



HAL
open science

Etude du fonctionnement d'une machine frigorifique à adsorption : modélisation des transferts de chaleur et de masse et optimisation du fonctionnement de la machine

Mouad Diny

► To cite this version:

Mouad Diny. Etude du fonctionnement d'une machine frigorifique à adsorption : modélisation des transferts de chaleur et de masse et optimisation du fonctionnement de la machine. Sciences de l'ingénieur [physics]. Université Henri Poincaré - Nancy 1, 1996. Français. NNT : 1996NAN10288 . tel-01753520

HAL Id: tel-01753520

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01753520v1>

Submitted on 29 Mar 2018

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.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

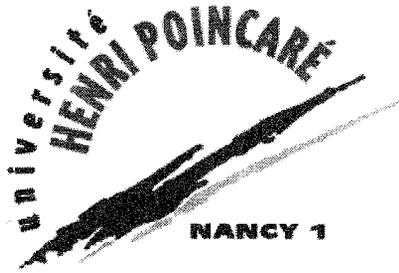
LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



LABORATOIRE D'ÉNERGÉTIQUE ET DE MÉCANIQUE
THÉORIQUE ET APPLIQUÉE
LEMTA

U.F.R. Sciences et Techniques
de la Matière et des Procédés
(STMP)

*École Doctorale PROMEN (Procédés et Mécanique Énergétique)
Département de Formation Mécanique Énergétique*

THÈSE

présentée pour l'obtention du grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ HENRI POINCARÉ, NANCY I

Spécialité: Mécanique et Énergétique

Par

Mouad DINY



ETUDE DU FONCTIONNEMENT D'UNE MACHINE
FRIGORIFIQUE A ADSORPTION MODELISATION DES
TRANSFERTS DE CHALEUR ET DE MASSE ET OPTIMISATION
DU FONCTIONNEMENT DE LA MACHINE

Soutenue publiquement le 16 Décembre 1996 devant la commission d'examen :

Président :

G. PIAR Professeur à PARIS VII

Rapporteurs :

R. JADOT Professeur à la Faculté Polytechnique de MONS

G. PIAR Professeur à PARIS VII

Examineurs :

R. BOUSSEHAIN Maître de Conférences à l'ENSAIS

M. FEIDT Professeur à l'UHP, NANCY-I

L. LUO Maître de Conférences à l'ENSIC

REMERCIEMENTS

REMERCIEMENTS

Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué au Laboratoire d'Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée (L.E.M.T.A).

J'adresse mes plus sincères remerciements à Monsieur M. FEIDT, Professeur à l'université Henri Poincaré Nancy I et responsable du G.E.S.P.E (Groupe d'Etude des Systèmes et Procédés Energétiques), pour m'avoir accueilli et pour le climat cordial qu'il a su faire régner au sein de son équipe.

Je tiens à remercier Monsieur R. BOUSSEHAIN, Maître de conférences à l'E.N.S.A.I de Strasbourg et Directeur de la thèse, pour m'avoir proposé ce sujet de recherche. L'intérêt qu'il a toujours su porter à mes travaux, et ses compétences en matière d'encadrement, m'ont été d'une aide particulièrement précieuse.

Je remercie Monsieur G. PIAR, Professeur à l'université de Paris VII, Laboratoire de Thermique Industrielle, d'avoir accepté d'être rapporteur de cette thèse.

Je remercie également Monsieur R. JADOT, Professeur à l'université Polytechnique de Mons (Belgique) qui a accepté d'être rapporteur de cette thèse.

J'adresse également mes remerciements à Madame L. LUO, Maître de conférences à l'E.N.S.I.C de Nancy, pour sa participation au jury.

J'ai beaucoup apprécié le dynamisme et l'aide précieuse que, Monsieur J.F. VIDAL, technicien de l'équipe G.E.S.P.E, m'a apportés dans la mise en oeuvre du dispositif expérimental.

J'adresse enfin mes remerciements à toutes les personnes " amis, collègues et secrétaires " du L.E.M.T.A, pour leur aide amicale et leur sympathie, et plus particulièrement à Catherine AUGSBURGER et Edith LANG.

SOMMAIRE GENERAL

Introduction générale	7
CHAP I : Synthèse sur les systèmes frigorifiques	10
CHAP II : Modélisation thermodynamique de la sorption	28
CHAP III : Modélisation du fonctionnement	57
CHAP IV : Dispositif expérimental	87
CHAP V : Résultats expérimentaux et numériques	105
CHAP IV : Modélisation et optimisation du fonctionnement des machines trithermes	126
Conclusion générale et perspectives	159
Annexes	161

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

Les techniques d'application du phénomène d'adsorption se retrouvent dans plusieurs processus industriels. Les systèmes utilisant des adsorbants solides tels que les charbons actifs les aluminosilicates contribuent largement dans les processus de séparation, de purification, du séchage, de déshumidification et de traitement d'air.

Les contraintes environnementales imposées pour la limitation de l'utilisation des frigorigènes CFC et HCFC ont contribué à l'émergence des systèmes utilisant l'énergie calorifique comme source primaire telles que les machines frigorifiques à adsorption, objet de la présente thèse.

Cette étude, entreprise suite au travail de thèse de L.LUO [1], a pour objectifs :

- la caractérisation des performances de l'installation frigorifique en vue de l'optimisation de son fonctionnement
- la modélisation des transferts de chaleur et de masse, en transitoire, dans un grain considéré bidispersé et à l'échelle du générateur de la machine
- l'optimisation théorique à contrainte de puissance calorifique, pour dégager des critères dimensionnels de conception des échangeurs de la machine.

Après avoir dressé dans le chapitre I une synthèse bibliographique sur les systèmes frigorifiques, nous consacrons le chapitre II à des rappels fondamentaux de la physique d'adsorption et à la modélisation des isothermes de sorption.

Dans le chapitre III, la modélisation des transferts de chaleur et de masse dans un grain bidispersé et dans le générateur est effectuée.

Les chapitres IV et V, présentent le dispositif expérimental et les résultats expérimentaux d'évolution en temps réel des températures, des pressions, des masses sorbées dans le générateur ainsi que les conductances thermiques des composants.

Ils présentent aussi, quelques résultats numériques de modélisation des transferts dans le grain et dans le générateur. Et enfin, les bilans calorifiques et les coefficients de performance de l'installation.

Le chapitre VI, expose les résultats d'optimisation du fonctionnement d'une machine tritherme, par la méthode "Thermodynamique en temps fini ", à contrainte de puissance.

Suite à quoi, il est procédé à la conclusion du présent travail et évoqué les perspectives futures en prolongement de celui-ci.

CHAPITRE I

SYNTHESE SUR LES SYSTEMES FRIGORIFIQUES

CHAPITRE I

SYNTHESE SUR LES SYSTEMES FRIGORIFIQUES

SOMMAIRE DU CHAPITRE

I.1- Introduction	12
I.2- Classification des systèmes frigorifiques	12
I.2.1- Classification par processus physico-chimique	12
I.2.1.1- Systèmes à changement d'état du frigorigène	12
I.2.1.2- Systèmes à gaz permanent	12
I.2.1.3- Systèmes à propriétés thermoélectriques	13
I.2.1.4- Systèmes à sorption de gaz ou de vapeur	13
I.2.2- Classification par source d'énergie absorbée	13
I.2.2.1- Systèmes frigorifiques consommant de l'énergie mécanique (ou électrique)	13
I.2.2.2- Systèmes frigorifiques consommant de l'énergie calorifique	14
I.3- Fonctionnement des systèmes à énergie calorifique	15
I.3.1- Les machines frigorifiques à compression de vapeur	16
I.3.2- Les machines frigorifiques à absorption	18
I.3.2.1- Systèmes à absorption humide	19
I.3.2.2- Systèmes à absorption sèche	21
I.3.2.3- Les avantages et inconvénients des systèmes frigorifiques à absorption	21
I.3.3- Machines frigorifiques à adsorption solide-gaz	21
I.3.3.1- Description sommaire de la machine	22
I.3.3.2- Description théorique du cycle intermittent	24
I.3.3.3- Bilan calorifique du cycle	26
I.3.4- Conclusion partielle	26

Nomenclature du chapitre I

COP_f :	coefficient de performance côté froid	
COP_c :	coefficient de performance côté chaud	
δm_r :	masse évaporée pour refroidir l'adsorbat de T_c à T_e par kilogramme d'adsorbant	[g/kg]
L_v :	chaleur latente d'évaporation du réfrigérant à T_e	[J/kg]
m_r :	masse de réfrigérant cyclé par kilogramme d'adsorbant	[g/kg]
MF :	machine frigorifique	
MT :	moteur thermique	
PAC :	pompe à chaleur	
P_c :	pression haute	[hPa]
P_f :	pression basse	[hPa]
Q_1 :	quantité de chaleur sensible fournie à la phase adsorbée par kilogramme d'adsorbant pour chauffer le fluide de T_a à T_g	[J/kg]
Q_A :	quantité de chaleur produite par le phénomène d'adsorption	[J/kg]
Q_d :	quantité de chaleur fournie pour désorber l'unité de masse de l'adsorbat	[J/kg]
Q_E :	quantité de chaleur apportée à l'évaporateur	[J/kg]
Q_f :	quantité de chaleur à la source froide	[J/kg]
Q_g :	quantité de chaleur apportée à la désorption au générateur	[J/kg]
Q_i :	quantité de chaleur à la source intermédiaire	[J/kg]
Q_s :	quantité de chaleur sensible de l'unité de masse de l'adsorbant, fournie entre T_a à T_g	[J/kg]
T_a :	température de fin d'adsorption	[K]
T_c :	température supérieure (ou de condensation)	[K]
T_e :	température d'évaporation	[K]
T_f :	température inférieure	[K]
T_g :	température de fin de désorption	[K]
T_i :	température intermédiaire	[K]
T_j :	température seuil	[K]
T_s :	température de saturation	[K]
W :	énergie mécanique	[W]

I.1- Introduction

Pour mieux détailler les caractéristiques des machines frigorifiques à adsorption, objet du présent travail de recherche, l'étude bibliographique suivante donne une synthèse des processus de production de froid et des systèmes frigorifiques couramment utilisés.

I.2- Classification des systèmes frigorifiques

La classification des systèmes frigorifiques est habituellement faite par type de source d'énergie absorbée, de processus physico-chimique intervenant dans le système ou par type d'utilisation.

I.2.1- Classification par processus physico-chimique

I.2.1.1- Systèmes à changement d'état du frigorigène

Les machines frigorifiques les plus utilisées sont celles qui font intervenir deux chaleurs latentes du changement de phase du frigorigène. La chaleur latente de vaporisation, chaleur endothermique permettant de produire l'effet utile frigorifique dans l'évaporateur, et la chaleur latente de condensation, exothermique, utilisée pour produire l'effet utile calorifique dans le condenseur d'une pompe à chaleur.

Dans une moindre mesure, des chaleurs de fusion et de sublimation de solides sont utilisées pour la production des effets utiles frigorifiques.

Exemples : chaleur latente de fusion de la glace et chaleur de sublimation de la neige carbonique.

I.2.1.2- Systèmes à gaz permanent

Les chaleurs d'échauffement et de refroidissement résultant respectivement de la compression et la détente d'un gaz sont utilisées dans un processus de production de froid.

Exemple : production d'azote ou d'air liquides dans un cycle de **STIRLING** inversé (machine **PHILIPS**)

I.2.1.3- Systèmes à propriétés thermoélectriques

Les puissances frigorifiques développées par ces systèmes sont modestes et leur utilisation est restreinte.

Exemple : modules à effet **PELTIER** [1].

I.2.1.4- Systèmes à sorption de gaz ou de vapeur

Ces systèmes sont à absorption (humide ou sèche) et à adsorption.

Les effets calorifiques mis en jeu sont les chaleurs exothermiques de sorption et les chaleurs endothermiques de désorption.

I.2.2- Classification par source d'énergie absorbée

I.2.2.1- Systèmes frigorifiques consommant de l'énergie mécanique (ou électrique)

Parmi ces systèmes, on trouve essentiellement les systèmes frigorifiques à compression de vapeur qui transfèrent de l'énergie calorifique d'un niveau de température inférieur T_f vers un niveau de température supérieur T_i . Ils sont donc au moins dithermes.

D'après le second principe de la thermodynamique, ils doivent nécessairement consommer de l'énergie pour effectuer cette opération.

Lorsque le système est ditherme, consommant une énergie mécanique, ou équivalente, W , en absorbant une quantité de chaleur Q_f dans la source froide à la température T_f et en cédant une quantité de chaleur Q_i au puits chaud à la température T_i , le coefficient de performance du système est, dans ce cas de :

1- Production du froid (machine frigorifique)

$$\text{COP}_F = \frac{|Q_F|}{|Q_I - Q_F|} \text{ et } (\text{COP}_F)_{\text{id}} = \frac{T_f}{T_i - T_f} \text{ dans le cas idéal, réversible} \quad (1)$$

2- Production de la chaleur (pompe à chaleur)

$$\text{COP}_C = \frac{|Q_I|}{|Q_I - Q_F|} \text{ et } (\text{COP}_C)_{\text{id}} = \frac{T_i}{T_i - T_f} \text{ dans le cas idéal, réversible} \quad (2)$$

Les coefficients de performance des systèmes réels les plus efficaces sont compris entre 50 et 70 % de ceux des systèmes idéaux fonctionnant entre les mêmes températures, ceci dans le domaine des températures usuelles.

I.2.2.2- Systèmes frigorifiques consommant de l'énergie calorifique

Le principe de fonctionnement de ces systèmes consiste à extraire ou fournir une quantité de chaleur en consommant de l'énergie calorifique. Ils sont constitués d'au moins trois sources de chaleur :

- * source froide, à la température T_f
- * source intermédiaire ou puits de rejet thermique à la température T_i
- * source fournissant de la chaleur " motrice " à la température T_c .

Parmi ces systèmes trithermes, on peut distinguer deux cas suivant le niveau de la température T_c :

$$\underline{\text{1}^{\text{er}} \text{ CAS}} \quad T_c > T_i > T_f \quad (3)$$

Le système en question (figure 1) absorbe de la chaleur motrice à la source de température T_i , et peut être, suivant l'utilisation, soit un système frigorifique (effet utile Q_f) ou une pompe à chaleur (effet utile Q_i).

Le coefficient de performance frigorifique, donné dans le cas réel par le rapport de la quantité de chaleur absorbée à la source froide à la quantité de chaleur motrice, est exprimé, pour un système idéal par :

$$(\text{COP}_F)_{\text{id}} = \frac{T_f}{T_c} \frac{T_c - T_i}{T_i - T_f} \quad (4)$$

Lorsque le système fonctionne en pompe à chaleur, le coefficient de performance calorifique réel donné par le rapport de la chaleur cédée au puits de chaleur de température T_i à la chaleur motrice à T_c est supérieur à l'unité. Dans le cas idéal, réversible :

$$(\text{COP}_C)_{\text{id}} = \frac{T_i}{T_c} \frac{T_c - T_f}{T_i - T_f} \quad (5)$$

$$\underline{\text{2}^{\text{ème}} \text{ CAS}} \quad T_i > T_c > T_f \quad (6)$$

Dans ces conditions, le système (figure 2) rejette nécessairement de la chaleur à la source de basse température T_f qui est alors un " puits froid ".

Par contre le système cède de la chaleur (effet utile Q_i) au puits thermique de température T_i .

Le système ne fonctionne donc qu'en pompe à chaleur, c'est un "thermotransformateur" dont le COP_C est inférieur à l'unité.

