

Modélisation et Simulation du Transfert de Chaleur et de Masse à l'Intérieur d'un Réacteur de Charbon Actif Réagissant avec de l'Ammoniac Couplé à un Caloduc Annulaire à Eau

M. Bakkas¹, M. Mada² et M. Tahri³

¹ Laboratoire de Thermodynamique et Energétique, Faculté des Sciences et Techniques, Boutalamine, B.P. 509 Errachidia, Maroc

² Laboratoire de Rhéologie et Energétique Industrielle, Département Génie des Procédés, Ecole Mohammadia des Ingénieurs, Rabat, Maroc

³ Laboratoire de Thermodynamique Appliquée et des Combustibles Solides, Département Génie des Procédés, Ecole Mohammadia des Ingénieurs, Rabat, Maroc

Résumé - L'utilisation d'adsorbant solides dans des cycles thermodynamiques de réfrigération, fonctionnant avec de l'énergie solaire, souffre de limitations de puissance à cause de mauvais transferts de chaleur et de matière dans l'adsorbent [1-5]. Pour pallier à ces problèmes, nous avons étudié l'impact d'utiliser un caloduc annulaire couplé à un capteur solaire à concentration du type CPC [6-7]. Cette idée nous a été suggérée par le fait que le caloduc permettra, en transportant l'énergie sous forme de chaleur latente entre l'évaporateur et le condenseur, de mettre en jeu des puissances très élevées [8-9].

L'évaluation de l'impact de l'utilisation du caloduc a été faite par simulation, à la base d'un modèle que nous avons élaboré, du fonctionnement du réfrigérateur solaire à adsorption utilisant le couple charbon actif / ammoniac. A cet égard, nous avons calculé les profils des températures à l'intérieur de l'adsorbent. Nous avons à cet effet résolu les équations de conservation de matière et d'énergie par une méthode implicite de différences finies et nous avons utilisé le modèle de Dubinin -Raduskevitch pour décrire le phénomène d'adsorption. Les paramètres du modèle ont été pris de la littérature. Les profils de températures obtenus nous ont permis en particulier de déterminer la masse adsorbée et désorbée.

Mots clés: Caloduc annulaire - Réacteur - Energie solaire - Milieu poreux - Adsorption - Charbon actif - Ammoniac - Réfrigération.

1. INTRODUCTION

Le présent travail propose une contribution aux développements de la technologie des machines frigorifiques à adsorption qui consiste à étudier le couplage d'un caloduc annulaire à eau à un capteur solaire à concentration type CPC et avec un réacteur qui contient le couple adsorbant / adsorbat (Fig. 1). En effet, le caloduc constitue un moyen très précieux de transport et de régulation d'énergie. Une des propriétés principales des caloducs est en fait, leur habilité à concentrer et disperser l'énergie suivant le besoin. Ainsi, le couplage des caloducs annulaires à des capteurs solaires permettra la conversion du flux incident solaire (chaleur sensible), en chaleur latente, favorisant de cette manière la qualité et la quantité d'énergie échangée. Une telle performance pourrait rendre l'énergie solaire plus flexible et moins coûteuse pour intégrer quelques procédés énergétiques industriels.

Dans cet article, on propose une étude théorique des transferts de chaleur et de masse à l'intérieur du réacteur de charbon actif réagissant avec de l'ammoniac couplé à un caloduc annulaire à eau dans les conditions réelles de fonctionnement qui est un moyen efficace pour le bon dimensionnement du réacteur et le calcul des performances de la machine frigorifiques à adsorption. Nous présentons aux début, les équations régissant les transferts de chaleur et de masse lors de la désorption du couple charbon actif/ammoniac dans l'adsorbent. Le système d'équations est résolu numériquement par la méthode de différences finies. La simulation numérique permet d'avoir les profils de températures et l'évolution de la masse adsorbée et désorbée en fonction du temps et de déterminer la sensibilité de la température du caloduc sur la cinétique de désorption- condensation et par conséquent sur la durée de cycle de production du froid.

