



HAL
open science

Simulation et optimisation des performances d'un compresseur à hydrogène par adsorption-désorption à entraînement thermique

V. Nicolas, G. Sdanghi, K. Mozet, S. Schaefer, G. Maranzana, A. Celzard,
Vanessa Fierro

► **To cite this version:**

V. Nicolas, G. Sdanghi, K. Mozet, S. Schaefer, G. Maranzana, et al.. Simulation et optimisation des performances d'un compresseur à hydrogène par adsorption-désorption à entraînement thermique. Congrès Annuel de la Société Française de Thermique 2022, May 2022, Valenciennes, France. Société Française de Thermique, 2022. hal-04376124

HAL Id: hal-04376124

<https://hal.univ-lorraine.fr/hal-04376124>

Submitted on 6 Jan 2024

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

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

Simulation et optimisation des performances d'un compresseur à hydrogène par adsorption-désorption à entraînement thermique



V. Nicolas^(1*), G. Sdanghi^(1,2), K. Mozet⁽²⁾, S. Schaefer⁽¹⁾, G. Maranzana⁽²⁾, A. Celzard⁽¹⁾, V. Fierro^(1*)

Contexte et Objectifs

Contexte: Dans une étude précédente, nous avons prouvé qu'il était possible de **compresser l'hydrogène jusqu'à 70 MPa** grâce à une compression à deux étapes:

- Etage 1 : Compression électrochimique
- **Etage 2 : Compression par adsorption-désorption à entraînement thermique**

En contrôlant l'adsorption/désorption cyclique de l'hydrogène sur des charbons actifs (CA), la **compression à entraînement thermique** permet de compresser de 8MPa à plus de 70 MPa

Problématique: Les expériences de **compression à entraînement thermique** sur ce compresseur prennent beaucoup de temps, ce qui rend difficile de savoir comment le compresseur se comporte dans une variété de conditions thermiques possibles.