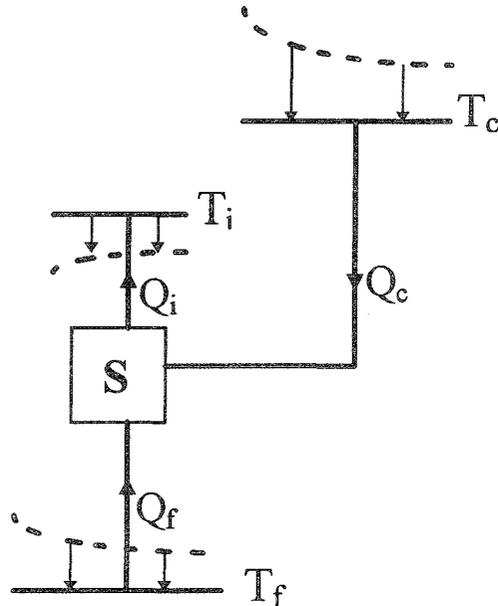


Figure 1 : Système tritherme $T_c > T_i > T_f$

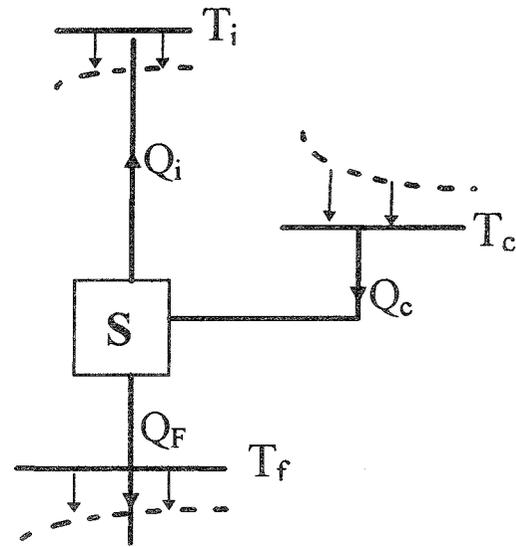


Figure 2 : Système tritherme $T_i > T_c > T_f$

I.3 - Fonctionnement des systèmes à énergie calorifique

Dans ce qui suit nous nous intéressons en particulier aux systèmes trithermes correspondant au premier cas le plus couramment rencontré ($T_c > T_i > T_f$).

Pour produire du froid ou d'une façon plus générale, déplacer de la chaleur dans le sens des températures croissantes en utilisant de la chaleur motrice, on peut mettre en oeuvre :

- des **systèmes dissociables**, composés d'un assemblage de moteur thermique entraînant un système mécanique de production de froid, généralement est une machine à compression.

C'est le cas de systèmes entraînés par des moteurs à vapeur (**Rankine**), ou à combustion (Stirling, Beau de Rochas) pour lesquels le 1^{er} cas est pratiquement toujours réalisé.

- des **systèmes intégrés**, donc à éléments non séparables :

- * systèmes frigorifiques à éjection
- * systèmes frigorifiques à absorption
- * systèmes frigorifiques à adsorption

La figure 3 représente schématiquement le système tritherme par un système dissociable composé d'un moteur thermique (MT) entraînant une machine frigorifique (MF) ou une pompe à chaleur (PAC) ; dans les deux cas ($T_c > T_i > T_f$) et ($T_i > T_c > T_f$) :

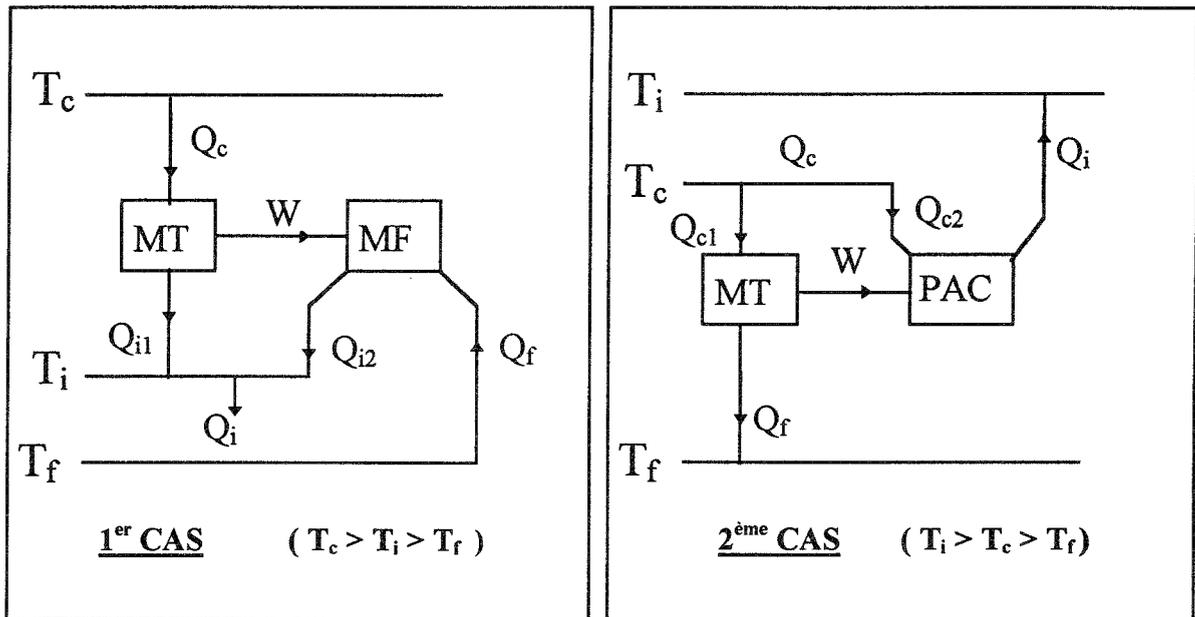


Figure 3 : Système dissociable tritherme

I.3.1- Les machines frigorifiques à compression de vapeur [2]

Elles font partie des systèmes dissociables de production de froid, donc composées d'éléments séparables : systèmes frigorifiques et moteurs thermiques d'entraînement.

L'avantage principal des machines à compression de vapeur réside dans l'utilisation de la chaleur latente de vaporisation d'un fluide. En effet celle-ci est généralement beaucoup plus importante que les chaleurs sensibles mises en jeu dans les machines à gaz permanent.

On rapporte ici une description simple du fonctionnement d'une machine à compression de vapeur mono-étagée.

Le cycle fondamental décrit par le fluide frigorigène est illustré par la figure 3.1-b.

Après le passage par le détendeur, la température du fluide baisse à cause de la chute de pression ; le mélange liquide-vapeur résultant est transféré dans l'évaporateur où l'évaporation produit l'effet utile à la température constante T_f de la source froide.

A la sortie de l'évaporateur, le gaz est aspiré par le compresseur et comprimé de la pression basse P_f à la haute pression P_c , conduisant à une élévation de la température du fluide de T_f à T_1 .

La transformation suivante correspond à un refroidissement isobare puis à la condensation du fluide dans le condenseur (transformation 1 - 3). Le liquide produit est récupéré alors dans une bouteille accumulatrice où le cycle reprend.

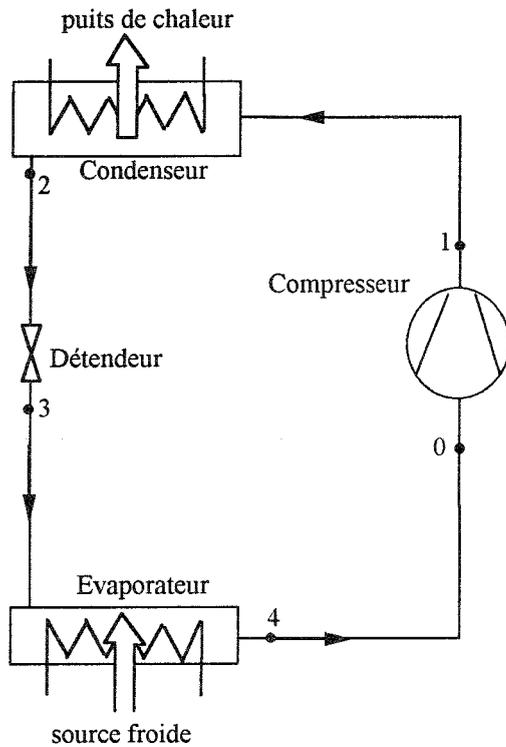


Figure 3.1-a : Schéma d'une machine frigorifique à compression de vapeur

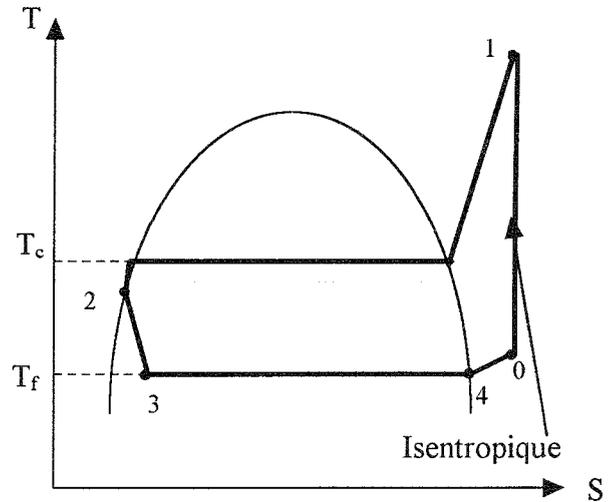


Figure 3.1-b : Cycle de fonctionnement dans le diagramme (T,S)

La caractérisation de ces machines suppose une bonne connaissance des propriétés des fluides cyclés. Les principaux fluides simples travaillent dans un domaine de température variant entre -45°C et 60°C , avec un rapport de pressions (P_f/P_c) faible pour faciliter la compression [3].

L'effet frigorifique spécifique massique q_f , qui correspond à la quantité de chaleur prélevée à la source froide par unité de masse du fluide frigorigène cyclé, est la différence d'enthalpie spécifique entre la sortie et l'entrée de l'évaporateur (figure 3.1- a).

Remarque : Les machines à compression de vapeur occupent actuellement un créneau important dans le domaine des applications domestiques (Pompe à chaleur et machine à froid) et dans le domaine industriels.

Cependant, ces machines nécessitent l'utilisation d'une énergie motrice noble et posent des problèmes d'altération de la couche d'ozone due aux frigorigènes CFC et HCFC) [4].

Dans ce qui suit, nous nous intéressons à l'analyse de fonctionnement des systèmes intégrés ; particulièrement les machines à sorption.

I.3.2- Les machines frigorifique à absorption

Ils utilisent les propriétés d'affinité chimique des molécules d'un frigorigène plus volatile (sorbit) et d'un liquide ou solide (sorbant).

Selon la nature liquide ou solide du sorbant, on distingue deux variantes de machines à froid à absorption :

- machine frigorifique à absorption humide,
- machine frigorifique à absorption sèche.

L'absorption, est un phénomène volumique intéressant la totalité de la masse de l'absorbant. L'absorbant liquide est en général un corps pur qui forme, par absorption de frigorigène, un mélange binaire zéotrope.

On donne quelques exemples de couples utilisés (tableau n° I), l'exemple le plus courant est le couple H₂O-LiBr et le plus ancien est le couple NH₃-H₂O. Ces couples sont les mieux connus et les plus étudiés [5] [6].

Tableau I couples utilisés pour les systèmes à absorption

Frigorigène	Absorbants
Ammoniac NH ₃	Eau
Méthylamine	Eau
R22	Diméthyléther du tétraéthylène glycol
Eau	LiBr (Bromure de Lithium)
Méthanol	LiBr

I.3.2.1 Systèmes à absorption humide

Le cycle à absorption se rattache aux cycles trithermes (Figure 3.2-b) avec une faible consommation de l'énergie mécanique par rapport aux apports thermiques.

Dans un cycle continu de machine à absorption (Figure 3.2-a), l'absorbeur et le bouilleur sont séparés (dans un cycle intermittent les deux fonctions sont réalisées par un seul élément) et la solution circule en phase liquide de façon continue de l'absorbeur au bouilleur.

Dans une partie du circuit, entre le condenseur et l'évaporateur (points 6-7-8-1), circule le frigorigène à l'état pur, alors que dans l'autre partie du circuit circulent deux solutions de compositions différentes, une riche en frigorigène, entre l'absorbeur et le bouilleur (points 2-3) et une pauvre en frigorigène, entre le bouilleur et l'absorbeur (points 4-5).

Le système comprend donc un côté haute pression (bouilleur-condenseur), un côté basse pression (évaporateur-absorbeur) et une pompe de circulation pour déplacer la solution de l'absorbeur (basse pression) au bouilleur (haute pression).

Au cours du cycle (figure 3.2-a) les vapeurs à basse pression issues de l'évaporateur (1) sont absorbées dans l'absorbeur par une solution à faible concentration en frigorigène (5), l'affinité des deux corps permet la dissolution des vapeurs dans la solution.

La solution saturé de l'absorbeur (2) est transférée par la pompe au bouilleur (3) à haute pression ; le frigorigène se sépare par vaporisation de la phase liquide avec un apport de chaleur. Comme seul le frigorigène doit parcourir le circuit frigorifique, une rectification s'impose dès lors que la pression de vapeur de l'adsorbant n'est plus négligeable devant celle du frigorigène.

Ces vapeurs une fois rectifiées (6) se condensent à haute pression et cèdent leur chaleur. Le condensat (7) se détend par l'intermédiaire d'une vanne de laminage jusqu'à la basse pression (8) qui règne dans l'évaporateur.

Dans l'évaporateur, le frigorigène à basse température, absorbe la chaleur au milieu ambiant que l'on veut refroidir, ensuite il s'évapore et produit du froid.

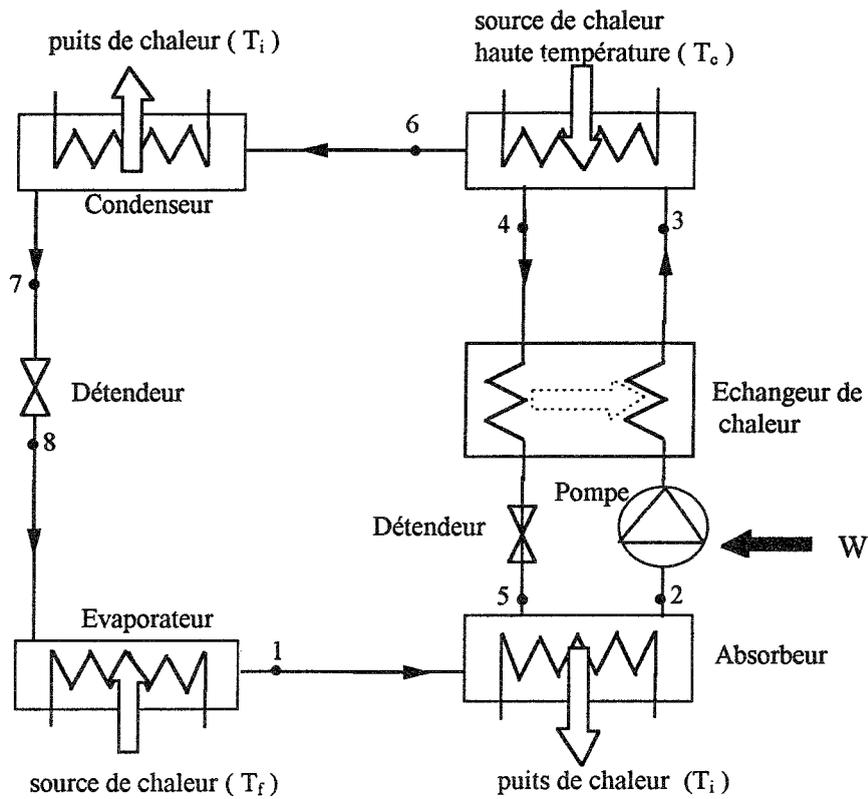


Figure 3.2- a : Schéma d'une machine frigorifique à absorption humide

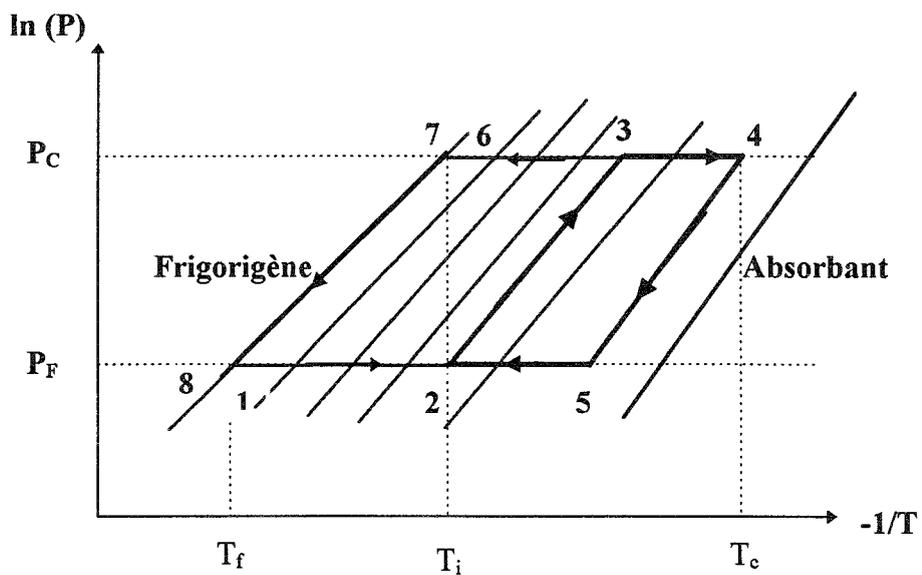


Figure 3.2- b : Cycle de fonctionnement dans le diagramme de Oldham ($\ln P, -1/T$)

I.3.2.2- Systèmes à absorption sèche

Les systèmes à absorption sèche présentent une structure très similaire à celle des systèmes à absorption humide, l'absorbant ici est un solide consolidé ou non, mais la réaction de sorption est toujours de nature chimique.