2. FORMULATION MATHÉMATIQUE

Le milieu poreux considéré est constitué d'un lit fixe de grains de charbon actif réagissant par adsorption avec l'ammoniac. Le milieu poreux est enfermé à l'intérieur du cylindre à double enveloppe (réacteur). L'apport énergétique très important à fournir au réacteur est donc décisif pour le déclenchement de la phase désorption - condensation. Le caloduc annulaire à eau, moyen très performant de transport d'énergie, est préconisé pour un couplage avec le réacteur tubulaire (Fig. 2). Le milieu poreux est formé d'une phase solide constituée par les grains de charbon, une phase gazeuse et une phase adsorbée.

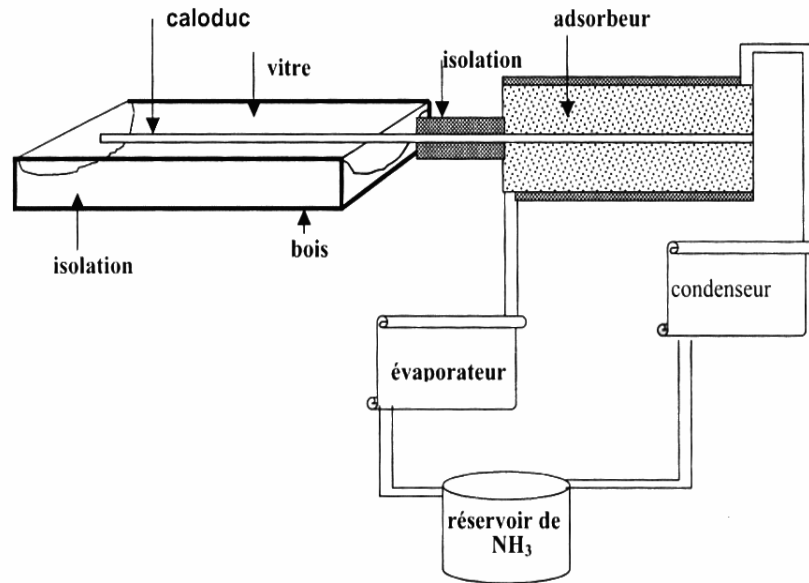


Fig. 1: Prototype pour la production de froid

Les équations des transferts couplés de chaleur et de masse dans ce milieu poreux sont déterminées en faisant un bilan d'énergie et de masse de l'adsorbat sur une tranche du milieu poreux d'épaisseur dr (Fig. 3). Plusieurs hypothèses simplificatrices sont utilisées pour déterminer le système d'équations à savoir :

- Les trois phases sont considérées comme étant, en chaque point, en équilibre thermodynamique. Ce qui permet de ne définir qu'un seul champ de température pour ces trois phases et de remplacer le lit réactif par un milieu continu équivalent.
- Le transfert de chaleur est unidimensionnel, suivant le rayon du cylindre : la distribution de température est radiale.
- Compte tenu du faible débit de l'ammoniac, le transfert de chaleur convectif dans la phase vapeur est négligé.
- Les pertes de charges sont négligeables dans le milieu poreux.
- La température imposée par le caloduc est supposée uniformément répartie sur la surface du réacteur.

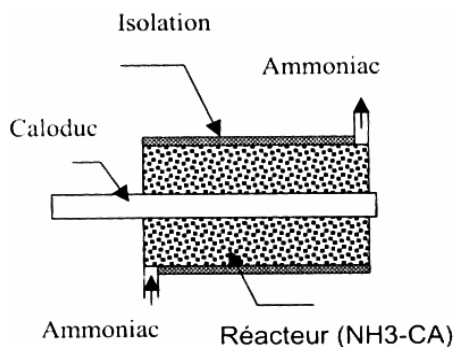
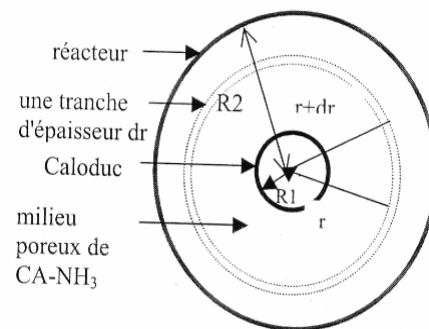


Fig. 2: Réacteur couplé à un caloduc annulaire

Fig. 3: Bilan d'énergie sur une tranche du milieu poreux d'épaisseur dr

En considérant ces hypothèses, les équations régissant à l'échelle macroscopique les transferts couplés de chaleur et de masse dans l'adsorbeur sont :