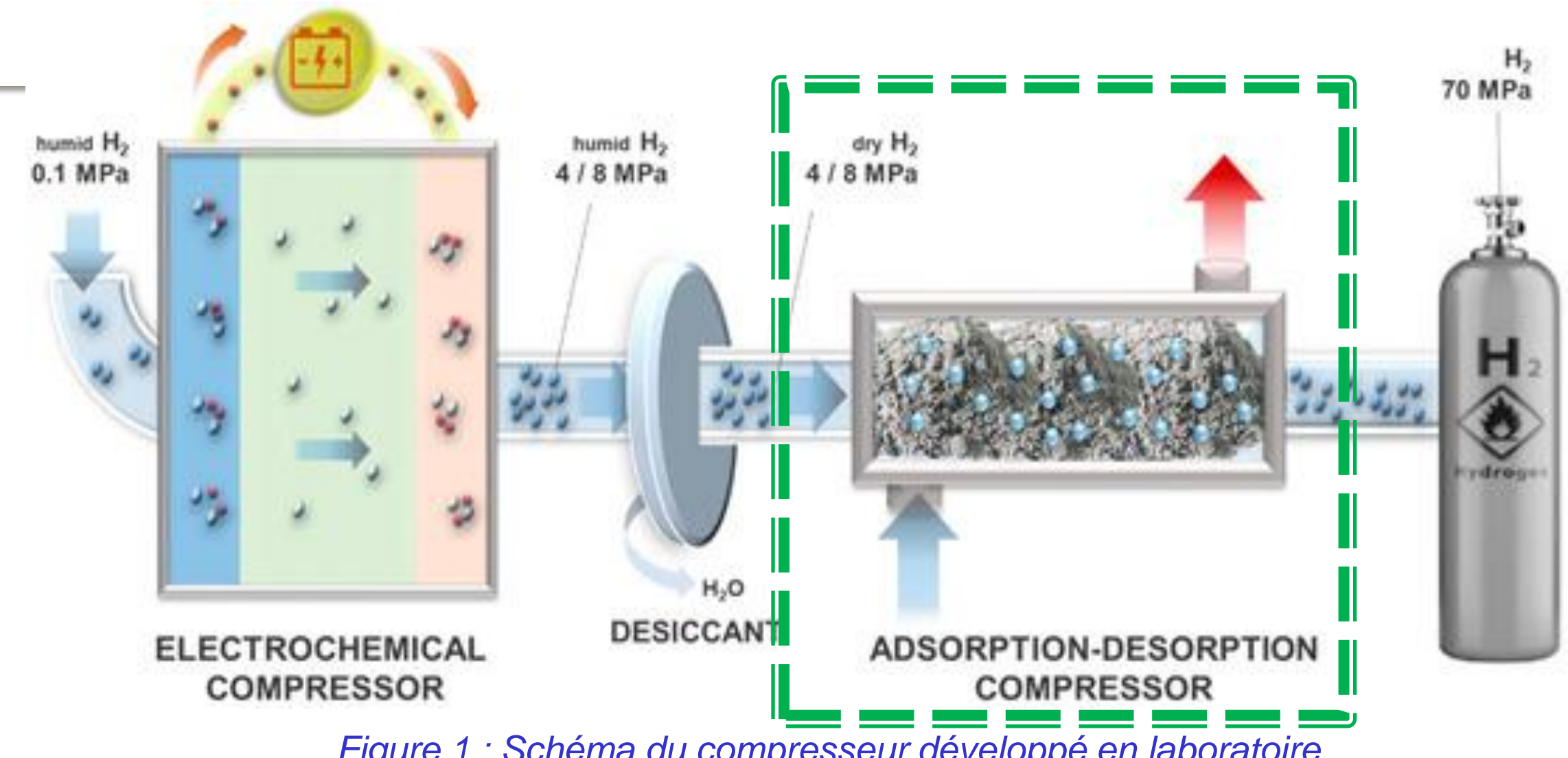


Figure 1 : Schéma du compresseur développé en laboratoire

Objectifs:

- Modélisation de l'étage 2 du compresseur
- Comprendre les phénomènes existants
- Optimiser le système

Etude expérimentale et Développement d'un modèle numérique

Approche expérimentale

Réservoir:

- Volume de 0,5 L
- 0,135 kg de Charbon Actif (MSC-30 de Kansai, Japon)

Mesure de la température (TTC – Figure 3) et de la pression en partie haute du compresseur

Deux étapes de montée en température:

- étape n°1, de 77 K à la température ambiante, où le **chauffage** se fait par convection avec l'air
- étape n°2, le chauffage est entraîné par des **résistances thermiques** à puissance constante (100, 200 ou 300 W)
- Multiplication des situations expérimentales