Les sorbants les plus utilisés sont le chlorure de calcium (CaCl_2), le chlorure de magnésium (MnCl_2) et le chlorure de strontium (SrCl_2) [5], les absorbats les plus courants sont des gaz d'ammoniac (NH_3 , CH_3NH_2 , ...) [5] [7].

Ce type d'absorption se prête aussi bien aux cycles continus que discontinus.

Comparée à l'absorption humide, l'absorption sèche ne nécessite pas de rectification puisque les absorbats ont une faible tension de vapeur dans les conditions de fonctionnement adéquat du bouilleur.

Les systèmes à absorption sèche connaissent quelques utilisations en réfrigération, mais plus particulièrement en climatisation et en stockage d'énergie calorifique à basse température [8]. Leur principal défaut provient d'une limitation en température de la source chaude pour éviter la cristallisation de l'absorbant, dommageable au bon fonctionnement des systèmes.

I.3.2.3- Les avantages et inconvénients des systèmes frigorifiques à absorption

On cite quelques avantages et inconvénients des systèmes à absorption comparés aux systèmes à compression dans le tableau suivant (Tableau II):

Tableau II : comparaison des systèmes à compression et à absorption

<u>Systèmes à compression</u>	<u>Systèmes à absorption</u>
<p style="text-align: center;"><u>Avantages</u></p> <ul style="list-style-type: none"> * très bon coefficient de performance * simplicité du cycle et de machine * bonne sécurité d'emploi, mais avec les frigorigènes actuels qui sont mis en accusation * variation de puissance frigorifique facile à mettre en oeuvre 	<p style="text-align: center;"><u>Avantages</u></p> <ul style="list-style-type: none"> * consomme essentiellement de l'énergie calorifique qui peut être récupérée d'un autre système * ne nécessite que peu de machines tournantes * peu de maintenance et grande longévité du matériel
<p style="text-align: center;"><u>Inconvénients</u></p> <ul style="list-style-type: none"> * l'énergie consommée par ces systèmes est coûteuse * utilisation d'une machine tournante entraînant des bruits et maintenance fréquente * problèmes posés par certains frigorigènes, polluants, dont la production est bannie par le protocole de Montréal. 	<p style="text-align: center;"><u>Inconvénients</u></p> <ul style="list-style-type: none"> * coefficients de performance modestes * une grande puissance thermique est à évacuer vers l'extérieur * étanchéité de la machine pour éviter l'intrusion de gaz incondensables * problème de cristallisation des absorbants

I .3.3- Machines frigorifiques à adsorption solide-gaz

Les solides pulvérulents ou poreux ont la propriété de retenir, à leur surface, les molécules des phases gazeuse ou liquide en contact avec eux ; ce phénomène physico-chimique est appelé adsorption. Le solide est dit adsorbant et le gaz ou le liquide adsorbat.

L'adsorption est un phénomène très général ; elle se produit avec plus ou moins d'intensité sur à peu près toutes les surfaces séparant deux milieux différents, les adsorbants peuvent être solides ou liquides, et les adsorbats gazeux, liquides, en solution ou même en suspension.

I .3.3.1- Description sommaire de la machine

Les machines à adsorption font intervenir essentiellement un phénomène d'adsorption physique par lequel un solide fixe les molécules d'un gaz sur sa surface sous l'action d'un champ de forces de liaisons de VAN DER WAALS.

L'adsorption est un phénomène de surface, où le gaz peut recouvrir les surfaces inter et intraparticulaire du solide poreux.

Le système à adsorption peut être assimilé à celui à absorption avec cependant deux caractères spécifiques :

L'adsorbant est un solide poreux, et le cycle peut être intermittent ou semi-continu.

Le schéma représentatif et le cycle thermodynamique de fonctionnement du système sont présentés sur les figures (3.3-a et 3.3-b).

Le fonctionnement d'une machine frigorifique à adsorption se décompose en deux phases :

- phase de régénération - condensation.
- phase d'adsorption - évaporation.

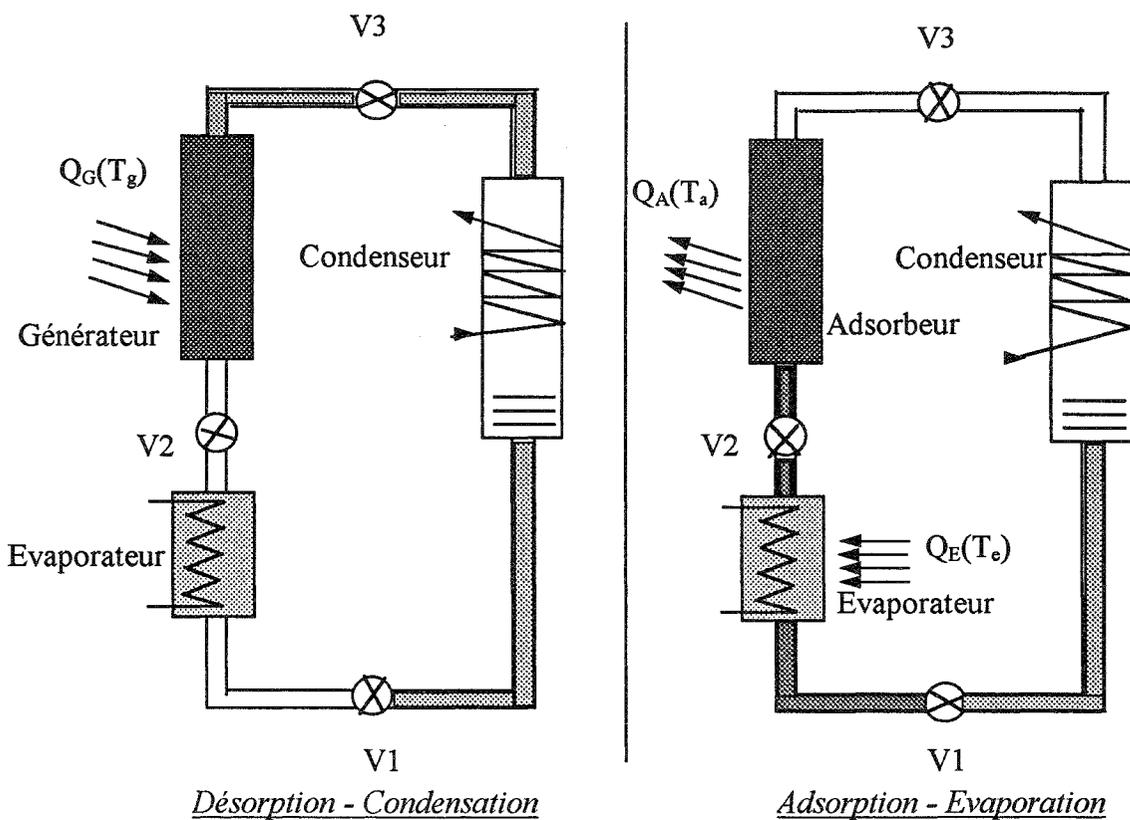


Figure 3.3 - a

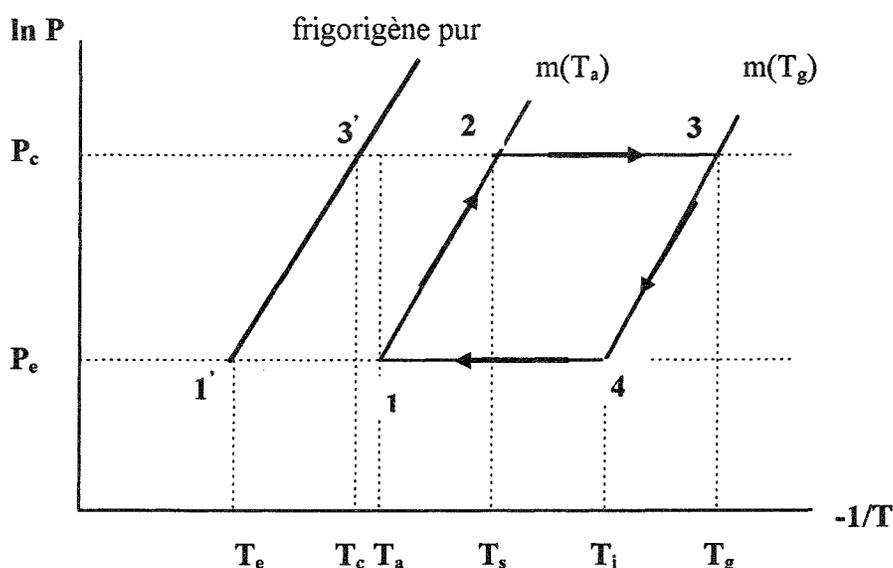


Figure 3.3-b

Le système fonctionne en régime transitoire et se compose :

- d'un générateur- adsorbant dans lequel est placé l'adsorbant.
- d'un condenseur où se produit la condensation de la vapeur provenant du générateur.
- d'un échangeur, qui permet la récupération par un fluide caloporteur des calories mises en jeu au cours de la condensation, et d'un évaporateur.

Pendant la première phase du cycle, le générateur G contenant le couple d'adsorbant et d'adsorbat est chauffé jusqu'à une température limite de désorption T_g . L'adsorbat s'évapore et se condense dans le condenseur C à la température T_c correspondant à la pression de saturation de l'adsorbat.

Dans la seconde phase du cycle, l'adsorbat est mis en communication avec l'évaporateur E et l'adsorbant A, maintenu à une température T_a . Une évaporation partielle de l'adsorbant abaisse la température de celui-ci de T_c à T_e , puis l'évaporation se poursuit sous l'effet conjugué de la chaleur extraite à l'évaporateur et de l'adsorption des vapeurs par l'adsorbant.

I.3.3.2- Description théorique du cycle intermittent :

Nous avons quatre transformations différentes au cours desquelles le couple s'échauffe (1-2 et 2-3), puis se refroidit (3-4 et 4-1). Pendant toutes les transformations, le générateur est couplé thermiquement avec l'extérieur.

Transformation 1-2 : chauffage isostérique

Le cycle de fonctionnement débute au point 1 où l'adsorbant est supposé saturé de sorbat.

Le générateur est soumis à un flux de chaleur fournit par la source chaude ; le couple subit alors une transformation isostérique représentée par 1-2. Les vannes V_1 , V_2 et V_3 sont fermées.

Le point de départ 1 est déterminé par la température de fin d'adsorption T_a et par la basse pression du cycle P_e .

La pression dans le générateur augmente jusqu'à sa plus haute valeur P_c .

Au point 2, la température seuil T_s est atteinte et la condensation commence.

Transformation 2-3 :

Le chauffage du générateur et la désorption des vapeurs continuent, ce qui permet la condensation. Cette condensation entraîne la diminution du taux de remplissage de l'adsorbant, la vanne V_3 étant ouverte.

Le chauffage est arrêté lorsque le charbon actif atteint la température maximale T_{max} .

La phase de désorption-condensation se termine au point 3. Celui-ci étant un point d'équilibre déterminé par T_{max} et par la pression P_c du condenseur.

Transformation 3-4 : refroidissement isostérique

Une fois le chauffage arrêté, la vanne de communication entre le générateur et le condenseur, V_3 , est fermée, le refroidissement du générateur avec charbon actif commence.

Ce refroidissement peut se faire par air, comme dans notre cas où les essais ont été menés par convection naturelle et par écoulement pulsé.

La pression dans le générateur diminue sous l'effet du refroidissement isostérique jusqu'à sa valeur P_e , égale à celle de l'évaporateur.

Transformation 4-1 :

Le générateur continue d'être refroidi, les vannes V_1 et V_2 sont ouvertes, une évaporation partielle de la vapeur abaisse sa température de T_c à T_e , puis l'évaporation se poursuit sous les effets conjugués de la chaleur prélevée dans l'évaporateur et de l'adsorption des vapeurs dans le générateur.

La phase d'adsorption-évaporation se termine à l'équilibre au point 1, déterminé par T_a et P_e .

I .3.3.3- Bilan calorifique du cycle

Le bilan calorifique du cycle s'écrit :

$$Q_A + Q_C = Q_E + Q_G \quad (7)$$

$$\text{où } Q_E = [m_r - \delta m_r] L_v \quad (8)$$

$$\text{et } Q_G = Q_d + Q_s + Q_l \quad (9)$$

Le coefficient de performance intrinsèque du système est donné par la relation :

$$\text{COP}_{\text{in}} = \frac{Q_E}{Q_G} = \frac{(m_r - \delta m_r) \cdot L_v}{Q_d + Q_s + Q_l} \quad (10)$$

Avec m_r : masse du réfrigérant cyclé par kilogramme d'adsorbant.

δm_r : masse évaporée pour refroidir l'adsorbant de T_c à T_e par kg d'adsorbant.

L_v : chaleur latente de vaporisation à T_e .

Q_d : quantité de chaleur fournie pour désorber l'unité de masse de l'adsorbant, de T_a à T_g .

Q_s : quantité de chaleur sensible de l'unité de masse de l'adsorbant, fournie entre T_a et T_g .

Q_l : quantité de chaleur sensible fournie à la phase adsorbée par kilogramme d'adsorbant, pour chauffer le fluide de T_a à T_g .

Q_A : quantité de chaleur échangée dans l'adsorbeur

Q_C : quantité de chaleur échangée dans le condenseur

Q_E : quantité de chaleur échangée dans l'évaporateur

Q_G : quantité de chaleur échangée dans le générateur

I .3.4- Conclusion partielle

Les systèmes frigorifiques à adsorption, particulièrement à cycle intermittent, objet de notre étude, présentent des avantages et des inconvénients par rapport aux systèmes à absorption.

Parmi les avantages, on cite :

- pas de problème de cristallisation des sorbants,
- pas de colonne de rectification,
- simplicité technologique des installations,

- consommation très faible, sinon inexistante, d'énergie noble mécanique ou électrique.
- Les réfrigérants des systèmes à adsorption peuvent atteindre des températures inférieures à 0 °C, alors que les systèmes à absorption humide n'atteignent pas le zéro degré Celcius.

Parmi les inconvénients actuels des systèmes à adsorption, on peut citer :

- le caractère discontinu de la production frigorifique, surtout pour le fonctionnement intermittent. Les systèmes à plusieurs générateurs lèvent en partie cette restriction.
- Faibles coefficients de performance, de l'ordre de 0,5 à 0,8 pour les systèmes intermittents actuels.

Références

- [1] : **A.HADNI**, " Thermodynamique et propriétés de la matière ", Tome 1, S.F.D.E.S., pp.219, Paris (1968).
- [2] : **P.J.RAPIN**, " Installations frigorifiques ", Tomes 1 & 2, P.V.C. Edition, Paris (1975).
- [3] : **M.FEIDT**, " Thermodynamique et optimisation énergétique des systèmes et procédés " Lavoisier (1987).
- [4] : **F.MEUNIER**, " La sorption solide : une alternative au CFCs ", I.I.F-I.I.R, commission B1, pp.56-64, Paris (1992).
- [5] : **J.FLECHON**, **F.MACHIZAUD**, " Réfrigération solaire par simulation en absorption sèche", Revue Phys.Appl., 15, pp.909-918, 1980.
- [6] : **P.LE GOFF**, " Energétique industrielle ", Technique et documentation, 1, Paris 1979.
- [7] : **B.SPINNER**, " Les transformateurs thermochimiques à ammoniac ", I.I.F-I.I.R.-commission B1. Pp.163-170. Paris (1992).
- [8] : **S.ELBERG**, **F.MATHONNET**, Revue Phys.Appl., 17, pp.585 (1982).