• *L'équation de conservation de la masse d'ammoniac*

$$\frac{\partial}{\partial t} [2 \pi r dr L [(\varepsilon - \alpha) \rho_g + \alpha \rho_a]] = q_m(r, t) - q_m(r + dr, t) = - \frac{\partial q_m}{\partial r} dr \quad (1)$$

• **L'équation de l'énergie dans le milieu poreux**

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[2\pi r dr L \left[(1 - \varepsilon)\rho_s u_s + (\varepsilon - \alpha)\rho_g u_g + \alpha\rho_a u_a \right] \right] = q_m(r+dr, t)h_g(T(r+dr), P) - q_m(r, t)h_g(T(r), P) = \lambda_e \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \cdot L \left[\frac{\partial^2 T}{\partial^2 r} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right] \quad (2)$$

• **L'équation de conservation d'énergie combinée à l'équation de conservation de masse**

$$A(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_e \cdot \left[\frac{\partial^2 T}{\partial^2 r} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right] + B(T) \quad (3)$$

avec

$$A(T) = (1 - \varepsilon)\rho_s c_s + (\varepsilon - \alpha)\rho_g c_g + \alpha\rho_a c_a \quad (4)$$

$$B(T) = \frac{\partial}{\partial t} ((\varepsilon - \alpha)\rho_g) \frac{P}{\rho_g} + \frac{1}{VT} \frac{\partial m_a}{\partial t} \frac{P}{\rho_a} + \Delta H_{ads} \frac{1}{VT} \frac{\partial m_a}{\partial t} \quad (5)$$

• **La cinétique de désorption**

La masse de vapeur d'ammoniac adsorbée est donnée par l'équation du Dubinin - Raduskevitch [10] qui s'écrit, dans le cas du couple charbon actif / ammoniac :

$$m = W_{Max} \rho_l \cdot \exp(-D(T \cdot \ln(\frac{P_s}{P}))^2) \quad (6)$$

Avec

$$D = K \frac{R^2}{\beta^2} \text{ est une constante caractéristique du couple adsorbant - adsorbat.}$$

β est un coefficient d'affinité, égale à 1 pour une substance standard.

T est la température absolue de l'adsorbant en K.

m est la masse adsorbée à la pression relative (P / P_s)

W_{Max} est le volume maximal géométriquement adsorbable, fonction de la microporosité de l'adsorbant.

ρ_l est la densité de l'adsorbat à l'état liquide.

où W_{Max} et D sont déterminées expérimentalement, nous retenons les valeurs trouvées par A. Mimit [12].

• **Conditions initiales**

Nous prendrons pour hypothèse une répartition uniforme dans le milieu poreux.

$$T(r, 0) = T_i \quad (r=R1, \dots, R2) \quad (7)$$

avec :

$T(r, 0)$: température de la couche de rayon r au temps $t = 0$

T_i : température initiale

$R1$: rayon externe du caloduc

$R2$: rayon du cylindre contenant le milieu poreux

• **Conditions aux limites**

◆ **$r = R1$**

En effet, il existe une résistance thermique entre le milieu poreux et le fluide caloporteur du caloduc. Nous exprimons cette condition aux limites par un bilan d'énergie à la paroi du cylindre :

$$-\lambda_e \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r=R1} = h_{gl} \cdot (T_{ca} - T) \quad (8)$$

avec :

h_{gl} représente le coefficient d'échange global entre le fluide caloporteur du caloduc et le milieu poreux (charbon actif - ammoniac).

T_{ca} : température du caloduc (fluide caloporteur du caloduc).

T : température du milieu poreux.

♦ **r = R2**

Le gradient de température est nul (on suppose que le réacteur est parfaitement calorifugé) :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r=R2} = 0 \quad (9)$$

