temps, ρ représente la mesure de la densité, u le vecteur vitesse. La variable p représente la pression et τ représente le tenseur de contrainte visqueuse. E représente l'énergie totale, tandis que T représente la température. De plus, λ représente la

conductivité thermique et μ la viscosité dynamique. Enfin, g représente l'accélération gravitationnelle.

- **Modèle de turbulence**

Le modèle k-ε et ses variantes démontrent sa polyvalence et son efficacité dans des applications allant des géométries complexes et de la convection naturelle aux prédictions améliorées de transfert de chaleur [55], [56] et [57]. Outre cette polyvalence, le modèle k-ε standard, souvent utilisé dans les études de jets de gaz transitoires, tend à surestimer le taux de diffusion en raison de son hypothèse d'isotropie inhérente [58], [59] et [60]. Le modèle turbulent k-ε, cité dans [61], utilise deux paramètres pour caractériser la turbulence au sein du fluide. Ces paramètres sont l'énergie cinétique turbulente, notée k, et le taux de dissipation d'énergie turbulente, représenté par ε. Les définitions de k et ε sont les suivantes :

$$k = \frac{1}{2}\overline{\overline{\mu_\iota \mu_\iota}} \text{..... (III.4)}$$

$$\varepsilon = \frac{\nu}{\overline{q_\iota q_j}}\overline{\overline{\mu_\iota \mu_j}} \text{..... (III.5)}$$

Où $\overline{u_\iota u_\iota}$ représente le tenseur des contraintes de Reynolds et ν la viscosité cinématique du fluide. Les équations de transport de l'énergie cinétique de turbulence (k) et de son taux de dissipation (ε) dans le modèle k-ε sont les suivantes [54] :

- Équation de l'énergie cinétique de turbulence (k)

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla.(\rho \mathrm{u} k) = \nabla.\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\nabla k\right] + P_k - \rho\varepsilon \text{..... (III.6)}$$

- L'équation de la dissipation de l'énergie turbulente (taux ε)

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla.(\rho \mathrm{u}\varepsilon) = \nabla.\left[\left(\mu\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\nabla\varepsilon\right] + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}P_k - C_{2\varepsilon}\frac{\rho\varepsilon^2}{k} \text{..... (III.7)}$$

Où la variable k représente l'énergie cinétique de turbulence, tandis que μt désigne la viscosité turbulente. σ_k, σ_ε représentent les nombres de Prandtl turbulents associés à k et ε respectivement, et $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ désignent des constantes empiriques. Les termes P_k et ε représentent respectivement la production et la dissipation de l'énergie cinétique de turbulence et dépendent étroitement des caractéristiques du champ d'écoulement avec :

- $\sigma_k = 1.0$
- $\sigma_\varepsilon = 1.3$
- $C_{1\varepsilon} = 1.44$
- $C_{2\varepsilon} = 1.92$

III.1.4. Conditions aux limites et conditions initiales

Pour les calculs numériques, les conditions initiales et limites sont déterminées. La température ambiante supposée était de 293 K. Le coefficient de transfert de chaleur par convection, indiquant l'étendue du transfert de chaleur entre la surface extérieure d'un cylindre et l'air ambiant, est de 10 W/(m^2.K). Le coefficient de chaleur par convection naturelle et la température ambiante sont supposés rester constants en raison du court temps de remplissage.

L'application de l'équation d'état de Redlich-Kwong (RK-EOS) est cruciale pour simuler avec précision les caractéristiques thermodynamiques de l'hydrogène lors de l'opération de remplissage rapide [53]. L'équation RK est particulièrement utile pour la modélisation des gaz à haute pression en raison de sa précision supérieure à celle de la loi des gaz parfaits, tout en offrant une formulation relativement simple contrairement à des modèles plus complexes tels que Peng-Robinson ou Soave-Redlich-Kwong.

Dans la présente étude, l'équation RK est utilisée pour décrire le comportement authentique de l'hydrogène dans des circonstances non idéales, englobant les pressions élevées et les plages de températures modérées rencontrées lors du remplissage rapide des réservoirs de stockage. L'équation RK incorpore deux termes correcteurs à la loi des gaz parfaits : l'un qui prend en compte les forces d'attraction intermoléculaires et l'autre

qui prend en compte le volume fini occupé par les particules de gaz. Elle peut être exprimée comme suit :

$$p = \frac{RT}{\upsilon - b} - \frac{a}{T^{\frac{1}{2}}\upsilon(\upsilon + b)} \quad \text{..... (III.8)}$$

- P est la pression,
- T est la température,
- v_m est le volume molaire,
- R est la constante universelle des gaz,
- a et b sont des paramètres spécifiques à la substance, calculés à partir des propriétés critiques.

Ces paramètres sont déterminés à partir de la température critique T_c et de la pression critique P_c de l'hydrogène :

$$a = 0.08664\frac{R^2T^{2.5}}{P_c} \quad \text{..... (III.9)}$$

$$b = 0.4275\frac{RT_c}{P_c} \quad \text{..... (III.10)}$$

La variation de la chaleur spécifique de l'hydrogène est modélisée comme une fonction polynomiale par morceaux. Cela signifie que la chaleur spécifique C_p subit différentes représentations polynomiales selon les intervalles de température, ce qui fournit une représentation plus détaillée et précise de l'évolution de C_p sur une plage de températures dans la simulation. La variation de la conductivité thermique et de la viscosité de l'hydrogène a été modélisée comme une fonction polynomiale. Les fonctions polynomiales conviennent souvent à ces propriétés lorsque leurs variations sont relativement régulières et continues (Figure III.8). Nous supposons que les propriétés du revêtement et de l'isolant (aluminium, fibre de carbone) sont isotropes dans les processus. Le transfert de chaleur par rayonnement est considéré comme négligeable.