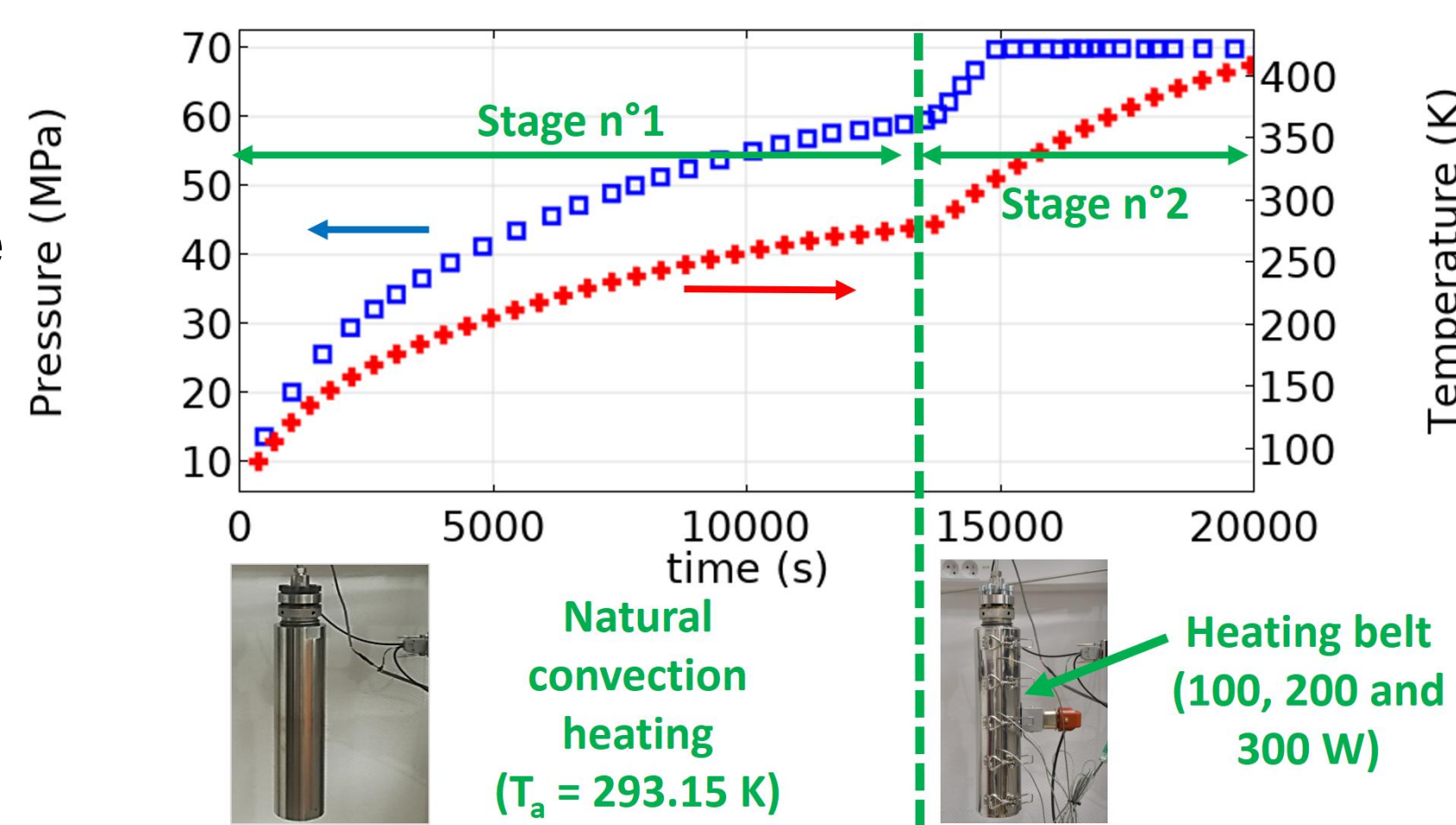


Figure 2 : Exemple de changements de température et de pression en fonction du temps, pour les deux étapes de compression.

Modèle 2D axisymétrique

Transfert d'hydrogène par gradient de pression (loi de Darcy) et désorption

$$\frac{\varepsilon_g \partial \rho_g}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(-\varepsilon_g \rho_g \frac{k}{\mu} \vec{\nabla} P \right) = -\rho_b M \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_a} \right) \frac{\partial x_a}{\partial t}$$

Transferts de chaleur par conduction, transferts de matière et changement de phase (désorption)

$$\left(\varepsilon_g c_{p,g} \rho_g + \varepsilon_a c_{p,a} \rho_a + \varepsilon_s c_{p,s} \rho_s \right) \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(-\varepsilon_g \rho_g c_{p,g} T \frac{k}{\mu} \vec{\nabla} P \right) + \vec{\nabla} \cdot \left(-\lambda_{eff} \vec{\nabla} T \right) = -\varepsilon_g c_{p,g} T \frac{\partial \rho_g}{\partial t} - c_{p,g} \rho_g T \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} - c_{p,a} \rho_a T \frac{\partial \varepsilon_a}{\partial t} - \rho_b \Delta H_{ads} \frac{\partial x_a}{\partial t}$$

La **quantité d'hydrogène adsorbé** est exprimée par l'équation modifiée de Dubinin-Astakhov (MDA)

$$n_{exc} = \left[n_{max} \exp \left(\left(\frac{RT}{\alpha + \beta T} \right)^2 \ln^2 \left(\frac{P_0}{P} \right) \right) \right] \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_{liq}} \right)$$