3. RESOLUTION NUMERIQUE

La résolution du système d'équations est effectuée à l'aide d'une méthode aux différences finies, implicites [11] à sous relaxation qui consiste à décomposer le rayon en intervalles égaux à Δr et le temps en intervalles Δt . On remplace le système d'équations aux dérivées partielles par des équations aux différences finies. La discrétisation du système d'équations permet d'obtenir pour chaque noeud des équations discrétisées de la forme :

$$i = 1 \quad (r = R1)$$

$$\left(1 + \frac{\Delta r \cdot h_{gl}}{\lambda_e}\right) T_1^{j+1} - T_2^{j+1} = \frac{\Delta r \cdot h_{gl}}{\lambda_e} T_{ca} \quad (10)$$

$$2 \leq i \leq N-1$$

$$T_i^j + \frac{\Delta t \cdot B}{A} = -L \left(1 - \frac{1}{2(i-1)}\right) T_{i-1}^{j+1} + (1 + 2L) T_i^{j+1} - L \left(1 + \frac{1}{2(i-1)}\right) T_{i+1}^{j+1} \quad (11)$$

$$\text{avec } L = \left(\frac{\lambda_e}{A}\right) \cdot \left(\frac{\Delta t}{\Delta r^2}\right)$$

$$i = N \quad (r = R1)$$

$$T_N^j + \frac{B \cdot \Delta t}{A} = (1 + 2L) T_N^{j+1} - 2L T_{N-1}^{j+1} \quad (12)$$

Les coefficients A, B et L dépendent des pas de calcul, des propriétés physiques du milieu et de l'inconnue, c'est-à-dire de la température. La résolution du système d'équations algébriques non linéaire est effectuée à l'aide de la méthode itérative. Le profil de température est déterminé par la résolution du système de N équation non linéaire. Néanmoins par un artifice numérique, le système sera rendu linéaire. Pour ce faire, au premier pas de calcul, les coefficients qui sont fonction des températures sont calculées à partir des températures à l'instant précédent. A partir de ces coefficients, on obtient une première approximation de la répartition des températures T_i^{j+1} ou $T_i^{t+\Delta t}$: températures de différentes tranches du cylindre à l'instant $t + \Delta t$. Puis à la moyenne des températures entre la distribution calculée et la distribution précédente, les coefficients sont recalculés. A l'aide de ces nouveaux coefficients, une nouvelle distribution de température est estimée. On répète ces itérations jusqu'à ce que la différence de température entre deux itérations successives soit inférieure à une précision fixée.

4. RESULTATS ET DISCUSSION

L'adsorbent est un cylindre creux, couplé à un caloduc annulaire à eau, de rayon intérieur $R1 = 2.6$ cm de rayon extérieur $R2 = 5.6$ cm et de longueur 0.35 m. Ce cylindre, rempli de charbon actif, est lié à un condenseur où la condensation s'effectue à la pression $P_c = 10.2$ bar. Il est chauffé à une température de 100° C. Le fluide caloporteur choisit, est l'eau, et ce par sa bonne température d'évaporation et sa très bonne conductivité thermique. L'enveloppe du caloduc choisit est celle de cuivre, et ce par sa bonne conductivité thermique et sa compatibilité avec l'eau. Le coefficient d'échange global entre le caloduc et le charbon actif et la conductivité thermique équivalentes sont [12] : $h_{gl} = 28$ W/m²K et $\lambda_e = 0.431$ W/mK.

Les résultats de simulation numériques permettent de représenter les profils de températures à l'intérieur de l'adsorbent et de déterminer la masse adsorbée et désorbée en fonction du temps durant la phase de désorption-condensation.

Les résultats de simulation sont portés sur les figures 4, 5 et 6 pour différentes températures de caloduc à savoir $T_{ca} = 70\text{ °C}$, 90 °C et 100 °C et pour une température initiale du réacteur $T_i = 20\text{ °C}$. Pour des valeurs de T_{ca} et T_i données, on constate que l'allure des profils de températures est presque le même et que pour un instant donné, la température diminue au fur et à mesure qu'on s'éloigne de la paroi de caloduc. Ainsi, plus le réacteur est long, moins sont les pertes de chaleur et donc sont intenses les échanges. Donc on a intérêt à diminuer le rayon externe du réacteur et augmenter la longueur du réacteur. En chauffant la paroi du réacteur, la température du milieu poreux augmente et nous constatons l'existence d'un front de chaleur qui avance vers la surface latérale du réacteur. Cette élévation de température entraîne la vaporisation de l'ammoniac contenue dans les grains. Par conséquent, la masse adsorbée dans l'adsorbent diminue en fonction du temps et tend vers une valeur constante.