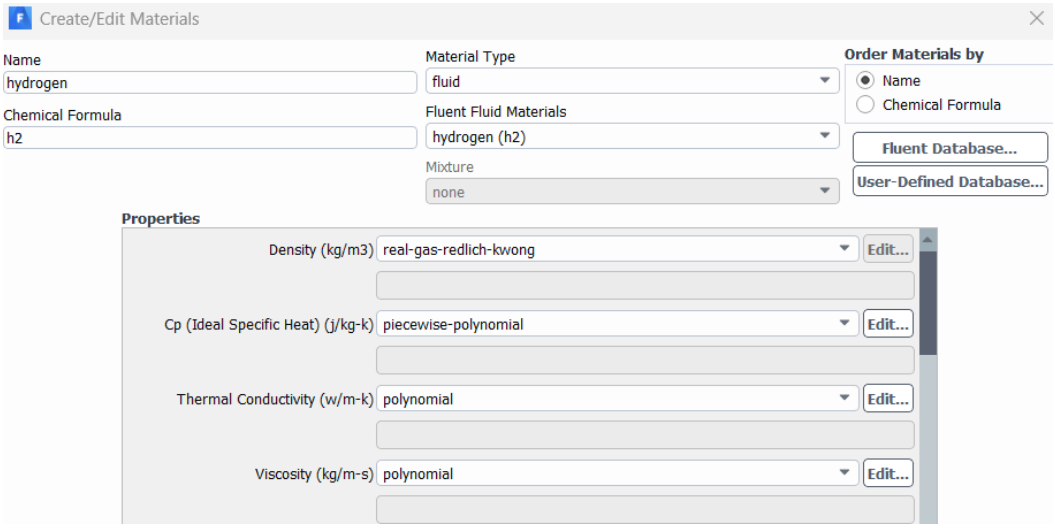


Figure III.8 : Propriétés de l'hydrogène

Dans cette étude, Le solveur basé sur la pression de Fluent est utilisé pour les calculs numériques.la modélisation axisymétrique sw. a été adoptée en raison de la géométrie cylindrique du réservoir de stockage d'hydrogène et de ses conditions aux limites symétriques. Cette approche permet de réduire considérablement les coûts de calcul en réalisant une simulation bidimensionnelle tout en capturant avec précision les variations radiales et axiales essentielles du débit, de la température et de la pression. La génération simplifiée du maillage et l'amélioration de la stabilité numérique contribuent également à une convergence plus rapide et à une simulation efficace, ce qui en fait un choix idéal pour l'analyse du processus de remplissage rapide dans des conditions symétriques. Pour le processus de remplissage, des simulations d'écoulement transitoire ont été réalisées. Le pas de temps transitoire utilisé dans toutes les simulations est de 0,05 s et le nombre maximal d'itérations par pas de temps est de 20. L'itération a été arrêtée manuellement lorsque la pression finale du réservoir a atteint 35 MPa.

III.2. Résultats et discussions

III.2.1. Validation des résultats de simulation

La validation numérique a été réalisée afin d'évaluer la pertinence des modèles numériques en comparant les résultats obtenus à ceux des expériences menées par Yan-

Lei Liu et al. [36]. L'illustration représente un réservoir de stockage d'hydrogène avec un débit massique d'entrée de 41,1 Kg/s, utilisant le modèle de turbulence k-ε pour la simulation. Après comparaison, il apparaît clairement que la simulation numérique décrit avec précision le schéma général d'élévation de température tout au long de la procédure de remplissage d'hydrogène. Initialement, les données empiriques et les résultats numériques montrent une augmentation rapide de la température, témoignant de la forte production thermique initiale attribuée à l'important débit massique d'hydrogène. Au fil du temps, le rythme d'augmentation de la température diminue progressivement, convergeant vers un état d'équilibre. Néanmoins, des divergences existent entre les résultats expérimentaux et ceux obtenus numériquement. Dans la phase initiale de montée en température (0-10s), l'analyse numérique indique une augmentation légèrement plus lente que les résultats expérimentaux.

Cet écart pourrait provenir de l'incapacité du modèle numérique à prendre pleinement en compte l'inertie thermique initiale.

En passant à la période intermédiaire (10-30s), les simulations numériques et les observations expérimentales présentent des tendances similaires, les températures numériques enregistrant systématiquement des valeurs légèrement inférieures. Cet écart suggère une sous-estimation potentielle des taux de transfert de chaleur par le modèle numérique.

En phase stationnaire (30-60 s), le modèle numérique s'aligne bien avec les résultats expérimentaux, bien qu'avec des températures légèrement inférieures (Figure III.8).

Cet alignement implique que, bien que le modèle capture efficacement le comportement global du système, des écarts mineurs peuvent exister dans les coefficients de transfert de chaleur ou les conditions limites utilisées dans la simulation, probablement dus au coefficient de transfert de chaleur de la paroi extérieure ou à la température ambiante. En général, le modèle quantitatif démontre une forte concordance avec les données empiriques, confirmant la pertinence de l'utilisation du modèle de turbulence k-ε pour simuler la procédure de remplissage d'hydrogène dans un conteneur d'hydrogène de type 3.

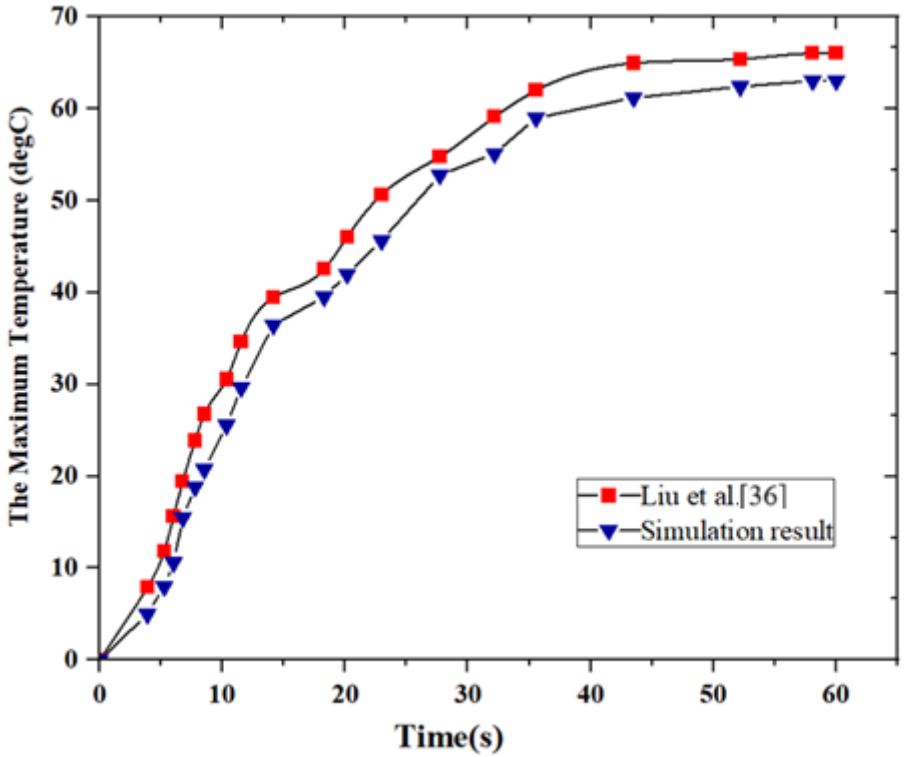
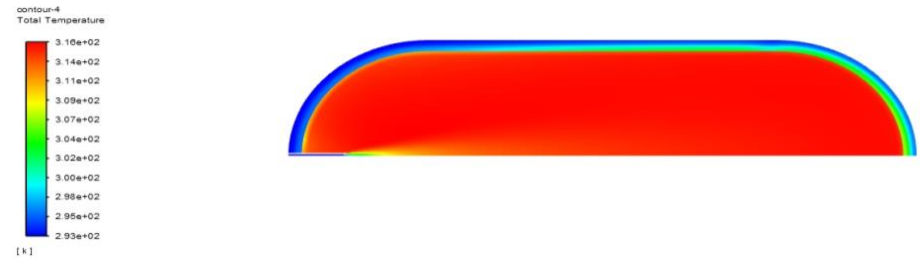