CHAPITRE II

MODELISATION THERMODYNAMIQUE DE LA

SORPTION

CHAPITRE II

MODÉLISATION THERMODYNAMIQUE DE LA SORPTION

SOMMAIRE DU CHAPITRE

II.1- Physique de l'adsorption	30
II.1.1- Adsorption	30
II.1.2- Adsorbants	31
II.1.3- Les charbons actifs	32
II.1.4- Les couples solides-gaz utilisés	33
II.1.4.1- Critère de choix du couple	33
II.1.4.2- Exemples de couples utilisés	35
II.2- Thermodynamique de l'adsorption	37
II.2.1- Introduction	37
II.2.2- Modèles cinétiques	38
II.2.2.1- Isotherme de LANGMUIR	38
II.2.2.2- Isotherme de BRUNAUER, EMMET et TELLER (B.E.T)	39
II.2.3- Modèle phénoménologique	40
II.2.3.1- Théorie du potentiel d'adsorption de POLANYI	40
II.2.3.2- Equation de DUBININ et RADUSHKEVICH (D-R)	42
II.2.3.3- Equation de DUBININ et ASTAKHOV (D-A)	43
II.3- Expression de la masse adsorbée	43
II.4- Chaleur isostérique de sorption	45
II.5- Données thermophysiques des couples utilisés	46
II.5.1- Caractéristiques de l'adsorbant	46
II.5.2- Caractéristiques de l'adsorbat	48

Nomenclature du chapitre

A_i	surface équipotentielle	$[m^2]$
C_B	constante de B.E.T	
C_p	chaleur spécifique	$[J.kg^{-1}K^{-1}]$
D	coefficient de l'équation de D-R	
D_e	diffusivité effective	$[m^2/s]$
E_0	énergie d'activation	$[J.kg^{-1}]$
H	enthalpie	$[J.kg^{-1}]$
k	constante d'équilibre d'adsorption	
L	chaleur latente de vaporisation	$[J.kg^{-1}]$
m	quantité d'adsorbat	$[g/kg]$
P	pression	$[hPa]$
q	quantité adsorbée ou désorbée	$[g/kg]$
q_{is}	chaleur isostérique de sorption	$[J/kg]$
r_{eff}	rayon effectif de diffusion dans les micropores	$[m]$
S	surface d'échange	$[m^2]$
T	température	$[K]$
V	volume	$[m^3]$
w	volume adsorbable	$[m^3/kg]$

Symboles

Å	angström	
α	coefficient de dilatation volumique	$[K^{-1}]$
β^2	coefficient d'affinité	
λ	conductivité thermique apparente	$[W.m^{-1}.K^{-1}]$
\mathcal{R}	constante des gaz parfaits	$[J.mole^{-1}.K^{-1}]$
θ	taux de recouvrement	
ε	potentiel d'adsorption, porosité	
μ	potentiel chimique	

Indices et exposants

a	adsorbé
l	liquide
p	apparente
s	solide, saturation
v	vapeur
0	maximale
*	phase adsorbée
∞	diffusivité corrigée

II .1- Physique de l'adsorption

Introduction

Dans ce paragraphe, nous donnons un résumé très bref des principes fondamentaux du phénomène d'adsorption.

L'adsorption est un phénomène physique qui se produit lors d'un contact de gaz ou de vapeur avec des matériaux solides et particulièrement les solides poreux. Ce phénomène est utilisé dans des systèmes de production frigorifique ou calorifique.

Les adsorbants les plus courants sont obtenus soit par synthèse (Zéolithe 13X par exemple), soit à partir de matériaux de base après un traitement physique et chimique en vue de leur conférer des propriétés d'adsorption. C'est le cas du charbon actif AC35/3 utilisé dans nos expériences rapportées ci-après.

II .1.1- Adsorption

L'adsorption est l'attraction et la rétention en surface qu'exerce un solide ou un liquide sur un gaz avec lequel elle est en contact.

L'adsorption gaz / solide correspond à une variation discontinue de la concentration de la phase gazeuse au voisinage de la phase solide. Il se forme une pellicule d'adsorbat d'épaisseur variable, mais toujours très petite, de l'ordre de quelques dizaines d'Angströms. Les molécules adsorbées pénètrent parfois les micropores et les défauts cristallins de l'adsorbant.

Du point de vue thermodynamique, l'adsorption est une transformation avec changement d'état d'une phase gazeuse en une phase adsorbée.

Cette transformation s'effectue à pression et température constantes, et elle est généralement caractérisée par une diminution de l'énergie libre et de l'entropie du système. celle-ci étant réversible, elle s'accompagne d'une diminution de l'enthalpie : le processus est donc exothermique.

L'adsorption s'accompagnera donc presque toujours d'un dégagement de chaleur appelé chaleur d'adsorption. La grandeur variable de cette quantité de chaleur est l'un des critères

permettant de penser qu'il existe au moins deux types fondamentalement différents d'adsorption [1]. Le premier est physique et est caractérisé par sa faible énergie (21 à 42 kJ/mole) et par sa plus ou moins parfaite réversibilité; le second type est chimique et est caractérisé par sa très forte énergie de liaison irréversible.

II.1.2- Adsorbants

Les adsorbants sont des matériaux poreux dont les tailles de pores varient de quelques angströms à quelques centaines d'angströms. Les adsorbants couramment utilisés sont le gel de silice, l'alumine activée, les charbons actifs ainsi que les adsorbants à tamis moléculaire comme les zéolithes.

La caractéristique la plus importante de ces adsorbants est leur grande capacité d'adsorption due à des surfaces spécifiques élevées.

La structure microporeuse d'un adsorbant peut être décrite par plusieurs paramètres physiques, dont, en particulier, la distribution volumique des pores (figure II.1-1) et la surface spécifique [2].

Nous ne nous intéresserons dans cette étude qu'au charbon actif AC35/3.

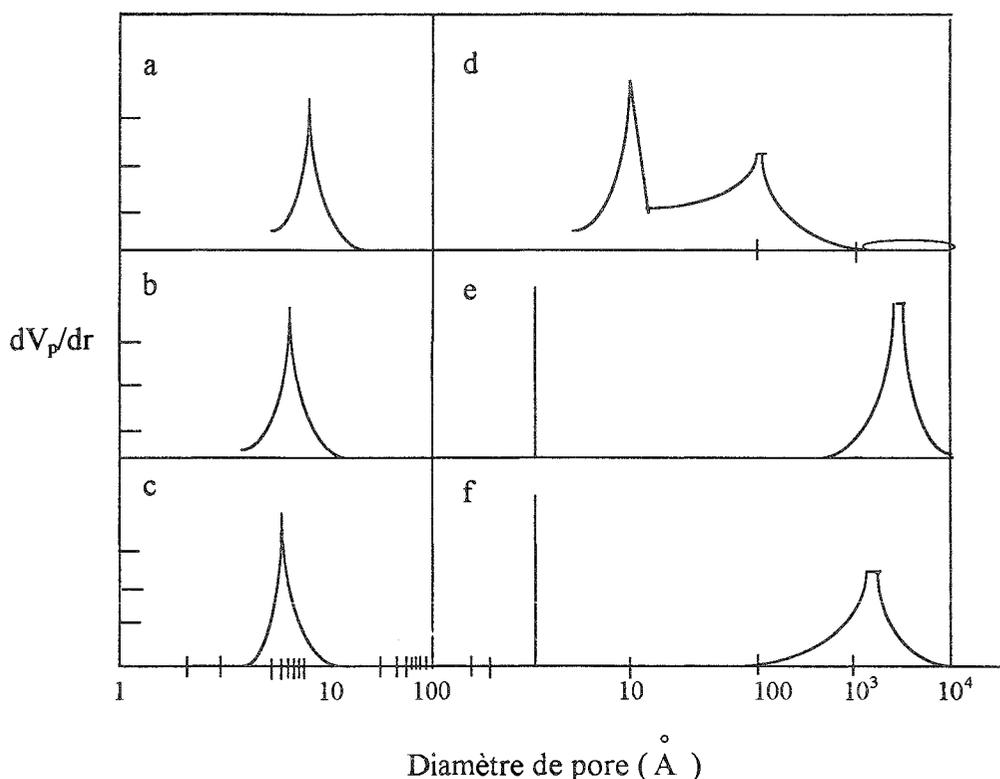


Figure II 1-1 : Distribution volumique des pores a) gel de silice; b) alumine activée
c) charbon de type tamis moléculaire; d) charbon actif; e) Zéolithe 5A (type 625)
f) Zéolithe 5A (type 525). Source Ruthven [3]

II.1.3- Les charbons actifs

Les charbons actifs sont des carbones que l'on a préparés afin d'accroître leur pouvoir adsorbant. Ils sont fabriqués à partir de matières premières telles que le bois, la houille, le charbon, les polymères, etc... ; ces derniers subissent, après un traitement initial, des processus

- d'agglomération,
- de carbonisation à basse température (400-500 °C) ayant pour but élimination des produits volatils afin de ne conserver, outre les matières minérales, qu'un squelette carboné,
- d'activation proprement dite à haute température (800-1000 °C) pour développer la porosité et la surface du substrat carboné.

Le processus d'activation s'effectue avec de la vapeur d'eau ou d'autres gaz choisis de manière à ce que l'oxydation de la matière carbonée soit suffisante pour extraire les impuretés et les hydrocarbures qui obstruent les pores.

Des solutions acides (acide sulfurique, acide nitrique, etc...) sont ensuite utilisées pour dissoudre les déchets qui résultent de l'oxydation.

Les textures poreuses des charbons actifs sont généralement fort mal connues. Certains auteurs proposent une classification dans laquelle on distingue les micropores, les pores de transition (ou mésopores) et les macropores [4].

Les micropores ont des dimensions inférieures à quelques dizaines d'Angström ($d < 20 \text{ \AA}$), les macropores ont des dimensions supérieures à 500 \AA , et les mésopores ont des dimensions de l'ordre de plusieurs centaines d'Angströms ($20 \text{ \AA} < d < 500 \text{ \AA}$) (figure II 1-2).

Les charbons actifs sont également caractérisés par une très grande surface spécifique (entre 300 et $1500 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$), la plus grande parmi tous les adsorbants. Cette grande surface donne directement une grande capacité d'adsorption, notamment pour des adsorbats non-polaires ou légèrement polaires.

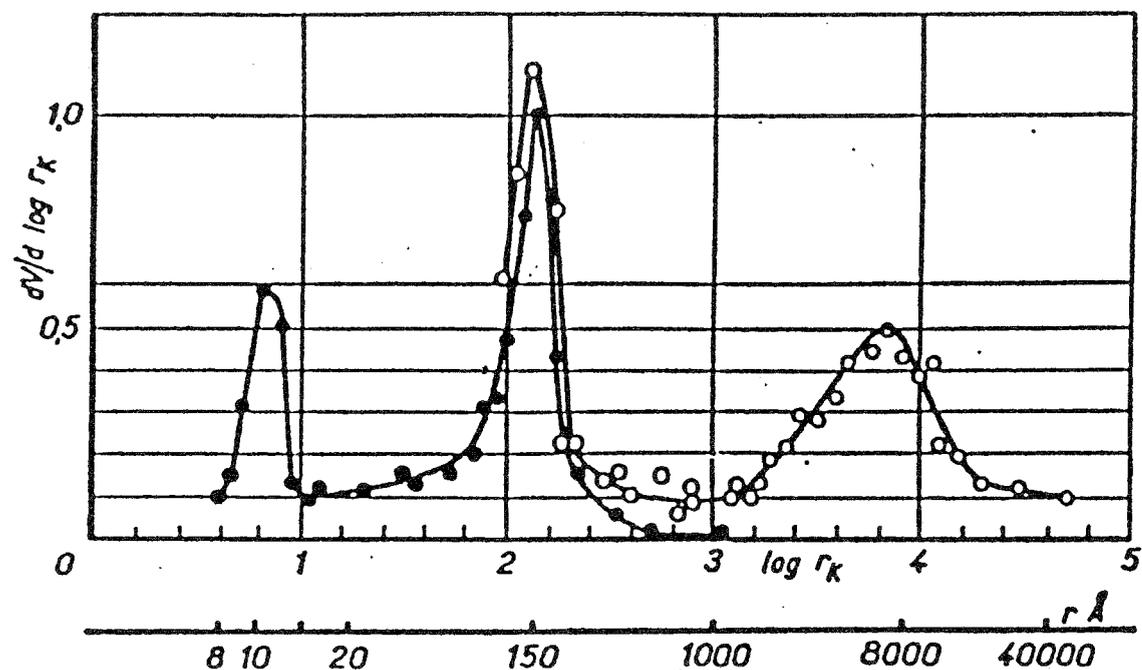


Figure II 1-2 : Courbe différentielle de distribution du volume des pores en fonction de leur rayon pour un charbon actif [4]
($V / \text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$, r et $r_k / \text{Å}$)

II.1.4- Les couples solides-gaz utilisés

Le choix du couple adsorbant-adsorbé est très important. Il se fait en fonction des niveaux de température de l'utilisation frigorifique envisagée (réfrigération, conservation des aliments, climatisation, pompe à chaleur ou stockage d'énergie).

Pour une application donnée, le choix du couple solide-gaz repose essentiellement sur le cycle thermodynamique de fonctionnement du système.

II.1.4.1- Critères de choix du couple

Les critères de choix d'un couple solide-gaz sont les suivants :

a) Choix du solide adsorbant

Les adsorbants sont souvent choisis en fonction de leurs capacités d'adsorption et leur fortes conductivités thermiques. La capacité d'adsorption doit être plus élevée à la basse température et à la pression d'équilibre dans l'évaporateur. A contrario, elle doit être faible à la température élevée du cycle associée à la pression d'équilibre dans le condenseur.

Comme l'adsorption est un phénomène surfacique, le choix se porte sur l'adsorbant microporeux de plus grande surface spécifique (charbons actifs, zéolithes, gel de silice et alumines activées).

b) Choix du fluide frigorigène

Le choix de l'adsorbat est fait de sorte qu'il doit :

- avoir une forte chaleur latente de vaporisation ,
- être facilement adsorbable à basse température et plus difficilement adsorbable à haute température,

- Les adsorbants couramment utilisés dans les systèmes à adsorption peuvent être classés par ordre décroissant de la chaleur latente de vaporisation. Il s'agit de l'eau, l'ammoniac et les alcools primaires (méthanol, éthanol).

c) Choix thermodynamique

Ce choix doit prendre en considération :

- Les températures d'ébullition et de condensation du frigorigène qui doivent être voisines des températures externes du cycle de fonctionnement de la machine correspondant respectivement à la haute et à la basse pression du système.

- La température critique du frigorigène qui doit être la plus élevée possible.

- La chaleur isostérique de désorption, qui est la quantité d'énergie nécessaire pour rompre les liaisons réversible entre les molécules d'adsorbat (frigorigène) et la surface de l'adsorbant, qui doit être la plus faible possible.

- L'adsorbant qui doit avoir une chaleur spécifique massique la moins élevée possible

- Le fluide frigorigène qui doit avoir une tension superficielle et une viscosité les moins élevées possible.

d) Choix technique et de sécurité

Pour une meilleur fiabilité du système, le choix technique doit prendre en considération:

- la stabilité chimique du couple surtout à haute température de fonctionnement.

- la corrosion qui peut être due à la réactivité du couple avec les matériaux des composants et de canalisations de la machine.

- la solidification du frigorigène à basse température.

- la toxicité des fluides et l'inflammabilité des matériaux utilisés.

Ces deux derniers critères sont, entre autres, les causes de vieillissement du couple et le facteur déterminant de la durée de vie du système.

e) Choix de sécurité

Dans le choix de sécurité, deux paramètres fondamentaux sont à respecter :

- la toxicologie de chacun des éléments du couple (contrainte écologique),
- l'inflammabilité des éléments de la machine.

II .1.4.2- Exemples de couples utilisés

On présente une synthèse (Tableau I) des couples utilisés dans quelques réalisations de machines frigorifiques à adsorption solide [5].

Ce tableau montre que les études les plus avancées concernent les charbons actifs-méthanol et les zéolithes-eau. Il ne faut pas non plus oublier de mentionner les études faites sur les couples zéolithe-ammoniac, charbon actif-ammoniac et sur le gel de silice-eau.

Par la suite, notre étude s'intéressera uniquement au couple charbon actif-méthanol.