Les figures 7, 8 et 9 présentent l'évolution de la masse totale désorbée et adsorbée pour différentes valeurs de températures de caloduc T_{ca} et avec une température initiale de réacteur $T_i = 20\text{ °C}$. Ces figures montrent qu'une augmentation de T_{ca} diminue d'une façon appréciable le temps de la phase désorption-condensation. En effet pour une température de $T_{ca} = 70\text{ °C}$, la durée de la phase désorption condensation est de 50 mn, alors qu'il est de 25 mn pour $T_{ca} = 100\text{ °C}$, ce qui permet une diminution de 50 %. Ceci s'explique par le couplage réacteur caloduc qui permet une bonne transformation de flux, surfaces isothermes, et une très bonne adaptation du profil de température dans le réacteur. On a donc intérêt à augmenter la température de caloduc pour réduire le temps de la phase désorption- condensation et par conséquent le temps de cycle de production du froid.

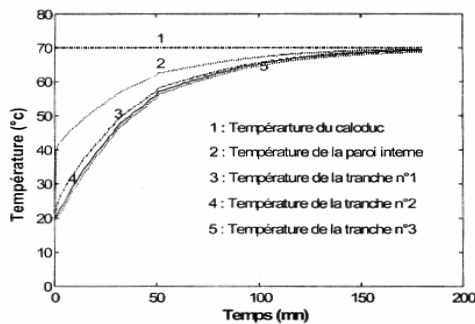


Fig. 4: $T_i = 20\text{ °C}$ $T_{ca} = 70\text{ °C}$

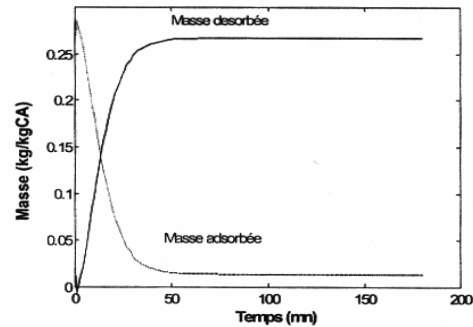


Fig. 7: $T_i = 20\text{ °C}$ $T_{ca} = 70\text{ °C}$

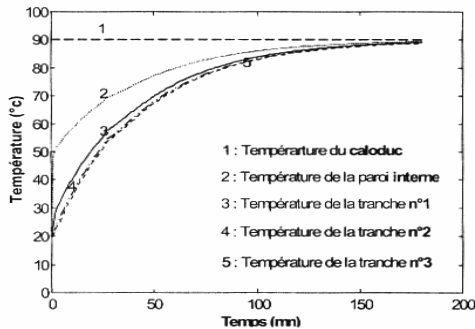


Fig. 5: $T_i = 20\text{ °C}$ $T_{ca} = 90\text{ °C}$

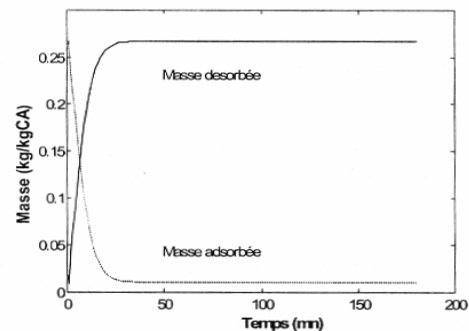


Fig. 8: $T_i = 20\text{ °C}$ $T_{ca} = 90\text{ °C}$

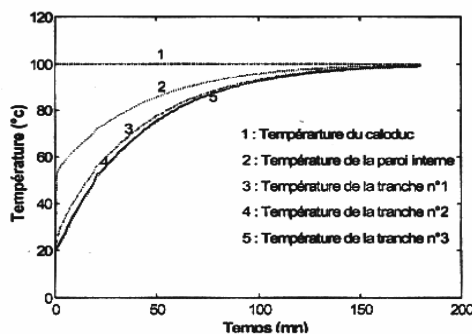


Fig. 6: $T_i = 20\text{ °C}$ $T_{ca} = 100\text{ °C}$

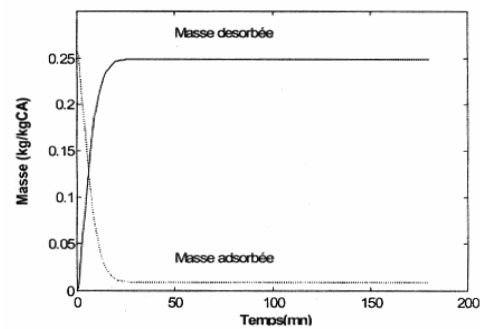


Fig. 9: $T_i = 20\text{ °C}$ $T_{ca} = 100\text{ °C}$

5. CONCLUSION

Les résultats que nous avons obtenus suggèrent que l'utilisation du caloduc permette une bonne transmission des flux et une bonne adaptation du profil de température dans l'adsorbent conduisant à une grande amélioration de l'efficacité du réfrigérateur. Le modèle que nous avons développé nous a également permis d'étudier l'influence de certains paramètres tels que la température du caloduc sur la cinétique de désorption- condensation et par conséquent sur la durée du cycle de production du froid.

NOMENCLATURE

C	Capacité calorifique (J/kgK)	ΔH	Chaleur latente d'adsorption (J/kg)
L	Longueur de l'adsorbent (m)	Δr	Pas radial (m)
H	Enthalpie (J/kg)	Δt	Pas de temps (s)
R	Coordonnée radiale (m)	α	Fraction volumique de la phase adsorbée
T	Température (K)	ρ	Masse volumique (kg/m ³)