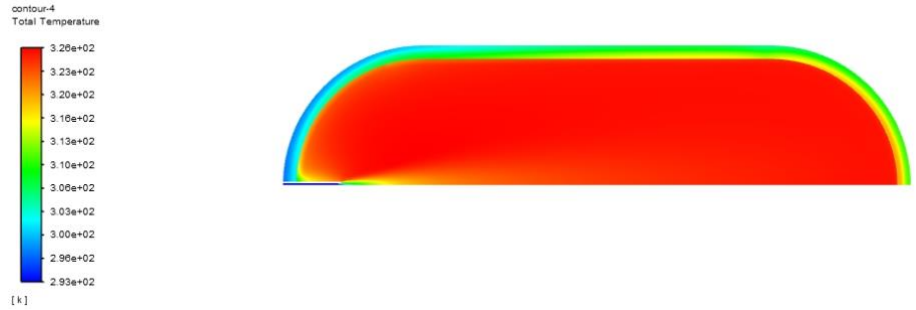
Figure III.9 : Comparaison entre l'expérience [36] et le résultat de la simulation

III.2.2. Distribution de la température dans le réservoir

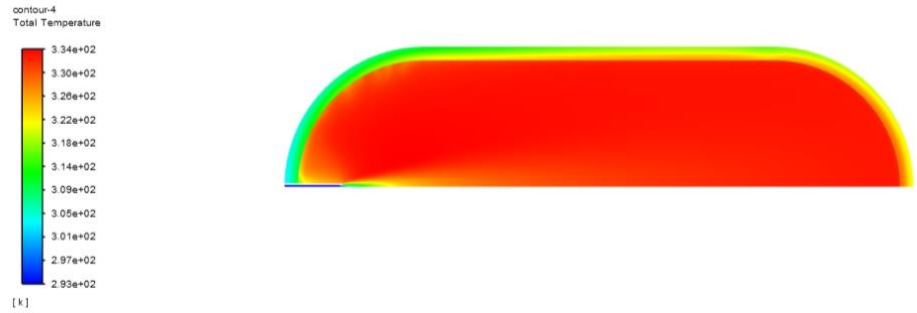
La distribution thermique dans le réservoir a été méticuleusement examinée tout au long de la procédure de remplissage d'hydrogène, qui s'est produite à des pressions variant de 2 MPa à 35 MPa. La température initiale du système a été enregistrée à 20 °C. La Figure 3.10 illustre les variations temporelles de température à des intervalles spécifiques : 25 s, 75 s, 125s, et 176 s. La température dans le réservoir a connu une tendance continue à la hausse pendant tout le processus, la température minimale de 21 °C étant documentée à proximité de l'extrémité du tuyau d'entrée. Le gaz introduit dans le système a rapidement atteint des températures élevées à la suite d'un échange thermique avec l'hydrogène préexistant, pour atteindre une température maximale de 69.34 °C à l'extrémité distale du réservoir.



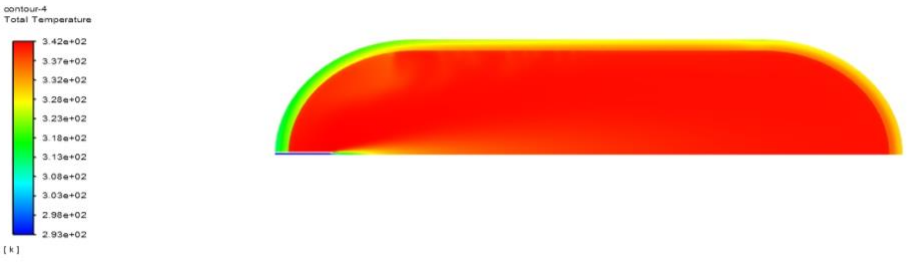
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure III.10 : Le changement de la distribution de la température en fonction du temps d'écoulement a) Temps d'écoulement =25 s, b) Temps d'écoulement =75 s, c) Temps d'écoulement=125 s, d) Temps d'écoulement =176 s

La Figure III.11 illustre la progression temporelle de la vitesse d'entrée et de la température maximale dans le réservoir pendant l'opération de remplissage d'hydrogène. La vitesse d'entrée (courbe rouge) présente une baisse prononcée au début de l'opération, suivie d'une diminution progressive au fil du temps. Ce phénomène est principalement attribuable à la diminution de la différence de pression entre la source d'alimentation et le réservoir, aggravée par une augmentation de la résistance à l'écoulement.

Parallèlement, la température maximale (courbe noire) augmente progressivement, ce qui signifie l'impact thermique associé à la compression de l'hydrogène et la diminution de l'efficacité du refroidissement à des débits réduits. Cela souligne l'importance cruciale de la régulation du début de la phase de remplissage pour faire face efficacement à l'escalade thermique.

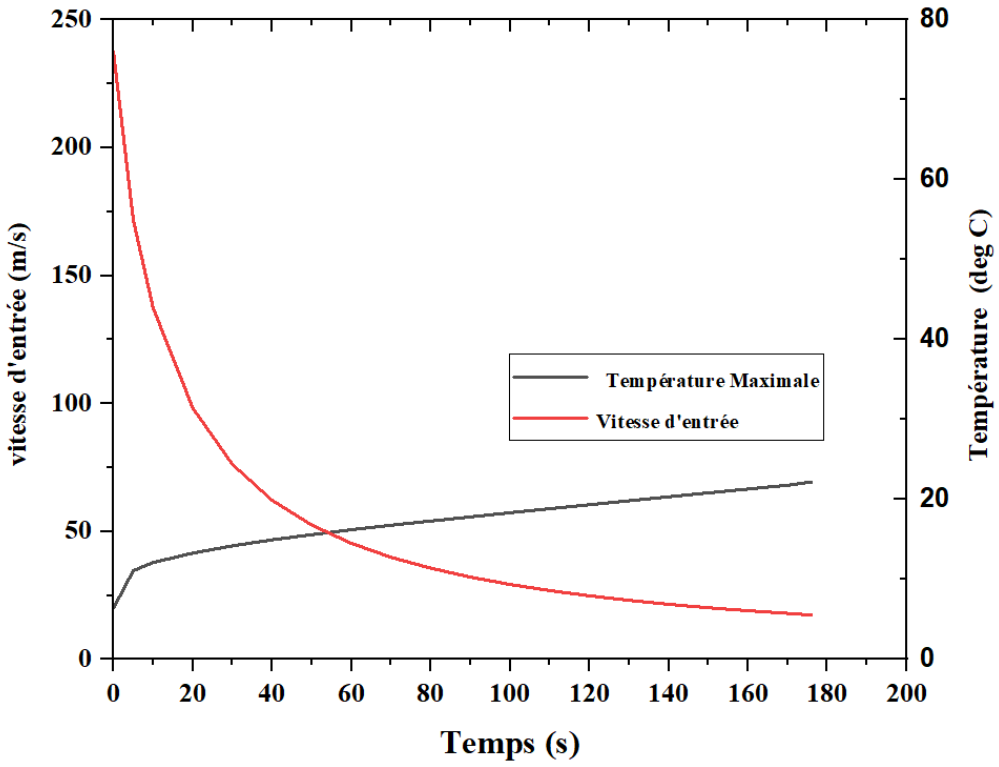


Figure III.11 : Évolution de la vitesse d'entrée et de la température maximale pendant le processus de remplissage du réservoir d'hydrogène

Pour étudier l'impact de divers paramètres sur la température à l'intérieur du réservoir, des simulations ont été réalisées en tenant compte de pressions initiales, de durées de remplissage et de températures ambiantes distinctes, comme indiqué dans le tableau 3.4.