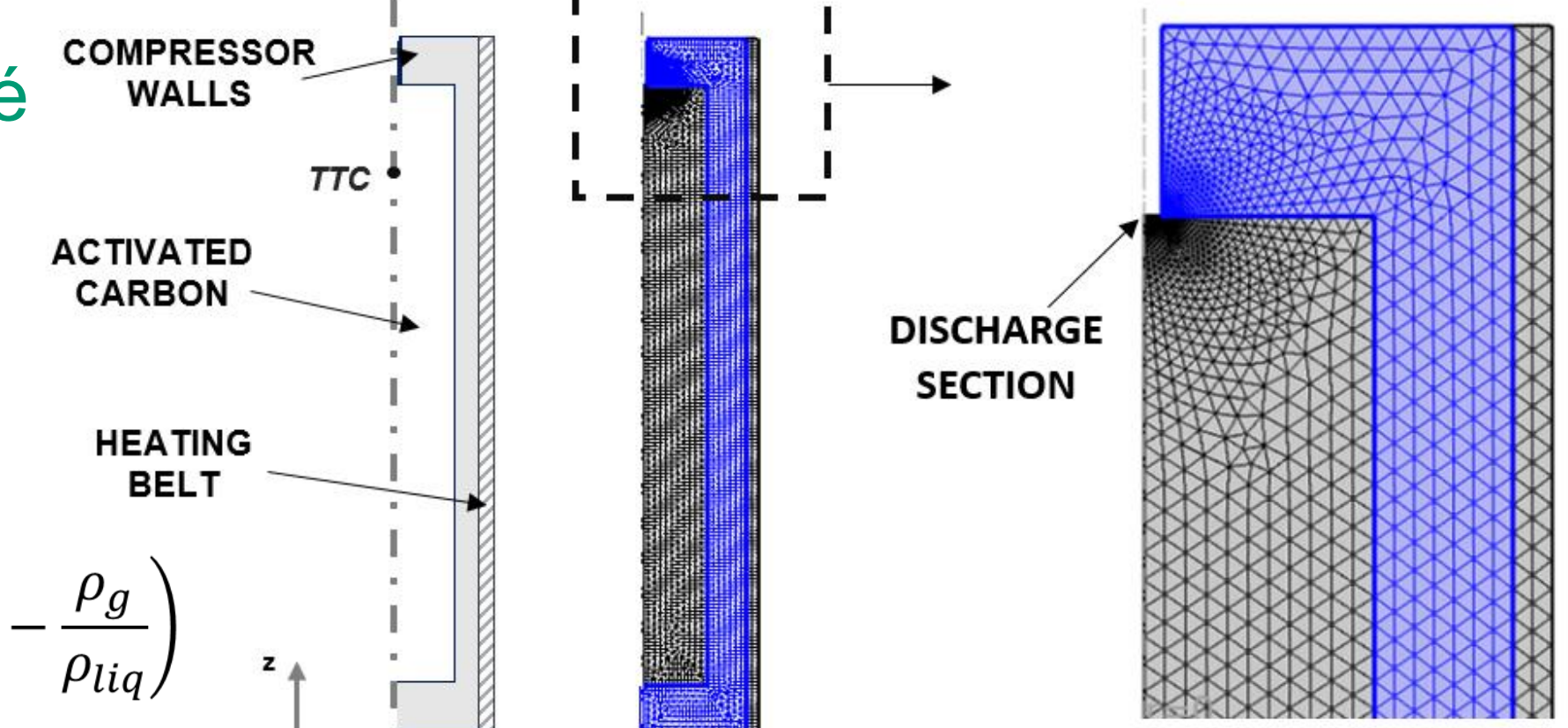


Figure 3 : Géométrie et maillage utilisés

Résultats et discussion

Validation du modèle numérique

Température et pression:

- Accord entre simulation et expérience
- Pression en fin de première phase sous évaluée
- Retard à l'ouverture du compresseur par rapport à l'expérience

Hydrogène déchargé:

- Augmentation du débit d'hydrogène déchargé avec la puissance de chauffe

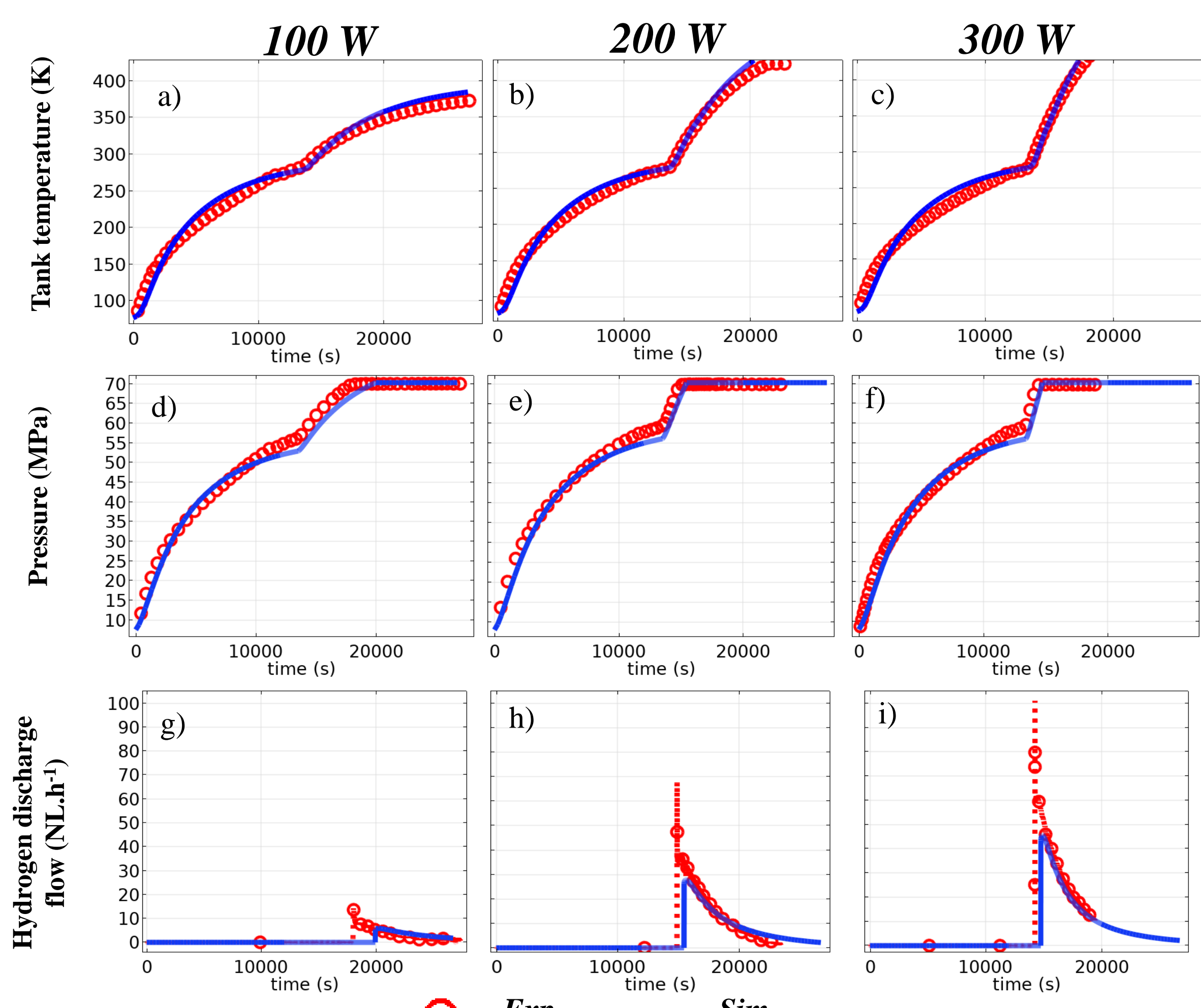


Figure 4 : Évolution simulée (ligne pleine) et expérimentale (cercles vides) de la température (a, b, c), de la pression (d, e, f), du débit d'hydrogène (g, h, i).

Etudes paramétriques

Impact de la température de consigne (puissance constante):

- Etude paramétrique entre 40 et 200 °C avec régulation de la température
- Augmentation linéaire de la quantité déchargée avec la température dans la plage 60 – 200°C
- Effet de seuil avec la température
 - Aucune décharge avant 60°C/333.15 K (simulation)