Tableau I : Synthèse des couples étudiés

	Méthanol	Ethanol	Ammoniac	Eau	CH ₃ NH ₂
AC35/1.8	BOUSSEHAIN[2] CHAHD[6]	CHAHD[6]	CRITOPH[7]		
AC35/3	CRITOPH[7] BOUSSEHAIN[2] CHAHD[6]	CHAHD[6]			
AC40/3	BOUSSEHAIN[2]	BOUSSEHAIN[2]			
NORIT RI EXTRA	CRITOPH [7] PASSOS[8] BOUSSEHAIN[2]	BOUSSEHAIN[2]			
PICASOLV	BOUSSEHAIN[2]	BOUSSEHAIN[2]			
AC35	CRITOPH[7] BOUBAKRI [9] PASSOS [8] DELGADO [10]	CRITOPH[7]		CRITOPH[7]	
ZÉOLITHE 13X	AITTOMAKI [11] HERMANN [12] DELGADO [10] CHAHD [6] SIMONOGRANGE [13]	YAN [14] [15] LI X [16]	CRITOPH[7]	YAN [14] [15] LI X [16] SIMONOGRANGE [13] BOUGARD [17] GUILLEMINOT [18][26] DUPONT [19] GERNIER [20] MEUNIER [21] RONALD[22] ADELL [23]	

				ABDALLAH [24] TCHERNEV [25] CHAHID[6]	
ZÉOLITHE 5A	AITTOMAKI[11]	YAN [14] [15] LI X [16]		YAN [14] [15] LI X [16]	
ZÉOLITHE NAY		YAN [14] [15] LI X [16]		YAN [14] [15] LI X [16]	
ZÉOLITHE 4A	AITTOMAKI[26]			RONALD[22]	
CHARBON ACTIF	MEUNIER[27] PONS [28] BOUGARD[17]		BOUGARD[17] [30]		CRITOPH[31] [32]
CHARBON ACTIF LH, DEG ET PKST	PASSOS [33];[8] CRITOPH [7]				
CHARBON ACTIF BPL	PASSOS [8] CRITOPH [7]		CRITOPH [7]		
CARBON 203C, 207C ET 208C	CRITOPH [34]		CRITOPH [34]		
CARBON 207E	CRITOPH [6] GUILLEMINOT [18]				
CARBON 205C			CRITOPH [34]		
CARBON SCZ			CRITOPH [7]		
SILICA-GEL				SAKODA [35] RONALD [22]	BALAT [36]
CACL₂			WARSOE-SCHMIDT [37] FLECHON[38]		
LICL					BALAT [36]

II.2 - Thermodynamique de l'adsorption

II.2.1 - Introduction

L'état thermodynamique d'un couple adsorbant-adsorbé est caractérisé par une relation divariante entre trois grandeurs : masse, pression et température (m , P et T).

La détermination de la forme de cette relation est relatée dans la littérature traitant de la thermodynamique de l'adsorption.

A l'équilibre (d'adsorption), la relation divariante peut s'exprimer par :

* l'isotherme d'adsorption (m, P)_T

* l'isobare d'adsorption (m, T)_P

* l'isostère d'adsorption (P, T)_m

De façon pratique, pour l'étude des systèmes frigorifiques à adsorption, on utilise les isothermes d'adsorption, qui représentent, en fonction de la pression de vapeur, la quantité de gaz adsorbée par kilogramme d'adsorbant à température donnée : $m = f(p)_{T, \text{ couple}}$.

Les isothermes d'adsorption présentés ont des formes variables et peuvent être regroupés en cinq types [2], présentés dans la figure (2-1).

On constate que la quantité de gaz adsorbée diminue lorsque la température augmente; par contre cette quantité augmente avec la pression.

Type I : Isotherme de Langmuir qui représente les cas d'adsorption monomoléculaire (monocouche).

Type II : Isotherme en S qui représente le cas de l'adsorption monocouche aux faibles pressions relatives, suivi de la formation de multicouche et ensuite d'une condensation capillaire pour des pressions partielles avoisinant la pression de saturation.

Type III : Ce type représente le phénomène d'adsorption dans lequel l'attraction entre l'adsorbant et les molécules adsorbées est faible mais suffisante pour accroître la tendance des molécules à s'agréger sur la surface.

Type IV et V : Ces types caractérisent bien la présence des micropores et des macropores dans l'adsorbant, les parties correspondantes à des pressions relatives faibles sont analogues à celles des isothermes de types II et III ; ceci pour les mêmes raisons. Mais les parties des isothermes correspondant à des pressions relatives supérieures pourraient s'expliquer par le remplissage des capillaires se terminant à une pression inférieure à la pression de saturation à cause de

forces d'attraction très développées régnant dans ces capillaires, provoquant une condensation rapide de l'adsorbat.

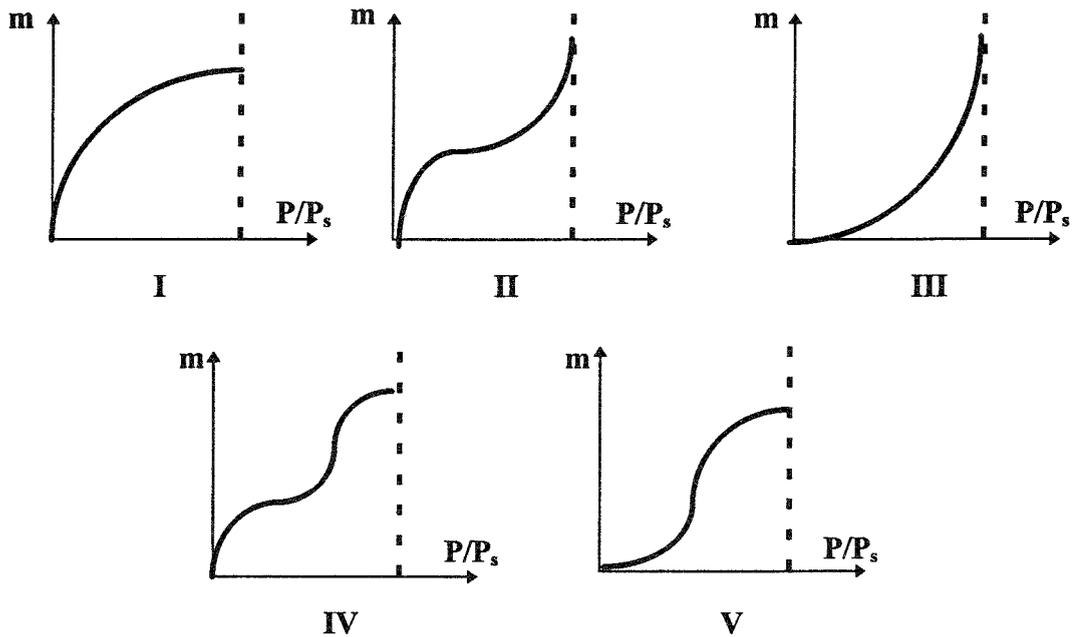


Figure (2-1) : Types de courbes d'isotherme d'adsorption [29]

Pour exprimer les relations qui relient le volume de gaz adsorbé à la pression et à la température, les théories sur l'adsorption utilisent deux modèles :

II .2.2 - Modèles cinétiques

Ces modèles donnent une description moléculaire du phénomène d'adsorption à partir de la spécification de la cinétique et du nombre de couches de molécules adsorbées.

II .2.2.1 - Isotherme de LANGMUIR

La première corrélation de l'adsorption a été établie par Langmuir en 1916 [39]. Elle est construite sur deux hypothèses :

#1 -Les molécules adsorbées ne peuvent former qu'une couche monomoléculaire (monocouche);

#2 -A l'équilibre dynamique d'adsorption, le nombre de molécules condensées par seconde sur une surface est proportionnel au nombre de molécules évaporées dans le même temps.

Langmuir a proposé l'équation suivante dans le cas d'une adsorption monomoléculaire :

$$\theta = \frac{m}{m_0} = \frac{k \cdot P_v}{1 + k \cdot P_v} \quad (1)$$

où θ : est le taux de recouvrement de la surface

m : quantité d'adsorbat

m_0 : quantité d'adsorbat maximale pour former une monocouche

P_v : pression partielle de vapeur

k : constante d'équilibre d'adsorption.

En fait, les courbes réelles des vitesses d'adsorption et de désorption ont une forme assez compliquée. Il faut tenir compte du nombre de collisions avec la surface du solide, de la probabilité de condensation des molécules sur cette surface, de l'énergie d'adsorption et du taux de recouvrement ; ceci dans le cas le plus simple d'un adsorbant homogène.

II .2.2.2 - Isotherme de BRUNAUER, EMMET et TELLER (B.E.T)

Elle est basée sur l'hypothèse que l'adsorbant est recouvert de couches multimoléculaires (multicouches), ces auteurs B.E.T [40] ont utilisé le postulat de Langmuir en supposant que :

La chaleur d'adsorption dégagée à chaque couche, excepté pour la monocouche, est égale à la chaleur molaire de condensation.

Excepté pour la monocouche, les conditions d'évaporation-condensation à la surface libre sont identiques.

A la pression de saturation P_s , l'adsorption est entièrement due à la condensation capillaire.

Ce modèle fait intervenir un recouvrement par superposition de couches et est décrit par l'équation suivante, proposée par B.E.T :

$$\frac{P_v}{w \cdot (P_s - P_v)} = \frac{1}{w_0 \cdot C_B} + \frac{(C_B - 1) \cdot P_v}{w_0 \cdot C_B \cdot P_s} \quad (2)$$

où P_v : pression de vapeur de l'adsorbat mesurée

P_s : pression de saturation à la température mesurée

C_B : constante de B.E.T, fonction de la chaleur d'adsorption

w_0 : est le volume maximal adsorbable

Cette équation sert essentiellement pour la détermination de la surface spécifique et de la valeur de w_m à partir de la représentation linéarisée $\frac{P_v}{w.(P_s - P_v)}$ en fonction de

P_v/P_s (figure 2b-1)

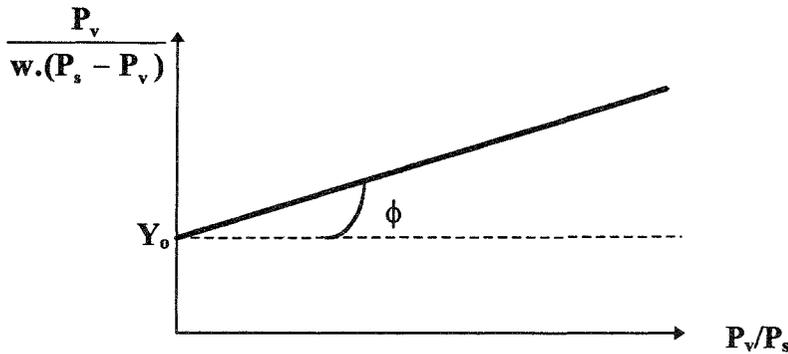


Figure 2b -1 : Diagramme de B.E.T

On calcule ainsi le volume maximal absorbable w_m et la constante C_B du couple utilisé à partir de la droite de pente $\text{tg}\phi = \frac{C_B - 1}{w_0 \cdot C_B}$ et d'ordonnée à l'origine $Y_0 = \frac{1}{w_0 \cdot C_B}$ (figure 2b-1).

II .2.3 - Modèle phénoménologique

Ce modèle est une approche purement thermodynamique associant la notion de potentiel d'adsorption à celle du taux de remplissage.

II .2.3.1 - Théorie du potentiel d'adsorption de POLANYI

Le gaz est supposé se comporter comme un gaz parfait, le film liquide à la surface de l'adsorbant est incompressible et l'énergie de formation de la surface liquide est supposée négligeable devant l'énergie d'adsorption..

Pour illustrer le calcul du potentiel d'adsorption de POLANYI, nous considérons un solide S placé dans une atmosphère de vapeur d'adsorbant à la pression P_v (figure 3a-1).

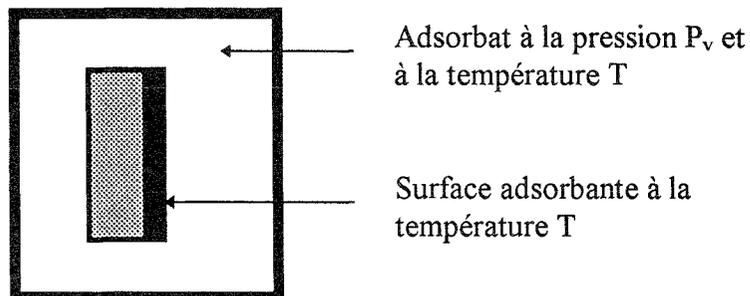


Figure 3a-1 : Enceinte de Polanyi

Il est d'usage de définir le potentiel d'adsorption ε comme le travail accompli par les forces d'adsorption pour faire passer une mole d'adsorbat de la phase gazeuse à la phase adsorbée. Le potentiel chimique μ_l du liquide en équilibre avec sa vapeur est de la forme :

$$\mu_l = \mathfrak{R}.T.\ln(P_s) \quad (3)$$

P_s est la pression de saturation à la température T ; \mathfrak{R} est la constante du gaz parfait.

Lorsque la phase adsorbée est loin de la saturation le potentiel chimique devient :

$$\mu_a = \mathfrak{R}.T.\ln(P_v) \quad (4)$$

P_v est la pression d'équilibre du gaz.

L'expression du potentiel d'adsorption de POLANYI[41], s'écrit :

$$\Delta G = \mu_l - \mu_a = \mathfrak{R}.T.\ln \frac{P_s}{P_v} \quad (5)$$

ou encore

$$\varepsilon = \mathfrak{R}.T.\ln \frac{P_s}{P_v}$$

Le potentiel d'adsorption est donc défini comme étant l'écart d'énergie libre entre la phase gazeuse à la pression de saturation P_s et la phase adsorbée à la pression d'équilibre du gaz P_v .

La représentation de Polanyi [41] d'une coupe d'un système solide-gaz est illustrée par la figure 3a-2 .

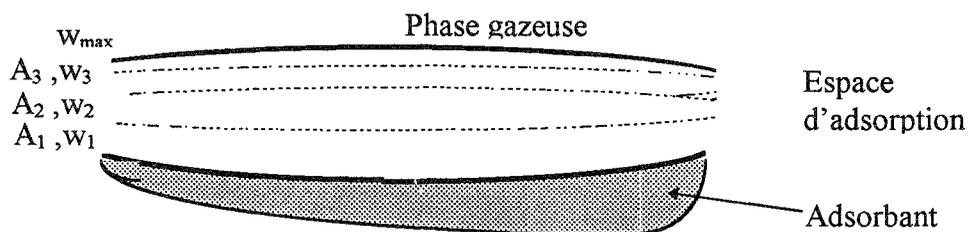


Figure 3a -2: Vue en coupe d'une couche adsorbée

Les lignes en pointillé représentent les points de même potentiel d'adsorption et définissent les surfaces équipotentielles $A_1, A_2, A_3, \dots, A_i \dots$ qui délimitent les volumes $w_1, w_2, w_3, \dots, w_i, \dots, w_{\max}$. Cette dernière quantité, w_{\max} , représente l'espace entier d'adsorption.

Il est alors possible de définir une fonction de distribution, représentée par $w = f(\varepsilon)$, qui à chaque potentiel ε_i fait correspondre un volume w_i délimité par une surface équipotentielle.

Le postulat de base de la théorie de POLANYI énonce que le potentiel d'adsorption est indépendant de la température de sorte que $w = f(\varepsilon)$ et qu'il devra être le même pour un couple adsorbant-adsorbant donné à toute température. Cette invariance s'exprime par :

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_w = 0 \quad (6)$$

Plusieurs équations ont été proposées pour déterminer cette courbe caractéristique : $w = f(\varepsilon)$.

II .2.3.2 - Equation de DUBININ et RADUSHKEVICH (D-R)

A partir du potentiel de Polanyi, Dubinin et Radushkévich [2] ont développé un modèle théorique rendant compte des masses d'adsorbant piégées à la surface d'un adsorbant microporeux.

Cette approche est basée sur deux hypothèses :

le taux de remplissage θ est une fonction du potentiel de Polanyi :

$$\theta = \frac{w}{w_0} = f\left(\frac{\varepsilon}{\beta}\right) \quad (7)$$

où β est le coefficient d'affinité.

la distribution des pores de l'adsorbant étant supposée Gaussienne,

l'équation de D-R est alors donnée par :

$$\theta = \exp\left(-k\left(\frac{\varepsilon}{\beta}\right)^2\right) \quad (8)$$

où k est un paramètre qui régit l'étalement de la distribution des pores.