Dans les applications pratiques, la pression initiale de chaque réservoir d'hydrogène à bord présente une variabilité, qui influence ensuite la distribution de la température pendant le processus de remplissage. La durée de recharge a fait l'objet d'une attention accrue en raison de la prolifération croissante des véhicules à pile à combustible. Néanmoins, l'augmentation du taux d'occupation pour minimiser le temps peut entraîner le dépassement des seuils de température critiques. Pour maintenir les protocoles de sécurité, il est impératif d'examiner la corrélation entre la vitesse de remplissage et la température résultante. En tant qu'entité thermodynamique, l'échange thermique entre le système et son environnement extérieur fluctue en fonction de la température ambiante. Par conséquent, les répercussions de ces déterminants sur la température du stockage d'hydrogène à bord sont importantes, constituant la prémisse fondamentale pour la formulation d'une stratégie de charge accélérée.

Tableau III.4 : Différents paramètres variables

Paramètres Variables	Variable 1	Variable 2	Variable 3
Pression initiale	2MPA	5MPA	10MPA
Temps de remplissage	69s	99s	176s
Taux de remplissage	8g/s	14g/s	20g/s
Température ambiante	0 °C	20°C	40°C

La Figure III.12 montre la variation de la température pour différentes pressions initiales du réservoir avec la même durée de remplissage. La Figure III.13 présente la

variation de la température pour différentes pressions initiales à un taux de remplissage constant (8 g/s).

Les deux sous-figures indiquent une corrélation négative entre la pression initiale et la température maximale - plus la pression initiale est élevée, plus l'augmentation de la température est faible. Cela s'explique par le fait qu'une pression initiale plus élevée entraîne un rapport de pression plus faible entre l'état final et l'état initial, ce qui réduit l'accumulation thermique pendant le ravitaillement. Par conséquent, l'augmentation de la pression initiale permet non seulement d'atténuer les pics de température rapides, mais aussi de prolonger la durée de vie du réservoir.

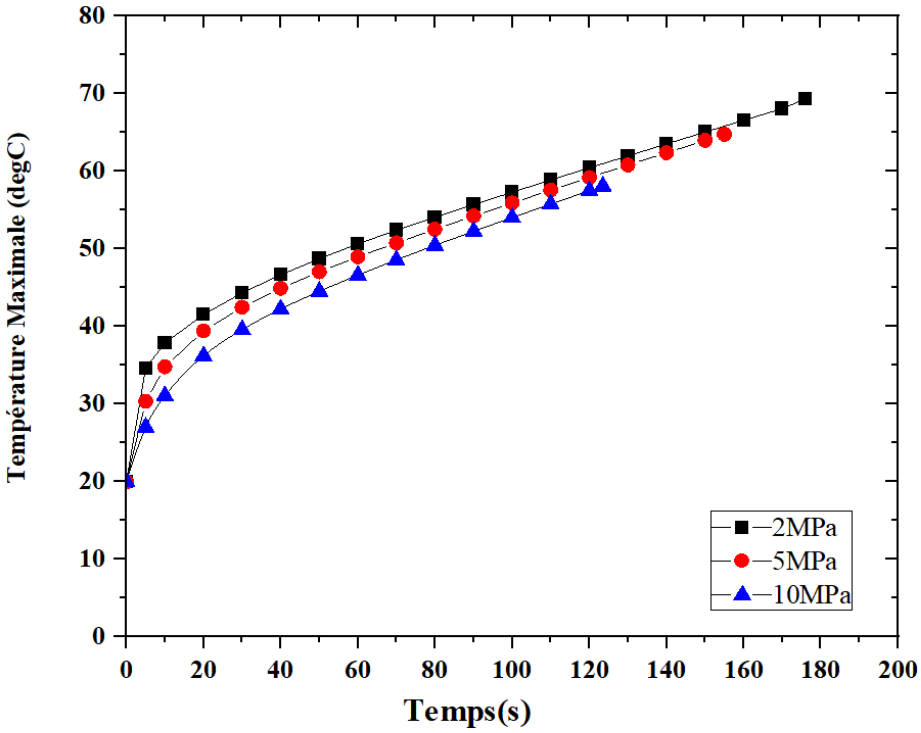


Figure III.12 : Influence de pression initiale différente pour un même taux de remplissage

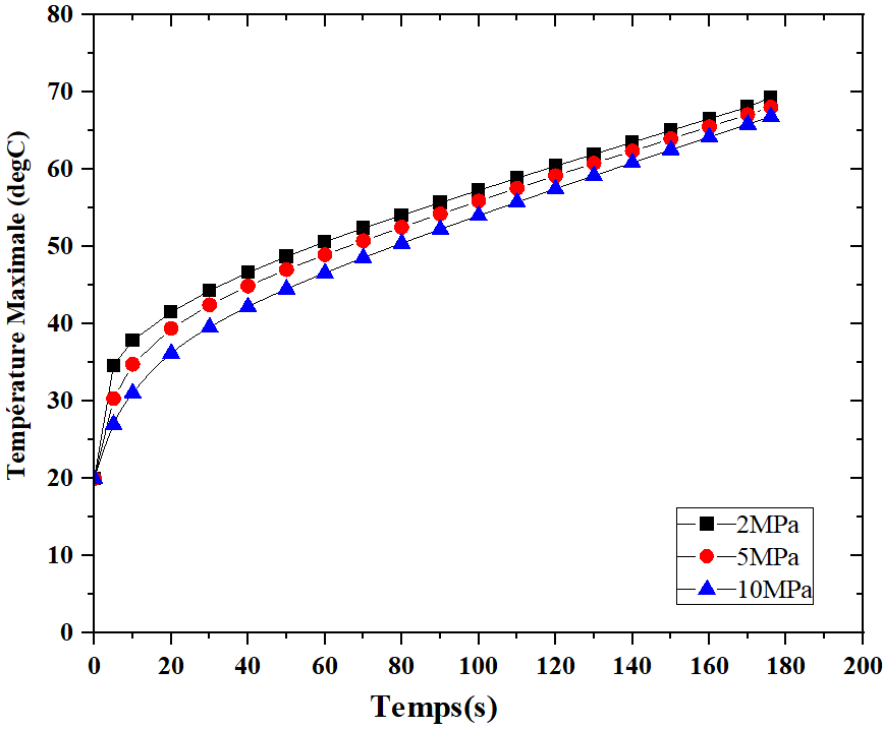


Figure III.13 : Influence d'une pression initiale différente pour une même durée de remplissage