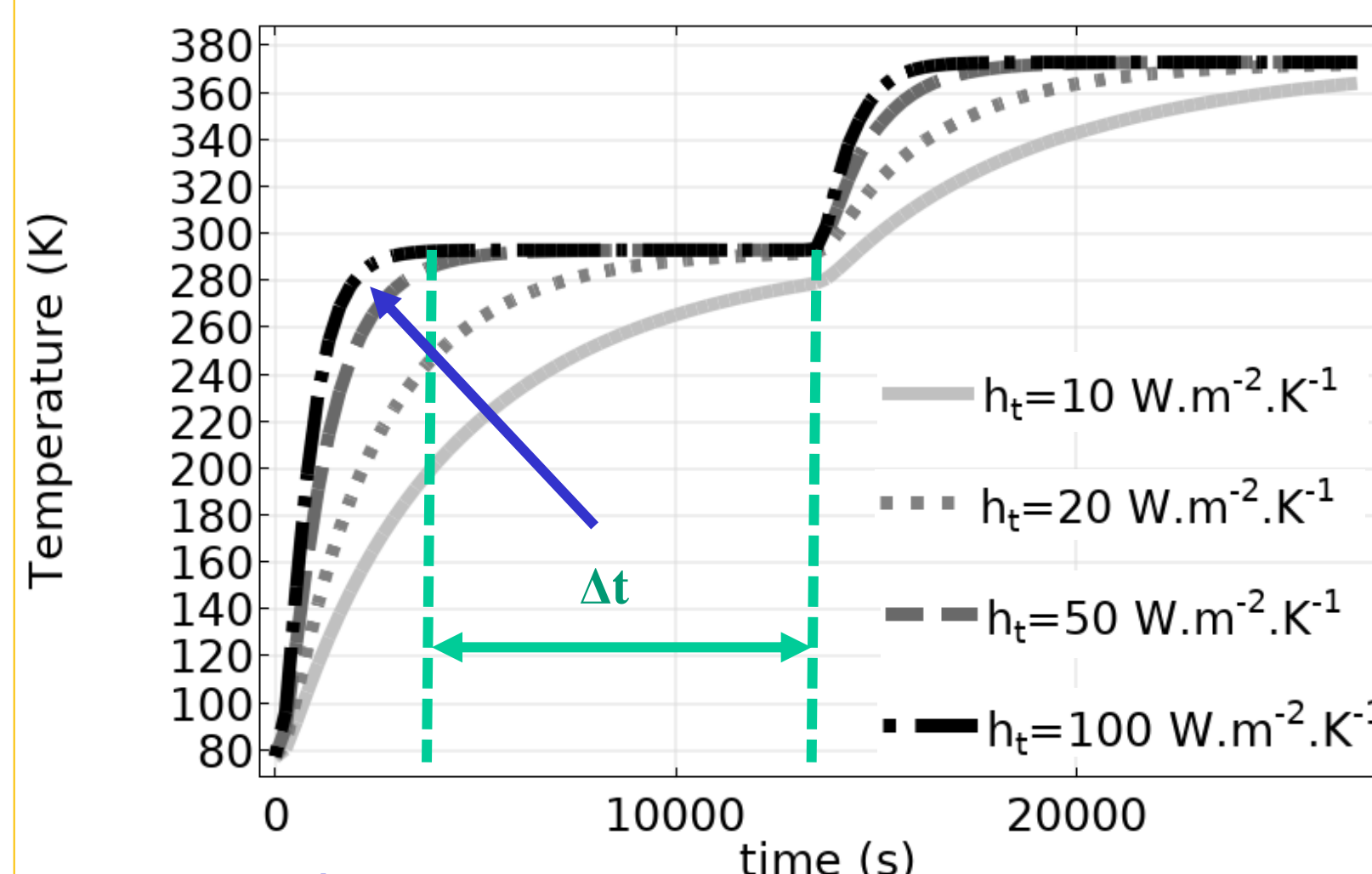


Figure 6 : Évolution temporelle de la température, pour $h_t = 10$ (solide), 20 (pointillé), 50 (tiret) et 100 (pointillé/tiret) $W m^{-2} K^{-1}$.