T	Temps (s)	λ	Conductivité thermique (W/mK)
Dr	Épaisseur élémentaire d'une tranche (m)	ε	Porosité du lit
VT	Volume totale d'une tranche (m ³)	q_m	Débit massique (kg/s)
M	Masse (kg)	h_{gl}	Coefficient d'échange global (W/m ² K)
P	Pression (bar)	Ps	Pression de saturation (bar)
Indices			
G	Gaz	s	Solide
A	Adsorbé	ca	caloduc
I	Initiale	e	équivalente

REFERENCES

- [1] D.I Tchernev, 'Solar Réfrigération Utilizing Zéolithes', Copyright, Americal Chemical Society, 1979.
- [2] J.J. Guillemot et F. Meunier, 'Etude Expérimentale d'une Glacière Solaire Utilisant le Couple Zéolithe - Eau', Revue Générale de Thermique, N° 239, pp. 825-834, 1981.
- [3] F. Lemmini, 'Simulation des Performances d'un Réfrigérateur Solaire à Adsorption : Comparaison des Performances pour Deux Types de Charbon Actif', Rev. Int. Froid, Vol 15, N° 3, pp. 159-167, 1992.
- [4] P. Grenier, J.J. Guillemot, I. Ismail et M. Pons, 'Etude Comparative des Cycles Intermittents utilisant soit le Couple Zéolithe - Eau, soit le couple Charbon Actif- Méthanol', Int. Inst. of Refrigeration, Paris Congress, Vol 2, pp. 353-361, 1983.
- [5] P. Grenier, F. Meunier et M. Pons, 'Les Différentes Possibilités d'Application du Couple Zéolithe 13x - H₂O pour le Froid Solaire en Fonction du Type de Captation de l'Energie Solaire', Congrès IIF, Jérusalem, 1982.
- [6] F. Aghbalou, A. Touzani, M. Mada, M. Charia and A. Bernatchou, 'Cylindrical Parabolic Solar Collector Heat Pipe Assembly', Marrakech, Morocco, 9-12 Juin 1997.
- [7] F. Aghbalou, A. Touzani, M. Mada, M. Charia and A. Bernatchou, 'A Parabolic Solar Collector Heat Pipe Exchanger Reactor Assembly for Cyclohexane's Dehydrogenation : a Simulation Study', Int. J. Renewable Energy, Elsevier Publisher, 1998.
- [8] J.T. Richardson, S.A. Paripatyadar and J.C. Shem, 'Dynamics of a Sodium Heat Pipe Reforming Reactor', AIChE, Vol. 34, p. 743, 1988.
- [9] Institut Fur Kernenergetik, Universitat Stuttgart, 700, Hoderbuscheveg 52 (Germany).
- [10] B. Carnahal, Applied Numerical Methods, Ed. John and Sons, 1969.
- [11] S. Brunauer, 'The Adsorption of Gases and Vapors', Ed. Oxf. University Press, 1943.
- [12] A. Mimet, 'Etude Théorique d'une Machine Frigorifique à Adsorption d'Ammoniac sur Charbon Actif', Thèse de Doctorat, Faculté Polytechnique de Mons, 1991.