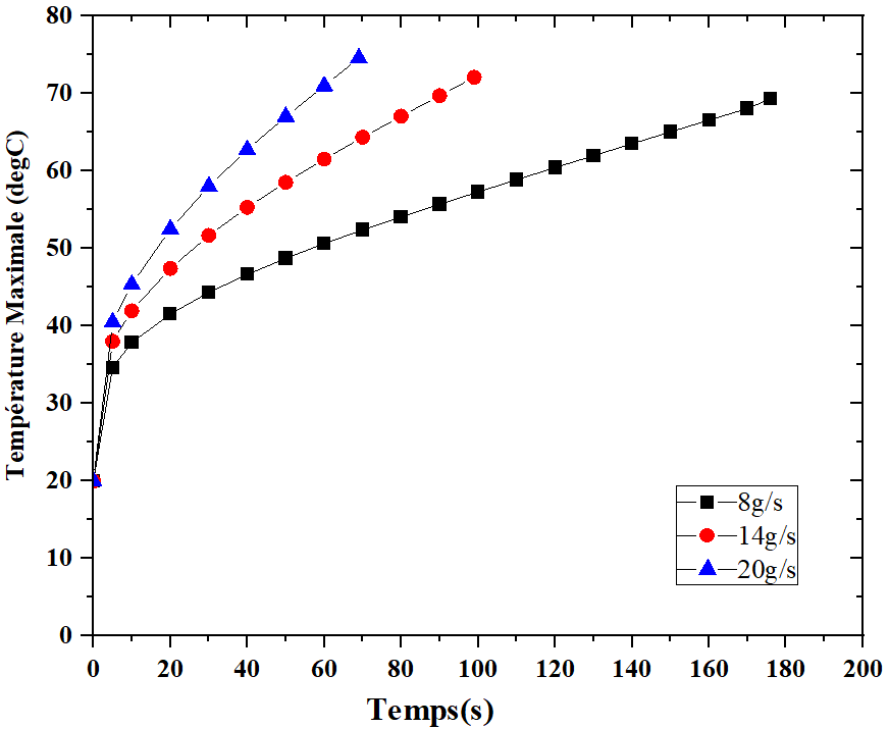


Figure III.14 : Effet de la variation du débit massique à l'entrée

La Figure III.14 montre qu'un temps de remplissage plus long entraîne une température maximale plus basse. Un remplissage plus lent laisse plus de temps pour la dissipation de la chaleur, réduisant ainsi l'accumulation thermique dans le gaz. Par conséquent, l'ajustement du taux de remplissage permet de contrôler efficacement les températures internes.

La Figure III.15 montre que la température maximale augmente avec la température ambiante. Lorsque la température ambiante dépasse 40 °C, la température interne du réservoir dépasse le seuil de sécurité de 85 °C. Cela souligne la nécessité de stratégies de gestion thermique dans les environnements à haute température pour garantir la sécurité et prolonger la durée de vie du réservoir.

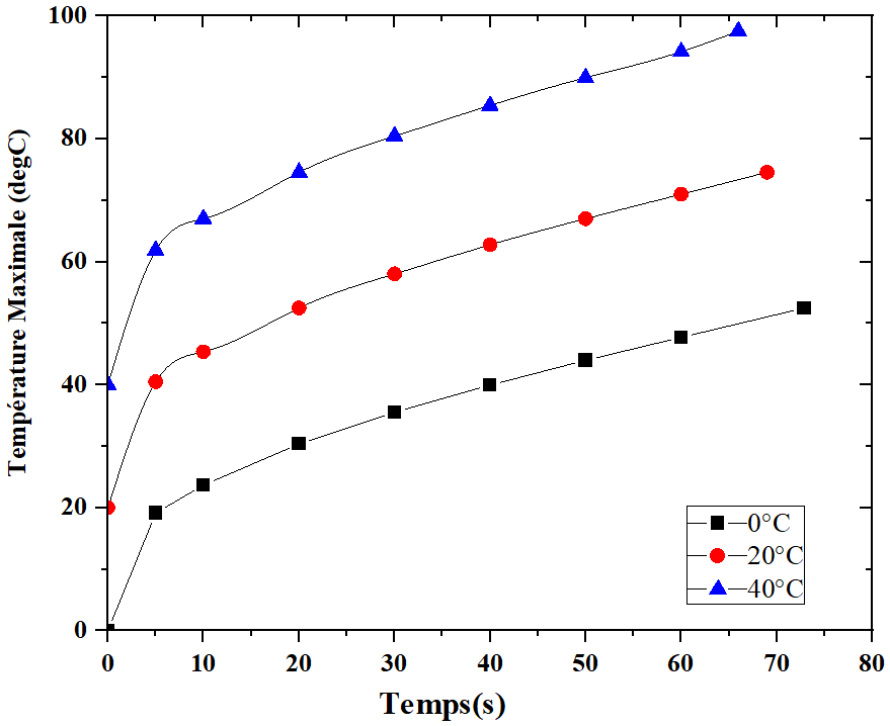


Figure III.15 : Effet de la variation de la température

III.3. Conclusion

L'hydrogène étant un vecteur d'énergie respectueux de l'environnement, il est envisagé de l'utiliser comme carburant dans les futures voitures. Les réservoirs d'hydrogène compressibles sont l'option idéale pour stocker l'hydrogène dans les véhicules, grâce à leur capacité de stockage à haute pression et à leur légèreté. Dans cette étude, des simulations numériques ont été réalisées sur les changements de température et de pression qui se produisent lors du remplissage rapide du réservoir d'hydrogène. La caractéristique la plus importante recherchée pendant le remplissage est un temps de remplissage court. En raison de la brièveté du temps de remplissage, la température augmente de manière significative, de sorte que la limite de température est déterminée pour des raisons de sécurité. La modélisation thermodynamique du remplissage a été réalisée numériquement. Le scénario de remplissage rapide a été simulé avec le logiciel ANSYS FLUENT. Dans la simulation CFD, le modèle de turbulence k-e, les équations directrices et différentes équations de gaz réel sont utilisées. Les conditions aux limites sont déterminées. Un récipient sous pression de type 3, 74L, a été utilisé pour l'étude.

La température à l'intérieur du réservoir présente une corrélation directe avec la réduction de la pression initiale, car la diminution de la pression entraîne une élévation de la température. En outre, la température ambiante joue un rôle crucial dans l'influence de la température à l'intérieur du réservoir, car une augmentation de la température environnante entraînera invariablement une augmentation de la température à l'intérieur du réservoir. En outre, le temps de remplissage du réservoir a également un impact sur la température, car un temps de remplissage plus court entraînera une augmentation accélérée de la température à l'intérieur du réservoir.

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce mémoire avait pour objectif principal d'étudier, dimensionner et simuler un système de stockage d'hydrogène vert, en mettant l'accent sur le comportement thermique du réservoir pendant le remplissage rapide. Ce processus, essentiel pour les applications de mobilité à hydrogène, engendre des variations importantes de température qui peuvent affecter la sécurité et la performance du système.

Dans un premier temps, nous avons présenté les caractéristiques de l'hydrogène, ses méthodes de production, et les différentes technologies de stockage disponibles. Ensuite, nous avons étudié les travaux antérieurs sur les réservoirs à haute pression et les problématiques liées à l'élévation de température pendant le remplissage.

La dernière partie de notre travail a consisté à simuler le remplissage rapide d'un réservoir de type III à l'aide du logiciel ANSYS Fluent, en utilisant un modèle axisymétrique 2D. Nous avons pris en compte les propriétés thermiques des matériaux (aluminium et fibre de carbone), les conditions aux limites, et le comportement réel du gaz via l'équation d'état de Redlich-Kwong.