II .2.3.3 - Equation de DUBININ et ASTAKHOV (D-A)

Dubinini et Astakhov ont proposé une forme plus générale de l'équation d'adsorption, basée sur une distribution des pores du type de WEIBUL [2] plutôt que sur une distribution Gaussienne :

$$\theta = \exp\left(-\left(\frac{\varepsilon}{\beta \cdot E_0}\right)^n\right) \quad (9)$$

où n varie de 1 à 1,8 pour le charbon actif AC35

et de 3 à 6 pour les Zéolithes.

E_0 est l'énergie libre d'adsorption de la vapeur de référence.

L'équation (9) s'écrit :

$$\theta = \exp\left(-\left(\frac{\mathcal{R} \cdot T}{\beta \cdot E_0} \cdot \ln \frac{P_s}{P_v}\right)^n\right) \quad (10)$$

II .3 - Expression de la masse adsorbée

A partir des équations (8) de D-R et (5) du potentiel de Polanyi on a :

$$\theta = \exp\left[-\frac{k}{\beta^2} \mathcal{R}^2 T^2 \ln^2 \frac{P_s}{P_v}\right] \quad (11)$$

ou alors :

$$w = w_0 \exp\left[-D \mathcal{R}^2 T^2 \ln^2 \frac{P_s}{P_v}\right] \quad (12)$$

où

w : volume d'alcool adsorbé par unité de masse de charbon actif

w_0 : volume maximal adsorbable par unité de masse de l'adsorbant

T : Température d'équilibre d'adsorption et $D = k / \beta^2$.

Différents travaux [6],[2] ont montré que l'équation de Dubinin Radushkévich (D-R) rendait bien compte des phénomènes d'adsorption-désorption sur les charbons actifs.

Quand on tient compte de la dépendance de w_0 avec la température, l'équation de D-R prend la forme :

$$w(T) = w_0 \exp \left[-D\mathfrak{R}^2 T^2 \ln^2 \frac{P_s}{P_v} \right] \quad (13)$$

Cette équation peut s'exprimer en terme de masse adsorbée dans le générateur en introduisant la masse volumique ρ^* de la phase adsorbée [2], définie par rapport à une température de référence T_0 et à partir du coefficient de dilatation volumique de cette phase :

$$\alpha = - \frac{\partial (\ln \rho^*(T))}{\partial T} \quad (14)$$

α est supposé constant, d'où :

$$\rho^*(T) = \rho^*(T_0) \exp[-\alpha(T - T_0)] \quad (15)$$

La masse sorbée sera donnée par :

$$m(T) = w(T) \cdot \rho^*(T) = \rho^*(T_0) w_0 \exp \left[-\alpha(T - T_0) - D\mathfrak{R}^2 T^2 \ln^2 \frac{P_s}{P_v} \right] \quad (16)$$

$$\text{ou alors} \quad m(T) = m_0(T_0) \exp \left[-\alpha(T - T_0) - D\mathfrak{R}^2 T^2 \ln^2 \frac{P_s}{P_v} \right] \quad (17)$$

m_0 représente la masse maximale adsorbable par unité de masse du charbon actif. Celle-ci dépend non seulement du couple utilisé mais également de la température [2].

Le tableau II ci-dessous donne un ordre de grandeur pour quelques couples.

Tableau II Constante m_0 de l'équation de D-R en kg d'adsorbant / kg de charbon

<i>Adsorbant-Adsorbant</i>	<i>Adsorption</i>		<i>Désorption</i>	
	<i>T₀ [K]</i>	<i>m₀ [kg.kg⁻¹]</i>	<i>T₀ [K]</i>	<i>m₀ [kg.kg⁻¹]</i>
<i>AC 40/3-éthanol</i>	431.7	0.5832	410.2	0.63254
<i>AC 40/3-méthanol</i>	427.2	0.48052	400.0	0.92526
<i>Norit R1 extra-éthanol</i>	467.6	0.47288	429.5	0.62414
<i>Norit R1 extra-méthanol</i>	489.6	0.57234	769.2	0.70008
<i>Picasolv T2-éthanol</i>	353.9	1.0228	352.7	1.0873
<i>Picasolv T2-méthanol</i>	365.2	0.94955	351.5	1.2839

Dans le cas où la température de référence T_0 varie entre 10 et 50 °C, l'étude de sensibilité [5] montre que $m_0(T_0)$ varie peu avec la température .

Le tableau III récapitule les valeurs obtenues des caractéristiques m_0 , D , et α pour différents couples en adsorption et désorption.

Tableau III :

Constantes de l'équation de D-R avec l'éthanol comme adsorbat

<i>Adsorbant</i>	m_0 [kg.kg ⁻¹]	$w_0 \cdot 10^3$ [m ³ .kg ⁻¹]	$D \cdot 10^9$ [kg ² .J ²]	α [K ⁻¹]
<i>AC 35/1,8</i>	0.3471	0.4397	1.6012	0.0011
<i>AC 35/3</i>	0.2922	0.3701	1.013	0.0011
<i>AC 30/3</i>	0.27688	0.3507	0.5203	0.0011
<i>AC 40/3</i>	0.42694	0.5298	2.552	0.0011
<i>NORIT RI EXTRA</i>	0.45825	0.5689	2.609	0.0011
<i>Picasolv</i>	0.56907	0.7045	6.9058	0.0011

Paramètres de l'équation de D-R avec le méthanol comme adsorbat

<i>Adsorbant</i>	m_0 [kg.kg ⁻¹]	$w_0 \cdot 10^3$ [m ³ .kg ⁻¹]	$D \cdot 10^9$ [kg ² .J ²]	α [K ⁻¹]
<i>AC 40/3</i>	0.4208	0.5223	3.729	0.0012
<i>NORIT RI EXTRA</i>	0.4504	0.5680	4.441	0.0012
<i>Picasolv</i>	0.5582	0.6933	3.831	0.0012

Les résultats expérimentaux obtenus à ce jour ne permettent pas de disposer d'une équation analytique unique du terme $m_0(T)$ [42]. Le problème posé par cette indétermination est la connaissance exacte de la chaleur isostérique de sorption.

II.4 - Chaleur isostérique de sorption

On connaît l'expression du potentiel d'adsorption de Polanyi " ϵ " (II-5) et l'expression de D-R " θ " (II-8); la combinaison de ces deux équations et l'application de l'équation de Clausius-Clapeyron donne :

$$\left[\frac{\partial \ln \left(\frac{P_s}{P_v} \right)}{\partial (T)} \right]_m = - \frac{q_{is} - L_v}{\mathfrak{R} \cdot T^2} \quad (18)$$

On obtient l'expression de la chaleur isostérique de sorption qui est de la forme suivante :

$$q_{is}(T) = L_v(T) + \varepsilon - T \cdot \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right|_m \quad (19)$$

En remplaçant le potentiel de Polanyi par son expression donnée dans l'équation D-R, on a :

$$m = m_0 \cdot \exp \left(- \frac{k}{\beta^2} \varepsilon^2 \right) \quad (20)$$

$$\text{On obtient : } q_{is}(T) = L_v(T) + \varepsilon - T \cdot \frac{\beta^2}{2k \cdot \varepsilon} \cdot \left. \frac{\partial \ln m_0}{\partial T} \right|_m \quad (21)$$

Par combinaison des équations (14) , (17) et (21), on obtient l'expression de la chaleur isostérique sous la forme suivante :

$$q_{is}(T) = L_v(T) + \mathfrak{R} \cdot T + \frac{2.303}{\sqrt{\beta}} \cdot \left[\sqrt{\ln(\theta)} + \frac{\alpha \cdot T}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\ln(\theta)}} \right] \quad (22)$$

II .5- Données thermophysiques des couples utilisés

II .5.1- Caractéristiques de l'adsorbant

L'adsorbant utilisé ici est le charbon actif AC35/3 dont les caractéristiques sont les suivantes :

a- Chaleur spécifique massique du charbon actif

La chaleur spécifique massique du charbon actif AC35/3 est donnée pour deux valeurs de températures [43] :

$$\text{à } T=30 \text{ °C} \quad C_{p_s} = 1020 \text{ [J.kg}^{-1} \cdot \text{°C}^{-1}]$$

$$\text{à } T=100 \text{ °C} \quad C_{p_s} = 1250 \text{ [J.kg}^{-1} \cdot \text{°C}^{-1}]$$

b- Les porosités du charbon actif

Des mesures ont été effectuées pour déterminer les surfaces spécifiques et les volumes des pores supposés sphériques de rayon compris entre 8 Å et 300 Å [2].

La détermination précise des textures poreuses des charbons actifs est réalisée par porosimétrie au mercure et par porosimétrie à l'azote à 77.5 K.

Les résultats obtenus pour trois sortes de charbons actifs sont rassemblés dans le tableau IV.

Tableau IV : Surface et volume poreux spécifiques

<i>Charbon actif</i>	<i>Volume spécifique [cm³.g⁻¹]</i>	<i>Surface spécifique [m².g⁻¹]</i>
<i>AC 40/3</i>	0.632	951.5
<i>NORIT RI EXTRA</i>	0.7315	1144.2
<i>PICASOLV</i>	0.7534	969.7

En ce qui concerne la porosité du charbon actif AC 35/3, L. ONYEBUEKE [43] a effectué des expériences pour déterminer la porosité totale qui est de l'ordre de 0,72 à la précision de 1%.

c- Les conductivités thermiques apparentes

La conductivité thermique apparente est sensible à la variation de la température et de la pression locale. Des résultats expérimentaux sur des charbons actifs sous vide ont été obtenu [43].

La conductivité thermique apparente est exprimée par les expressions analytiques suivantes :

en fonction de la température (Tableau V) :

$$\lambda = a + b.T + c.T^2 \quad (23)$$

en fonction de la pression de vapeur de l'adsorbat (Tableau VI) :

$$\lambda = a + b.\ln P + c.\ln P^2 + d.\ln P^3 + e.\ln P^4 \quad (24)$$

Tableau V : Conductivité thermique apparente en fonction de la température

	λ [W.m ⁻¹ .°C ⁻¹]	a	b	c
<i>AC 35/3</i>	porosité $\epsilon=0.72$	0.0318	$1.872 \cdot 10^{-4}$	$7.407 \cdot 10^{-7}$
<i>AC 35/1.8</i>	porosité $\epsilon=0.7$	0.0227	$2.661 \cdot 10^{-4}$	$1.793 \cdot 10^{-7}$

Tableau VI : Conductivité thermique apparente en fonction de la pression

	λ [W.m ⁻¹ .°C ⁻¹]	a	b	c	d	e
<i>Méthanol</i>	T=27 °C	0.0972	0.008	7.122 10 ⁻⁴	-7.49 10 ⁻⁵	-5.822 10 ⁻⁶
	T= 60 °C	0.1156	0.0089	-1.2257 10 ⁻⁴	-1.013 10 ⁻⁴	5.671 10 ⁻⁶
<i>Ethanol</i>	T=27 °C	0.0963	0.0077	7.685 10 ⁻⁴	-6.879 10 ⁻⁵	-8.338 10 ⁻⁶
	T= 60 °C	0.114	0.0087	1.408 10 ⁻⁵	-1.042 10 ⁻⁴	3.975 10 ⁻⁶

d- Les diffusivités du charbon actif

Le problème de transfert de masse à l'intérieur d'un grain de charbon est donc celui de la diffusion à l'intérieur des pores de transport (macropores) et à travers les micropores. Conformément à la littérature [44], on peut proposer une diffusivité effective associée à la bidispersion du grain :

$$D_e = \frac{R^2}{r_{\text{eff}}^2} \left(\frac{\rho_p}{\rho_{\mu p}} \right) D_\mu \quad (25)$$

R est le rayon du grain, ρ_p est la masse volumique apparente du grain.

Pour identifier D_μ , on s'appuiera sur la formule déduite par [2] :

$$D_\mu = D_\infty \exp(A_1 M_{1/4}) \quad (26)$$

Où D_∞ est la diffusivité corrigée, A_1 est une constante de diffusion et $M_{1/4}$ est la masse totale adsorbée moyenne correspondant à 25 % de θ . Les valeurs des constantes sont déduites de [2].

De ce fait, l'ajustement proposé s'écrit :

$$D_e = \beta D_\infty \frac{R^2}{r_{\text{eff}}^2} \left(\frac{\rho_p}{\rho_{\mu p}} \right) \exp(A_1 (0.25\theta)) \quad (27)$$

Où β est le coefficient de correction résultant de l'ajustement.

II .5.2- Caractéristiques de l'adsorbat

Les liquides utilisés comme adsorbat dans notre système sont le méthanol et l'éthanol. Les caractéristiques thermophysiques nécessaires pour le calcul du bilan thermique et du coefficient de performance de la machine regroupent la chaleur latente, la masse volumique du

liquide et de la vapeur, le coefficient de dilatation volumique et la conductivité thermique du liquide [45].

L'enthalpie du liquide saturant est obtenue par intégration de la chaleur spécifique du liquide:

$$H_1(T) = \int C_{p1}(T) dT \quad (28)$$

Le coefficient de dilatation volumique du liquide est calculé à partir de la densité du liquide:

$$\alpha(T) = - \left(\frac{\partial \ln \rho(T)}{\partial T} \right)_p \quad (29)$$

Pour le méthanol :

- Expression de la chaleur latente (kJ.kg^{-1}) en fonction de la température T (K) :

$$L(T) = 654.23 + 4.3956T - 8.5436.10^{-3}T^2 - 1.7968.10^{-6}T^3 \quad (30)$$

- Expression de la pression saturante en fonction de la température T(K) :

$$\ln(P) = 8.2641 - 0.18785T + 7.7686.10^{-4}T^2 - 8.6669.10^{-7}T^3 \text{ en (bar)} \quad (31)$$

- Expression de la chaleur spécifique du liquide ($\text{kJ.kg}^{-1}.\text{°C}^{-1}$) en fonction de la température T(K) :

$$C_{p1}(T) = 2.1167 + 0.23261T - 5.0556.10^{-2}T^2 + 3.9815.10^{-3}T^3 \quad (32)$$

- Expression de la masse volumique du liquide (kg.m^{-3}) en fonction de la température T(K) :

$$\rho_1(T) = 917.35 + 4.1898.10^{-3}T - 1.4679.10^{-3}T^2 \quad (33)$$

Pour l'éthanol :

- Expression de la chaleur latente (kJ.kg^{-1}) en fonction de la température T (K):

$$L(T) = 1696.537 - 3.695T - 9.98443.10^{-3}T^2 - 7.889.10^{-5}T^3 - 1.1428.10^{-7}T^4 \quad (34)$$

- Expression de la pression saturante en fonction de la température T(K) :

$$\ln(P) = 41.782 - 0.51221T + 1.7783.10^{-3}T^2 - 1.8758.10^{-6}T^3 \text{ en (bar)} \quad (35)$$

- Expression de la chaleur spécifique du liquide ($\text{kJ.kg}^{-1}.\text{°C}^{-1}$) en fonction de la température T(K) :

$$C_{p1}(T) = 0.99776 + 4.3551.10^{-3}T - 8.750.10^{-6}T^2 \quad (36)$$

- Expression de la masse volumique du liquide (kg.m^{-3}) en fonction de la température T(K) :

$$\rho_1(T) = 1897.3 + 11.815.10^{-3}T + 4.0375.10^{-2}T^2 - 5.1241.10^{-5}T^3 \quad (37)$$

Les tableaux VII 1 et VII 2 résument toutes les caractéristiques du méthanol et de l'éthanol.