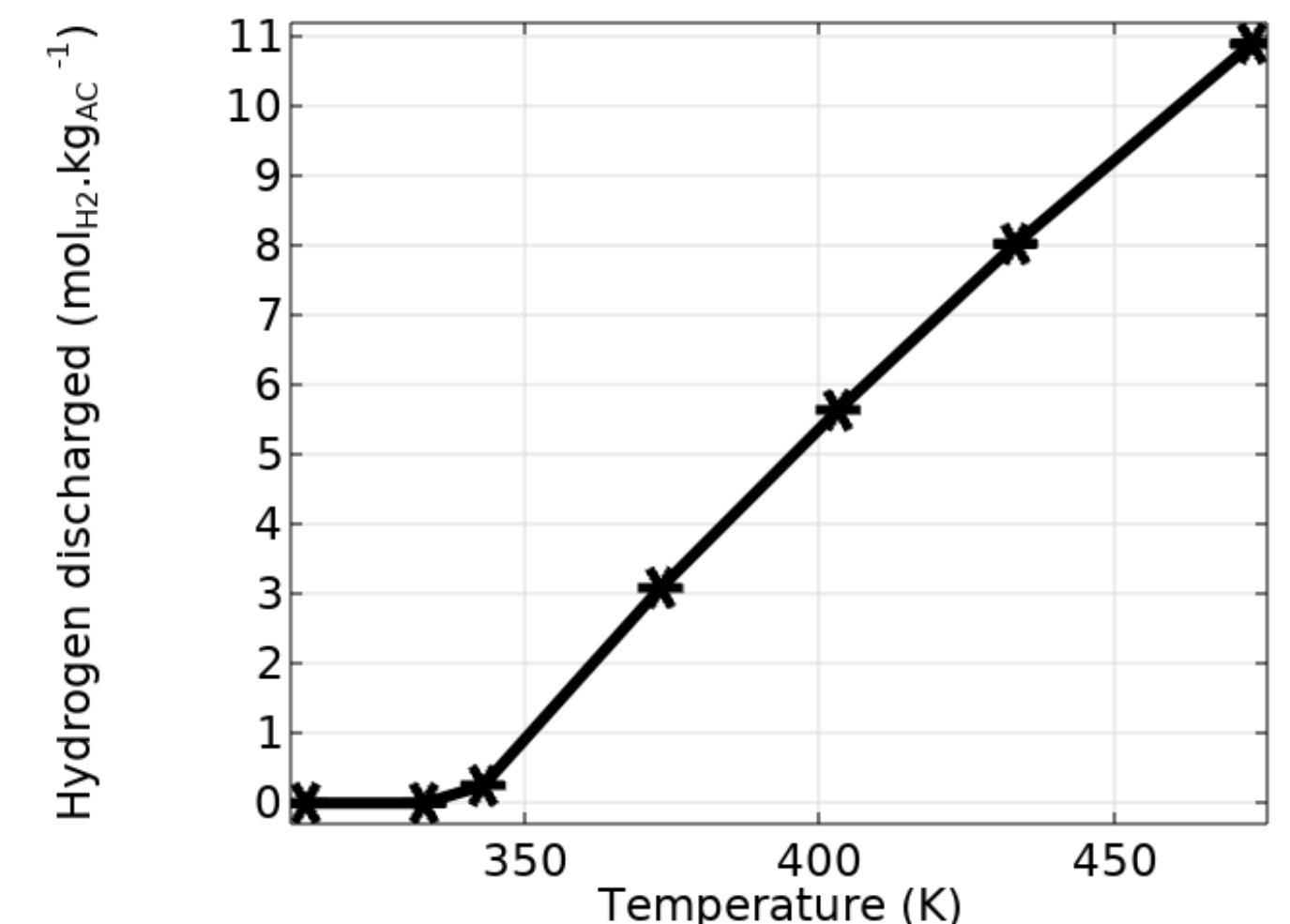


Figure 5 : Quantité totale d'hydrogène déchargé en fonction de la température de consigne

Intensification des échanges thermiques externes

- Variation du coefficient d'échange thermique de 10 à 100 $W/(m^2.K)$
- Intensification du flux d'hydrogène déchargé
 - Quantité finale constante
 - Gain en temps de montée en température
 - 2,77 h soit 75% de gain sur la première étape

Conclusions

- ❖ Développement et **validation d'un modèle numérique prédictif** pour la simulation de la compression à entraînement thermique de l'hydrogène sur charbons actifs **pour trois configurations**
- ❖ La **puissance de chauffe impacte le débit d'hydrogène déchargé**
- ❖ La **quantité d'hydrogène déchargée est proportionnelle à la température de consigne** du compresseur
- ❖ L'intensification des transferts par convection forcée permet un **gain de 75%** sur le temps de compression