Les résultats obtenus montrent que :

- ✓ La température dans le réservoir augmente rapidement au début du remplissage, puis se stabilise progressivement.
- ✓ Le point chaud est observé dans la zone opposée à l'entrée du gaz.
- ✓ Le débit massique d'entrée et la température initiale influencent fortement l'élévation thermique.
- ✓ Le modèle utilisé est cohérent avec les données expérimentales disponibles dans la littérature.

Ces résultats confirment l'importance d'une bonne maîtrise des paramètres de remplissage afin d'éviter les surchauffes et de garantir un fonctionnement sûr. Ce travail constitue ainsi une base utile pour l'optimisation des systèmes de stockage d'hydrogène dans un contexte de transition énergétique.

Bibliographie

[1] **Soldi, B., et al**. "Conception et réalisation d'un système de production d'hydrogène à l'aide d'un dispositif de catalyse." Journal of Renewable Energies 12.1 (2009): 149-162.

[2] **CONNAISSANCE DES ÉNERGIES**. Hydrogène : énergie. [en ligne]. Disponible sur : https://www.connaissancedesenergies.org/fiche-pedagogique/hydrogene-energie (consulté le 10 février 2025).

[3] **Boyle, Robert**. *The Sceptical Chymist* (1661).

[4] **Cavendish, Henry**. *Three Papers Containing Experiments on Factitious Air* (1766), publié dans *Philosophical Transactions of the Royal Society*.

[5] **Lavoisier, Antoine**. *Traité élémentaire de chimie* (1789).

[6] **Grove, William**. *On a Gaseous Voltaic Battery* (1839), publié dans *Philosophical Magazine and Journal of Science*.

[7] **Dewar, James**. *Proceedings of the Royal Society* (1898).

[8] **Harold G. Dick et Douglas H. Robinson**, "The Graf Zeppelin: An Illustrated History of the LZ 127" ,1985.

[9] **Michael Mooney**, *The Hindenburg Disaster*,1972.

[10] ***NASA Technical Reports*** sur le programme Apollo.

[11] **Bockris, John**. *Energy: The Solar-Hydrogen Alternative* (1975).

[12] ***National Hydrogen Energy Roadmap*** (2002), U.S. Department of Energy.

[13] Communiqué de presse de Toyota (2014).

[14] ***EU Hydrogen Strategy*** (juillet 2020), Commission européenne.

[15] Consultation sur la nouvelle stratégie française de déploiement de l'hydrogène décarboné

[16] **Agence Internationale de l'Énergie (AIE)**, *"The Future of Hydrogen"*, 2019.

[17] **CRC** Handbook of Chemistry and Physics .

[18] "Energy Systems Engineering : Evaluation and Implementation" de **Francis Vanek et Louis D. Albright.**

[19] Principles of Modern Chemistry *par* ***David Oxtoby, H. Pat Gillis, et Laurie Butler***.

[20] **Kumar S. Shiva, et Himabindu V**, ‘’Hydrogen production by PEM water electrolysis Areview‘’ Materials Science for Energy Technologies 2:442–454 (2019).

[21] **Bessarabov Dmitri, Haijiang Wang, Hui Li, et Nana Zhao**, ‘’ PEM Electrolysis for Hydrogen Production Principles and Applications‘’ Taylor & Francis Group (2016).

[22] **J. Labbé** , ‘’L’hydrogène électrolytique comme moyen de stockage d’électricité pour systèmes

[23] **AFH2 Th. Alleau** , ‘’Production d’hydrogène par électrolyse de l’eau’’, Mémento de l‘hydrogène, fiche 3.2.1. Révision mai 2011.

[24] **Ferkous, Khaled**. "Etude d’une chaine de conversion d’énergie éolienne." Mémoire de Magister, Université Mentouri *Constantine* (2009).

[25] **GuidEnR HQE** “les différentes technologies d’électrolyseurs”

[26] **R. Kothari, D. Buddhi, R.L. Sawhney**, ‘Comparison of environmental and economic aspects of various hydrogen production methods’, Renewable and Sustainable Energy Reviews Volume 12, February 2008, p .553–563.

[27] **R.Boudries, R.dizène, A. Khellaf and M. Belhamel**, «HYDROGEN AS AN ENERGY CARRIER », Editor: Aiden M.Harris, © 2010 Nova Science Publishers, Inc.

[28] **IRENA**. Hydrogen from renewable power: technology outlookfor the energy transition. Abu Dhabi: InternationalRenewable Energy Agency; September 2018. ISBN: 978-92-9260- 077-8.

[29] **Hydrogen Council**. Hydrogen scaling up e a sustainable pathway for the global energy transition. Technical Report. November 2017

[30] **Al-Subaie A, Elkamel A, Mukherjee U, Fowler M**. Exploring thepotential of Powerto-Gas concept to meet Ontario’s industrialdemand of hydrogen. In: 5th IEEE

International conference onsmart energy grid engineering (SEGE 2017), Oshawa, Canada, August 14-17; 2017. p. 336e 40. art. no. 8052821.

[31] **P. S. Cumber**. Efficient modeling of turbulence–radiation interaction in subsonic hydrogen jet flames. In: Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 63 2, 85–114. doi: 10.1080/10407790.2013.740395.

[32] **Miriam Ricci et al**. The transition to hydrogen-based energy: combining technology and risk assessments and lay perspectives. English. In: International Jour- nal of Energy Sector Management, 1 1, 34–50. issn: 1750-6220. doi: 10.1108/17506220710738588.

[33] **Paulas Raja Sekaran et al**. Liquid Hydrogen Tank Considerations for Turboelectric Distributed Propulsion. English. In: Aircraft Engineering and Aerospace Technology, 86 1, 67–75. issn: 0002-2667. doi: 10.1108/AEAT-12-2011-0195.

[34] **W. Dai, F. Han, and D. Hui. A** numerical method for simulating hydrogen absorption in metal-H2 reactors for hydrogen storage. In: World Journal of Engineering, 10 1, 29–38. doi: https://doi.org/10.1260/1708-5284.10.1.29.

[35] **Slimane Merouani Atef Chibani and Aissa Dehane**. Effects of different heat transfer enhancers in PCM-based latent thermal energy storage for hydrogen storage in activated carbon bottle. In: Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 0 0, 1–24. doi: 10.1080/10407790.2023.2286254.

[36] **Yan-Lei Liu et al**. Experimental studies on temperature rise within a hydrogen cylinder during refueling. In: International Journal of Hydrogen Energy, 35 7, 2627–2632. issn: 0360-3199. doi: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene. 2009.04.042.

[37] **Qianfeng Li et al**. Effects of geometry and inconstant mass flow rate on temperatures within a pressurized hydrogen cylinder during refueling. In: International Journal of Hydrogen Energy, 37 7, 6043–6052. issn: 0360-3199. doi: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene. 2011.12.020.

[38] **M. Cristina Galassi et al**. Assessment of CFD models for hydrogen fast filling simulations. In: International Journal of Hydrogen Energy, 39 11, 6252–6260. issn: 0360-3199. doi: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.03.164.