Tableau VII 1 Caractéristiques thermophysiques du méthanol

Température (°C)	Chaleur latente (kJ/kg)	Masse volumique liquide (kg/m ³)	Masse volumique vapeur (kg/m ³)	Conductivité du liquide (W/m°C)	Chaleur massique liquide C_{p_l} (kJ/kg°C)	Chaleur massique vapeur C_{p_v} (kJ/kg°C)	Pression de vapeur (bar)
-50	1194	843.5	0.01	0.21	2.3	1.2	0.01
-30	1187	833.5	0.01	0.208		1.27	0.02
-10	1182	818.7	0.04	0.206		1.34	0.04
0					2.42		
10	1175	800.5	0.12	0.204		1.4	0.10
20					2.46		
30	1155	782	0.31	0.203	2.49	1.47	0.25
40					2.52		
50	1125	764.1	0.77	0.202	2.55	1.54	0.55
70	1085	746.2	1.47	0.201		1.61	1.31
90	1035	724.4	3.01	0.199		1.79	2.69
110	980	703.6	5.64	0.197		1.92	4.98
130	920		0.195	0.195		1.92	7.86
150	850	653.2	15.9	0.193	3.806	1.92	8.94

Tableau VII 2 Caractéristiques thermophysiques de l'éthanol

Température (°C)	Chaleur latente (kJ/kg)	Masse volumique liquide (kg/m ³)	Masse volumique vapeur (kg/m ³)	Conductivité du liquide (W/m°C)	Chaleur massique liquide C_l (kJ/kg°C)	Chaleur massique vapeur C_v (kJ/kg°C)	Pression de vapeur (bar)
-50					1.884		
-30	939.4	825.0	0.02	0.177		1.25	0.01
-10	928.7	813.0	0.03	0.173		1.31	0.02
0					2.42		
10	904.8	798.0	0.05	0.170		1.37	0.03
20					2.47		
30	888.6	781.0	0.38	0.168		1.44	0.1
40					2.721		
50	872.3	762.2	0.72	0.166	2.805	1.51	0.29
70	858.3	743.1	1.32	0.165		1.58	0.76
80					2.981		
90	832.1	725.3	2.59	0.163		1.65	1.43
110	768.6	704.1	5.71	0.160		1.72	2.66
120					3.806		
130	734.4	678.7	9.25	0.159		1.78	4.3

Références

- [1]: **J. LOISEAU**, "Adsorption Encyclopaedia Universalis", Vol.1, pp.252, Encyclopaedia Universalis France S.A, (1980).
- [2]:**R. BOUSSEHAIN**: "Caractérisation thermostatique et cinétique des phénomènes d'adsorption désorption de couples actifs-alcools", Thèse Doctorat d'état és Sciences de l'INPL, Nancy, Juin (1986).
- [3]: **D.M.RUTHVEN**," Principles of Adsorption & Adsorption processes ", Wiley-Interscience Publication, (1984).
- [4]: **A.PACAULT**, "les carbones", Le groupe Français d'étude des carbones, Collection de chimie physyque, Tome 2, Masson et cie, (1965).
- [5]: **L.LUO**, "Etude thermodynamique et thermique de machine à cycle inverse à adsorption", Thèse de Doctorat INPL, Nancy, (1991).
- [6] **M.CHAHID**, "Contribution à l'étude des machines thermiques à adsorption", Thèse de 3^{ème} cycle, INPL, (1985).
- [7] **R.E.CRITOPH,H.L.TURNER**," Activated carbon-ammonia adsorption cycle heat pumps",proceedings of the CEC- B.G.I.Workshop on Adsorption Heat pumps, London, pp.1-10, April (1988).
- [8] **E.PASSOS, F.MEUNIER, J.C.GIANOLA**, "Thermodynamic performance improvement of an intermitent solar-powered refrigeration cycle using adsorption of methanol on activated carbon", J.Heat Recovery systems, Vol.6, pp.259-264, (1986).

- [9] **A. BOUBAKRI, Ph. GRENIER, M. PONS**, "Utilisation of Activated Carbon and Methanol pair to solar ice production", Proc. JITH conf., Rabat, Morocco, Vol.1, pp.69-79, (1985).
- [10] **R. DELGADO, A. CHOISIER, P. GRENIER, I. ISMAIL, F. MEUNIER, M. PONS**, "Etude du cycle intermittent charbon actif-méthanol en vue de la réalisation d'une machine à fabriquer de la glace fonctionnant à l'énergie solaire", I.I.F.-I.I.R.-Commission E1-E2-Jerusalem (Israel) pp.185-191, (1982).
- [11] **A. AITTOMAKI, M. HAKONEN**, "Zeolite heat pump-adsorption of methanol in synthetic zeolites 13X, 4A and 5A", Int. J. Refrig., Vol. 9, pp. 240-244, (1986).
- [12] **G. HERMANN**, "Maintenance réduite pour le réfrigérateur solaire", Industries et techniques, pp. 114, (1980).
- [13] **M.H. SIMONOT-GRANGE, J. GUILLEMINOT**, "Pour une forme de la courbe caractéristique permettant le choix du meilleur couple adsorbant-zéolithe utilisable à des fins de réfrigération et son application au cas de l'habitat solaire", Ann. Chim. Fr., pp. 131-137, 1979.
- [14] **A. YAN, S. BAO, Y. YAN, R. WAN**, "The selection of liquid-zeolite molecular sieve couples", Int.J.Refriger., Vol. 1, pp. 24-33, (1982).
- [15] **A. YAN, S. BAO, Y. YAN, R. WANG**, "The Refrigeration cycle system of solid gas sorption", Int.J.Refriger., Vol. 1, pp. 32-37, (1983).
- [16] **X. LI, J. WU, B. HAU, Y. WANG**, "The determination and analysis of the adsorption heat of water on zeolite in the refrigeration cycle", Int.J.Refriger., Vol. 1, pp. 11-18, (1985).
- [17] **J. BOUGARD**, "Thermodynamical and technical problems in solar adsorption refrigeration", I.I.F.-I.I.R.-Commissions B1, B2, E1, E2-Purdue (U.S.A), pp. 25-32, (1986).

- [18] **J.J.GUILLEMINOT, F.MEUNIER**, " Etude expérimentale d'une glacière solaire utilisant le cycle zéolithe 13X-eau," Rev. Gén. Therm. Fr. n° 239, pp. 825-834, (1981).
- [19] **M. DUPONT, J. J. GUILLEMINOT, F. MEUNIER, P. NGUYEN**, " Etude de glacières solaires utilisant le cycle intermittent jour-nuit zéolithe 13X-eau en climat tempéré et en climat tropical", I.I.F.-I.I.R -commission E1, E2-Jérusalem (Israel), pp. 193-207, (1982).
- [20] **P GRENIER, F. MEUNIER, M. PONS**, "Les différentes possibilités d'application du couple zéolithe 13X-H₂O pour le froid solaire en fonction du type de captation de l'énergie solaire", I.I.F.-I.I.R.-Commision E1-E2-Jérusalem (Israel), pp. 200-207.(1982).
- [21] **F. MEUNIER, B. MISCHLER**, " Solar cooling through cycles using microporous solid adsorbents", pp. 676-680.
- [22] **A.S. RONALD, C. H. LANGFORD, B. R. HOLLEBONE**, "Solar energy storage using chemical potential changes associated with drying of zeolites", Solar Energy, vol.23, pp. 489-495, (1979).
- [23] **A. ADELL**, "Description d'un réfrigérateur solaire à adsorption solide. Etude de son refroidissement en climat équatorial", Rev. Gen. Therm., Fr., n° 281, pp. 529-536, (1985).
- [24] **K. ABDELLAH, Ph. GRENIER, N. CORON**, "Etude expérimentale des transferts couplés au sein d'un grain d'adsorbant solide", pp. 171-186.
- [25] **D. I. TCHERNEV**, " Solar air conditioning and refrigeration systems utilizing zeolithes", I.I.F.-I.I.R.-Commission E1, E2-Jérusalem (Israel), pp.209-215, (1982).
- [26] **J.J.GUILLEMINOT, F.MEUNIER, B.MISSCHLER**, " utilisation d'un cycle intermittent zeolithe 13X-H₂O pour la réfrigération solaire", XV Congrès international du froid , pp.1-4, Sept.(1979).

- [27] **F. MEUNIER, N. DOUSS, T. ZANIFE**, "Le froid par adsorption, zéolithe-eau et charbon actif-méthanol", Journée S.F.T, Novembre (1990), Paris.
- [28] **M.PONS, Ph.GRENIER**, "Solar ice maker working with activated carbon methanol adsorbent-adsorbate pair", INTERSOL 85, pp.731-735, (1985).
- [29] **A. CLARK**, "The theory of Adsorption and Catalysis ", Academic Press, New York, (1970).
- [30] **J. BOUGARD, A. MIMET, G. VERONIKIS**, "Comportement transitoire des machines frigorifiques solaires à adsorption charbon actif-ammoniac", Journée S.F.T., Novembre (1990), Paris.
- [31] : **R.E. CRITOPH**, " Performance limitation of adsorption cycle for solar cooling", Solar Energy, Vol.41, pp.1-16, (1988).
- [32] **R. E. CRITOPH, M. INST, C. ENG**, " Testing of an activated carbon-R114 adsorption cycle solar refrigerator", pp. 1-5
- [33] **E. PASSOS, H.L. TURNER**, " Performance of ammonia-activated carbon and ammonia-zeolite heat pump adsorption cycle", Heat Recovery System, Vol.6, No 3, pp. 259-264, (1986).
- [34] **R. E. CRITOPH**, "Performance limitations of adsorption cycles for solar cooling", solar energy, Vol.41, n° 1, pp.21-31,(1988).
- [35] **A. SACODA, M. SUZUKI** , "Fundamental study on solar powered adsorption cooling system", Journal of chemical engineering of Japan, Vol. 17, N° 1 pp. 52-57,(1984).
- [36] **M. BALAT**, " Etudes comparative de quelques réfrigérateurs solaires utilisant une réaction chimique entre un solide et un gaz", Revue Phys. Appl. N° 24, pp.671-689, (1989).

- [37] **P. WORSOE-SCHMIDT**, "Solar refrigeration for developing countries using a solid absorption cycle", International Journal of Ambient Energy, Vol. 4, Number 3, pp.115-123, (1983).
- [38] **J. FLECHON, G. GODMEL**, "Refrigerateur solaire photothermique", pp.1-3.
- [39] **LANGMUIR**, J. Amer. Chem. Soc.,38, pp. 2221, (1916).
- [40] **S. BRUNAUER, PH EMMET, E. TELLER**, J Amer. Chem. Soc. 60, pp. 309, (1938).
- [41] **POLANYI**, Trans. Faraday Soc., 28, pp.316, (1932).
- [42] **M. DINY, Y. COULIBALY, R. BOUSSEHAIN, M. FEIDT**, " Transferts couplés de chaleur et de masse dans un générateur de pompe à chaleur à adsorption ", actes des 4^{èmes} Journées Européennes de thermodynamique contemporaine , pp.257-262, Nancy , (1995).
- [43] **LANDON C. ONYEBUEKE**, " Contribution à l'étude des transferts de chaleur au générateur de machines trithermes à adsorption ", Thèse I.N.P.L, (1989).
- [44] **T. FURUSAWA, J.M. SMITH**, " Diffusivities from dynamic adsorption datas ", AICHE Journal, Vol. 19, N° 2, pp. 401-403, (1973).
- [45] **K. RAZNJEVIC**, "Tables et diagrammes Thermodynamiques", Edition Eyrolles.

CHAPITRE III

MODELISATION DU FONCTIONNEMENT DE

L'INSTALLATION

CHAPITRE III

MODELISATION DU FONCTIONNEMENT DE L'INSTALLATION

SOMMAIRE DU CHAPITRE

III	Introduction	59
III.1-	Modélisation des transferts de chaleur et de masse dans un grain	59
	III.1.1- Etude bibliographique	59
	III.1.1.1- Sorption isotherme dans un grain monodispersé	61
	III.1.1.2- Sorption non isotherme dans un grain monodispersé	61
	III.1.1.3- Sorption non isotherme dans un grain microporeux monodispersé	63
	III.1.1.4- Sorption isotherme dans un grain bidispersé	66
	III.1.1.5- Sorption non isotherme dans grain bidispersé	67
	III.1.2- Modélisation des transferts de chaleur et de masse dans un grain bidispersé non isotherme	68
	III.1.2.1- Modèle de diffusion à deux échelles (macroporeuse et microporeuse)	68
	III.1.2.1.1- Bilan de masse dans les microparticules	68
	III.1.2.1.2- Bilan de masse dans les macroparticules	69
	III.1.2.1.3- Bilan de chaleur à travers le grain	69
	III.1.2.2- Adimensionnement	70
	III.1.2.3- Equations adimensionnelles du modèle	70
	III.1.2.4- Discrétisation des équations	71
III.2-	Modélisation des transferts de chaleur et de masse dans le générateur	74
	III.2- Introduction	74
	III.2.1- Mise en équation du modèle	74
	III.2.1.1- Equation de l'énergie	75
	III.2.1.2- Conditions initiales et aux limites	76
	III.2.2- Discrétisation du système d'équations	77
III.3-	Modélisation du cycle de fonctionnement de la machine	80
	III.3.1- Bilans des différents composants de la machine	81
	III.3.2- Efficacité et coefficient de performance	83

Nomenclature du chapitre

B	mobilité chimique	[m ² mole/Js]		contact paroi-charbon actif	[W/m ² K]
c _p	chaleur spécifique	[J/kg.K]	L _v	chaleur latente de vaporisation	[J/kg]
c _s	concentration massique à la surface des pores	[kg/m ³]	M	masse molaire	[g/mole]
c _v	concentration massique dans le volume des pores	[kg/m ³]	m	masse du matériau solide	[kg]
D	diffusivité	[m ² /s]	\dot{m}	débit	[kg/s]
D _e	diffusivité effective globale	[m ² /s]	m _{dés}	masse désorbée	[g/kg]
D _i	diffusivité massique microparticulaire	[m ² /s]	m _{sor}	masse sorbée	[g/kg]
D _p	diffusivité massique macroparticulaire	[m ² /s]	M _t	masse totale adsorbée	[g/kg]
E	efficacité		P	pression	[hPa]
h	coefficient d'échange interfacial	[W/m ² K]	q	quantité adsorbée	[g/kg]
I	terme source ou puits	[W/m ³]	q _{is}	chaleur isostérique de sorption	[J/kg]
J	flux de diffusion massique	[kg/m ² .s]	\mathcal{R}	constante des gaz parfaits	[J/mole.K]
k _c	conductance thermique de		r _o	rayon sphérique	[m]
			w	concentration microporeuse adimensionnelle	

Symboles

α	pente isobare d'adsorption			d'espace des micropores
β	pente isotherme d'adsorption		ψ	variable adimensionnelle d'espace des macropores
ΔH	enthalpie		ρ _c	masse volumique apparente
ε	porosité ou potentiel d'adsorption		ρ _s	masse volumique du solide
φ _e	densité de flux de chaleur échangée avec l'extérieur		ρ _o	masse volumique de l'adsorbant
λ	conductivité thermique		σ	terme source
λ*	conductivité thermique apparente		θ	température
μ	potentiel chimique		υ _i , υ _k	fraction des surfaces recouvertes d'adsorbat
η	variable adimensionnelle			

Indices et exposants

a	phase adsorbée	g	générateur
air	air	in	initial
c	condensation	m	méthanol
co	condenseur	md	méthanol désorbée
ch	charbon	se	sortie eau
des	désorbée	v	phase vapeur
eau	eau	0	initial
ee	entrée eau	∞	à l'équilibre
ex	extérieur	—	moyenne
ev	évaporateur	*	état de référence
f	final		

III. Introduction

Ce chapitre est consacré d'une part à la modélisation des transferts de chaleur et de masse dans un grain de charbon actif et dans le générateur, et d'autre part, à la modélisation du cycle de fonctionnement de la machine frigorifique à adsorption.

Un résumé bibliographique présente les approches utilisées pour l'étude, des transferts dans le grain en fonction de l'échelle de sa porosité et de l'isothermie du transfert de masse.

Dans ce chapitre, on rend compte de la modélisation des transferts dans le grain par une approche choisie de type bidispersé. Une ébauche de résolution numérique en sera donnée dans le chapitre des résultats (Chapitre V).

La modélisation des transferts de chaleur et de masse se fait par une approche locale basée sur une représentation en volumes élémentaires du générateur. La résolution est conduite par la méthode de volume finie (§§ III.3.1).

Enfin, la modélisation du cycle de fonctionnement de la machine est donnée en termes de bilans calorifiques, frigorifiques et massiques; et en termes d'efficacité et de coefficients de performance des composants de l'installation.

III.1- Modélisation des transferts de chaleur et de masse dans un grain

III.1.1- Etude bibliographique

Cette étude montre que la nature de la structure poreuse du grain et de l'isothermicité de la sorption influencent le mode de transport de masse et d'échange thermique qui en résulte.