[39] **Heitsch M, Baraldi D, and Moretto P**. Numerical Investigations on the Fast Filling of Hydrogen Tanks. In: INTERNATIONAL JOURNAL OF HYDROGEN ENERGY, 36 3, 2606–2612. issn: 0360-3199. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010. 04.134

[40] C. J. B. Dicken and W. M´erida. Modeling the Transient Temperature Distribu- tion within a Hydrogen Cylinder during Refueling. In: Numerical Heat Transfer,22 Part A: Applications, 53 7, 685–708. doi: 10.1080/10407780701634383. eprint: https://doi.org/10.1080/10407780701634383 .

[41] **C.J.B. Dicken and W. M´erida**. Measured effects of filling time and initial mass on the temperature distribution within a hydrogen cylinder during refuelling. In: Journal of Power Sources, 165 1, 324–336. issn: 0378-7753. doi: https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.11.077 .

[42] **Yongzhi Zhao et al**. Numerical study on fast filling of 70 MPa type III cylinder for hydrogen vehicle. In: International Journal of Hydrogen Energy, 37 22, 17517–17522. issn: 0360-3199. doi: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012. 03.046

[43] **Xian Wu et al**. Fast filling strategy of type III on-board hydrogen tank based on time-delayed method. In: International Journal of Hydrogen Energy, 46 57, 29288–29296. issn: 0360-3199. doi: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene. 2021.01.094

[44] **Yunfeng Bai et al**. Modeling and optimal control of fast filling process of hydrogen to fuel cell vehicle. In: Journal of Energy Storage, 35, 102306. issn: 2352-152X. doi: https://doi.org/10.1016/j.est.2021.102306.

[45] **Hao Luo et al**. Multi-objective optimization of cascade storage system in hydrogen refuelling station for minimum cooling energy and maximum state of charge. In: International Journal of Hydrogen Energy, 47 20, 10963–10975. issn: 0360-3199. doi: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.01.059.

[46] **Shitanshu Sapre, Mayank Vyas, and Kapil Pareek**. Impact of refueling parameters on storage density of compressed hydrogen storage Tank. In: International Journal of Hydrogen Energy, 46 31, 16685–16692. issn: 0360-3199. doi: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.08.136 .

[47] **Abhilash Suryan, Heuy Dong Kim, and Toshiaki Setoguchi**. Comparative study of turbulence models performance for refueling of compressed hydrogen tanks. In: International Journal of Hydrogen Energy, 38 22, 9562–9569. issn: 0360-3199. doi: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.07.055.

[48] **Daniele Melideo and Daniele Baraldi**. CFD analysis of fast filling strategies for hydrogen tanks and their effects on key-parameters. In: International Journal of Hydrogen Energy, 40 1, 735–745. issn: 0360-3199. doi: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene .2014.10.138.

[49] **Melideo D, Baraldi D, Acosta-Iborra B, Ortiz Cebolla R, Moretto P**. CFD simulations of filling and emptying of hydrogen tanks. Int J Hydrogen Energy 2017;42(11): 7304–13.

[50] **Chakkrit Na Ranong et al**. Approach for the Determination of Heat Trans- fer Coefficients for Filling Processes of Pressure Vessels With Compressed Gaseous Media. In: Heat Transfer Engineering, 32 2, 127–132. doi: 10.1080/ 01457631003769187. eprint: https://doi.org/10.1080/01457631003769187.

[51] **Qian Zhang et al**. Design of a 70 MPa type IV hydrogen storage vessel us- ing accurate modeling techniques for dome thickness prediction. In: Composite Structures, 236, 111915. issn: 0263-8223. doi: https://doi.org/10.1016/j. compstruct.2020.111915.

[52] **Aguilera RB, Agirre MM, Berasategi J, Penalba M, Bou-Ali MM, Shevtsova V**. Effect of liner thermal properties and liner pre-cooling on the thermal management of fast-filling of hydrogen tanks. Int J Hydrogen Energy 2023

[53] **M. Bilgili and R. F. Yumsakdemir**. Effects of real gas equations on the fast-filling process of compressed hydrogen storage tank. In: International Journal of Hydro- gen Energy, 53, 816–828. issn: 0360-3199. doi: 10.1016/S0360319923062687.

[54] **Inc. ANSYS**. ANSYS FLUENT User's Guide. 2020.

[55] **D. Xu, B.C. Khoo, and M.A. Leschziner**. Numerical simulation of turbulent flow in an axisymmetric diffuser with a curved surface centre-body. In: International Journal of Numerical Methods for Heat Fluid Flow, 8 2, 245–255. issn: 09615539. doi: 10.1108/09615539810201901.

[56] **P.C. Walsh and W.H. Leong**. Effectiveness of several turbulence models in natural convection. English. In: International Journal of Numerical Methods for Heat Fluid Flow, 14 5, 633–648. issn: 09615539. doi: 10.1108/09615530410539955.

[57] **M. Raisee, A. Noursadeghi, and H. Iacovides**. Application of a non-linear k- model in prediction of convective heat transfer through ribbed passages. English. In: International Journal of Numerical Methods for Heat Fluid Flow, 14 3, 285– 304. issn: 09615539. doi: 10.1108/09615530410517968

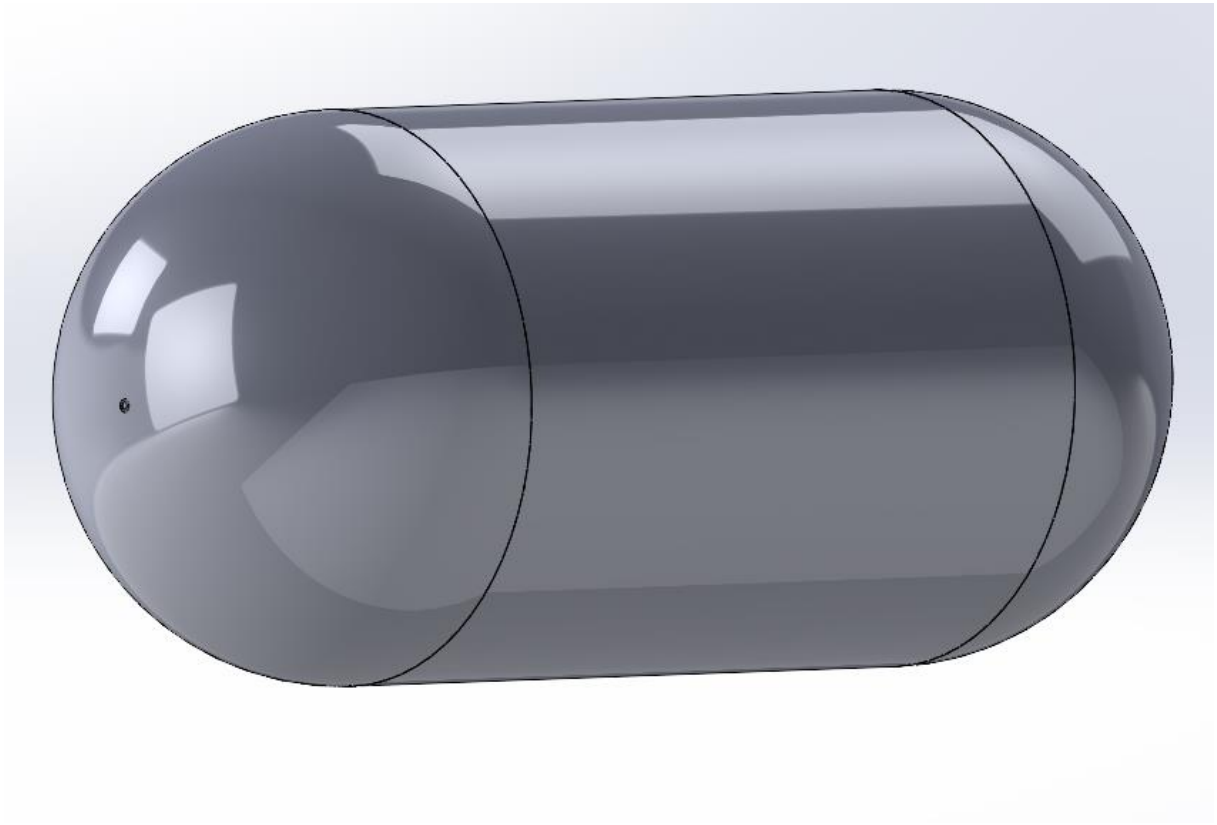
[58] **John Abraham Vinicio Magi Venkatraman Iyer**. THE k- MODEL AND COMPUTED SPREADING RATES IN ROUND AND PLANE JETS. In: Nu- merical Heat Transfer, Part A: Applications, 40 4, 317–334. doi: 10 . 1080 / 104077801753238130.

[59] **John Abraham**. ENTRAPMENT CHARACTERISTICS OF TRANSIENT GAS JETS. In: Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, 30 4, 347–364. doi: 10.1080/10407789608913844.

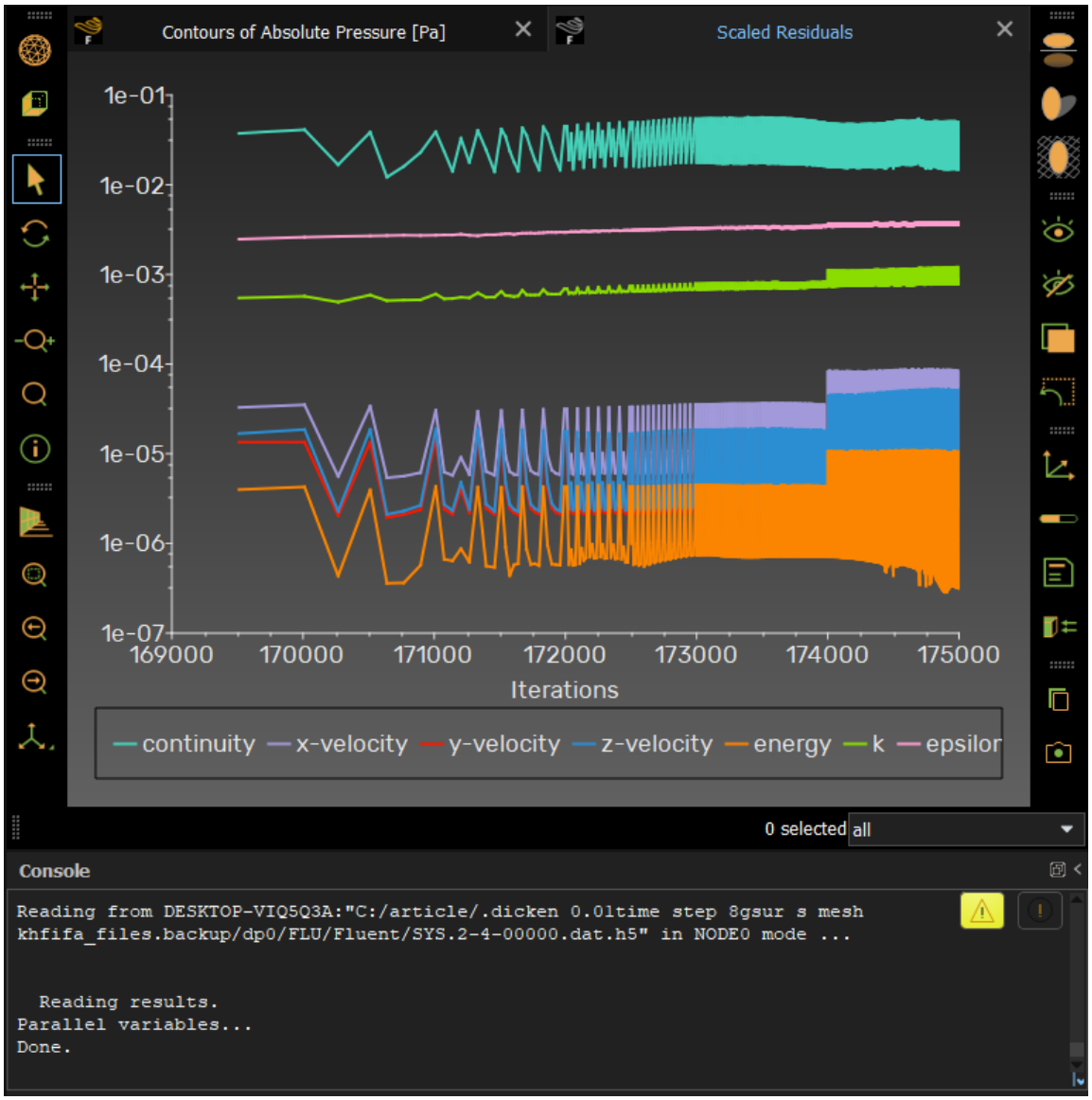
[60] **Lamyaa A. El-Gabry and Deborah A. Kaminski**. NUMERICAL INVESTIGATION OF JET IMPINGEMENT WITH CROSS FLOW—COMPARISON OF YANG-SHIH AND STANDARD k– TURBULENCE MODELS. In: Nu- merical Heat Transfer, Part A: Applications, 47 5, 441–469. doi: 10 . 1080 /10407780590891254.

[61] **K. Annamalai, I. K. Puri, and M. A. Jog**. Advanced Thermodynamics Engineering. 2nd. CRC Press, 2011.

Annexes



Annexe 1 : Modèle 3D du réservoir utilisé pour la simulation numérique



Annexe 2 : Évolution des résidus normalisés pendant la simulation CFD

Nombre de pas de temps	**Temps de remplissage (s)**	**Pression maximale (MPa)**	**Température maximale (K)**	**Vitesse maximale (m/s)**
3520	176	**35**	**342.34**	**17.30**
3400	170	**33.79**	**341.08**	**17.94**
3000	**150**	**29.22**	**338.06**	**20.19**
2600	**130**	**24.92**	**334.98**	**23.07**
2200	**110**	**20.86**	**331.87**	**26.88**
1800	**90**	**17.03**	**328.70**	**32.15**
1400	**70**	**13.41**	**325.40**	**39.92**
1000	**50**	**9.98**	**321.74**	**52.49**
600	**30**	**6.74**	**317.33**	**76.21**
200	**10**	**3.66**	**310.88**	**137.38**
0	**0**	**2**	**293**	**237.36**

Annexe 3 : Évolution des grandeurs physiques pendant le processus de remplissage du réservoir d'hydrogène