Certains auteurs considèrent le grain comme monodispersé, à porosité homogène, en négligeant l'une des résistances au transfert de masse, ou comme bidispersé, en prenant en compte la contribution des micro et des macroporosités (voir figure III.1).

D'autre part la sorption est considérée isotherme ou non isotherme, suivant l'importance de la chaleur dégagée, pour un couple donné.

La tentative de l'approche bidispersée des transferts de masse et de chaleur en régime transitoire vise la prise en compte de la combinaison des deux effets distincts des résistances diffusionnelles microporeuse et macroporeuse.

Quand l'une ou l'autre de ces résistances est négligeable, le comportement en sorption peut être décrit par un modèle diffusionnel simple (1) (figure III.1).

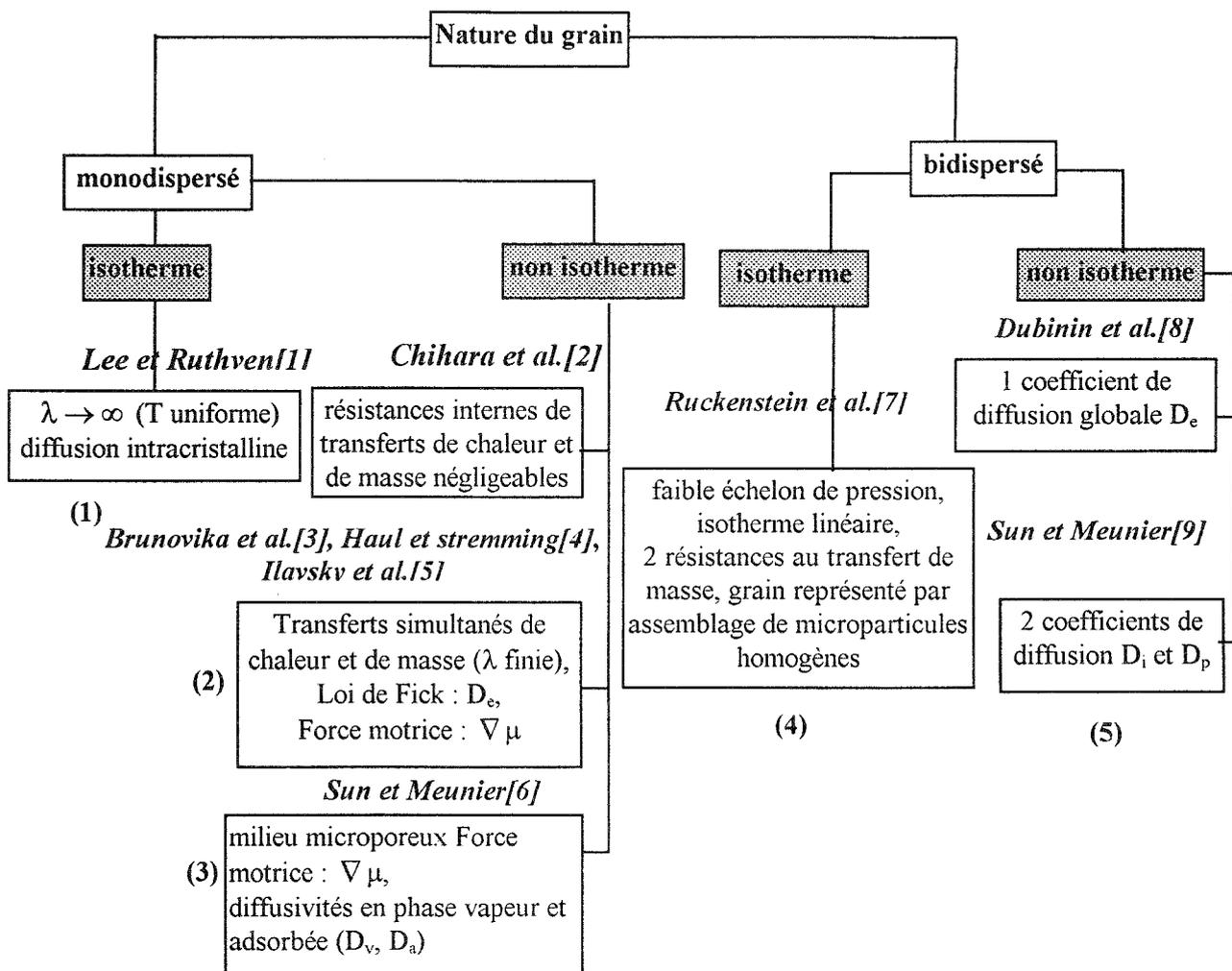


Figure III .1 : Synthèse bibliographique sur le transfert de chaleur et de masse

III.1.1.1- Sorption isotherme dans un grain monodispersé

Ce modèle proposé initialement par Lee et Ruthven [1], suppose que le transport de masse se fait sous contrôle microporeux, la résistance du film étant négligeable :

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{D}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial q}{\partial r} \right) \quad (1)$$

plus les conditions initiales et aux limites.

Différentes représentations des isothermes d'adsorption sont rencontrées, parmi celles ci on a :

* isotherme linéaire de type $q^* = Kc$ (2)

* isotherme rectangulaire de type $q^* = 0$ à $c = 0$, $q^* = q$ à $c > 0$ (3)

Dans le cas de diffusion intraparticulaire l'hypothèse de force motrice linéaire de type LDF ou LDF étendue est retenue respectivement pour les temps longs et pour les temps courts et longs.

LDF : $\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = \frac{15 \cdot D}{r_0^2} (q^* - \bar{q}) \Leftrightarrow$ Profil parabolique : $q = A_0 + A_2 r^2$, valable pour $\frac{D \cdot t}{r_0^2} > 0,1$.

LDF étendue : $\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = \frac{15 \cdot D}{r_0^2} (q^* - \bar{q}) + \Gamma \Leftrightarrow$ Profil cubique : $q = A_0 + A_2 r^2 + A_3 r^3$

où r_0 est le rayon du grain, \bar{q} la quantité moyenne adsorbée et q^* la quantité totale adsorbée à l'équilibre

III.1.1.2- Sorption non isotherme dans un grain monodispersé

Une autre façon d'aborder le problème c'est de considérer le transfert non isotherme de matière dans le volume et à la surface des pores du grain monodispersé.

Sous les hypothèses suivantes :

a) - La concentration d'adsorbat est divisée en deux fractions dans le volume de pore c_v et à la surface de pore c_s . L'équilibre s'établit à tout instant, entre la phase fluide et la surface du solide sphérique de rayon r_0 (figure III.2).

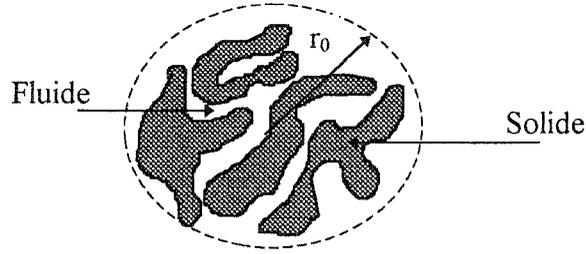


Figure III. 2 : Schéma d'un grain de charbon actif

$$\text{Dans ce cas } \left. \frac{\partial c_s}{\partial c_v} \right|_T = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \rho_s \mathfrak{R}T \left(\frac{\partial n_s}{\partial p} \right)_T = \beta \quad (4)$$

β est la pente de l'isotherme d'adsorption

$$\left. \frac{\partial c_s}{\partial T} \right|_{c_v} = -\alpha \quad (5)$$

α est la pente de l'isobare d'adsorption

$$\text{A faible échelon de pression on a: } \frac{\partial c_s}{\partial t} = \beta \frac{\partial c_v}{\partial t} - \alpha \frac{\partial T}{\partial t} \quad (6)$$

où c_s est une fonction linéaire de c_v et de T .

b) La diffusivité effective globale D_e est supposée indépendante de la concentration et de la température pendant l'échelon d'adsorption.

c) q_{st} , C_p du solide contenant l'adsorbat, la densité ρ_e et λ_e du solide poreux et le coefficient d'échange interfacial h sont supposés constants avec le recouvrement et la température pendant l'échelon de sorption.

d) L'écart de température $\Delta T(r,t)$ est de la forme :

$$\Delta T(r,t) = T(r,t) - T_0 = \sum_{n=1}^{\infty} X_n(r) \cdot Z_n(t) \quad (7)$$

Moyennant ces hypothèses, le processus de diffusion est décrit par le système d'équations

couplées par le terme $\frac{\partial c_s}{\partial t}$

$$\frac{\partial}{\partial t}(c_v + c_s) = \frac{D_e}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} (c_v + c_s) \right) \quad (8)$$

$$\rho_\varepsilon C_p \frac{\partial T}{\partial t} = q_{st} \cdot \frac{\partial c_s}{\partial t} + \frac{\lambda}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{3 \cdot h}{r_0} (T - T_0) \quad (9)$$

Moyennant les hypothèses précédentes et les conditions initiales et aux limites suivantes :

conditions initiales $c_s(r,t) = c_{s0}$ pour $t = 0$ et $c_s(r,t) = c_{s\infty}$ pour $t = \text{infini}$

conditions aux limites $c_s(r,t) = c_{s\infty} \Big|_{r=r_0}$ et $\frac{\partial c_s}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0$

la résolution du système d'équation (III.8 et 9) donne :

$$\frac{c_s(r,t) - c_{s0}}{c_{s\infty} - c_{s0}} = 1 - \frac{2 \cdot r_0}{\pi \cdot r} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \sin\left(\frac{\pi \cdot n \cdot r}{r_0}\right) \cdot e^{-y_n t} \left[1 + t \cdot \left(y_n - \frac{\pi^2 n^2 D_e \Gamma}{r_0^2 (\Gamma + \alpha - \beta \Lambda)} \right) \right] \quad (10)$$

Le total adsorbé M_t qui est mesuré expérimentalement est à comparer avec sa valeur théorique obtenue par intégration de $c_s(r,t)$ entre $r=0$ et $r = r_0$.

$$\frac{M_t - M_0}{M_\infty - M_0} = 1 - \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \left[1 + t \left(y_n - \frac{\pi^2 n^2 D_e \Gamma}{r_0^2 (\Gamma + \alpha - \beta \Lambda)} \right) \right] \cdot e^{-y_n t} \quad (11)$$

Ceci est à comparer avec le cas de la sorption isotherme pour lequel on a :

$$\frac{M_t - M_0}{M_\infty - M_0} = 1 - \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \cdot \exp\left(-\pi^2 n^2 \frac{D_e t}{r_0^2}\right) \quad (12)$$

D'autre part

$$\Delta T(r,t) = \frac{2\pi(c_{s\infty} - c_{s0})D_e}{r_0(\Gamma + \alpha - \beta\Lambda)} \sum_{n=1}^{\infty} -1^{n+1} \cdot \sin\left(\frac{\pi \cdot n \cdot r}{r_0}\right) \cdot t \cdot e^{-y_n t} \quad (13)$$

$$\text{où } \Lambda = \frac{\alpha}{1 + \beta} \text{ et } \Gamma = \frac{\rho_\varepsilon \cdot C_p}{q_{st}}$$

III.1.1.3- Sorption non isotherme dans un grain microporeux monodispersé

Dans ce modèle on introduit les diffusivités massiques en phase vapeur, D_v , et en phase adsorbé, D_a .

Moyennant les hypothèses suivantes du modèle :

a)- la résistance dominante au transfert de masse est la diffusion intracristalline

b)- deux mécanismes de diffusion de masse dans le volume poreux sont considérés :

- diffusion surfacique des molécules adsorbées.
- diffusion poreuse des molécules gazeuses.

c)- la vraie force motrice de transport de masse est le gradient du potentiel chimique

$$\mu, \text{ plutôt que celui de concentration : } J_m = -B \cdot c \cdot \Delta\mu \quad (14)$$

$$\text{où } \mu = \eta(T) + \mathfrak{R} \cdot T \cdot \ln\left(\frac{P}{P^*}\right) \quad \text{et} \quad \eta(T) = h^* - TS^* + c_p \cdot \left(T - T^* - T \cdot \ln\left(\frac{T}{T^*}\right)\right)$$

B est la mobilité chimique, c est la concentration et l'exposant * est relatif à un état de référence.

d)- le volume poreux est divisé en phase vapeur c et phase adsorbée q, la porosité ε est donnée par :

$$\frac{c}{\rho_v} + \frac{q}{\rho_a} = \varepsilon \quad \text{où } \rho_v \text{ et } \rho_a \text{ sont les densités des phases.}$$

A l'équilibre de pression entre ces phases on a : $\rho_v \cdot \mathfrak{R} \cdot T = P(q, T)$.

D'après Dubinin et Radushkèvich :

$$P(q, T) = P_s(T) \cdot \exp\left[-\frac{1}{\mathfrak{R} \cdot T} \left(\frac{1}{D} \ln\left(\frac{w_o}{w}\right)\right)^{1/2}\right] = P_s(T) \cdot \exp\left[-\frac{1}{\mathfrak{R} \cdot T} \left(\frac{1}{D} \ln\left(\frac{\varepsilon \cdot \rho_a}{q}\right)\right)^{1/2}\right] \quad (15)$$

$$\text{d'où } c = \frac{\varepsilon - \frac{q}{\rho_a}}{\rho_v} = \frac{\varepsilon - \frac{q}{\rho_a}}{\mathfrak{R} \cdot T} \cdot P(q, T) \quad (16)$$

e)- l'adsorbant poreux est homogène vis à vis du transfert de chaleur, seule la diffusivité thermique est prise en compte en conduction.

Equations du modèle :

- Flux de diffusion massique

en phase vapeur :

$$\begin{aligned} J_{mv} &= -B_v \cdot c \cdot \nabla\mu = -B_v \cdot c \cdot \left[\left(\frac{\partial\mu}{\partial T}\right)_q \cdot \nabla T + \left(\frac{\partial\mu}{\partial q}\right)_T \cdot \nabla q \right] \\ &= -D_v \cdot (\nabla q + \delta \cdot \nabla T). \end{aligned} \quad (17.a)$$

$$\text{De même, en phase adsorbée : } J_{ma} = -D_a \cdot (\nabla q + \delta \cdot \nabla T). \quad (17.b)$$

Le flux massique total :

$$J_m = J_{mv} + J_{ma} = -(D_v + D_a)(\nabla q + \delta \cdot \nabla T) = -D \cdot (\nabla q + \delta \cdot \nabla T) \quad (17.c)$$

où D dépend de la quantité adsorbée q et de la température:

$$D = f(q, T) = D_v + D_a. \quad (17.d)$$

- Bilan massique des phases :

$$\text{En phase vapeur : } \frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla J_{mv} + \rho_o I_v \quad (18.a)$$

$$\text{En phase adsorbée : } \frac{\partial q}{\partial t} = -\nabla J_{ma} + \rho_o I_a \quad (18.b)$$

où I_v, I_a sont les termes sources ou puits dûs aux changement de phase, $I_v + I_a = 0$, et

ρ_o est la masse volumique de l'adsorbant.

- Bilan massique total :

Il résulte de la sommation des bilans massiques des phases :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(c + q) = \nabla [D(\nabla q + \delta \cdot \nabla T)] \quad (19.a)$$

$$\text{or } c = f(q, T) \Rightarrow \frac{\partial c}{\partial t} = \left(\frac{\partial c}{\partial q} \right)_T \cdot \frac{\partial q}{\partial t} + \left(\frac{\partial c}{\partial T} \right)_q \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (19.b)$$

$$\text{d'où } \left\{ 1 + \left(\frac{\partial c}{\partial q} \right)_T \right\} \frac{\partial q}{\partial t} + \left(\frac{\partial c}{\partial T} \right)_q \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla [D(\nabla q + \delta \cdot \nabla T)] \quad (19.c)$$

- Bilan calorifique :

$$\rho_o \cdot C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \underbrace{\nabla(\lambda \cdot \nabla T)}_{\text{conduction homogène}} + \underbrace{\rho_o \cdot I_a \cdot q_{is}}_{\text{source, phase de transition}} \quad (20)$$

où q_{is} est la chaleur isostérique de sorption.

Le terme de source massique

$$\rho_o I_a = -\rho_o I_v = \nabla [D_v(\nabla q + \delta \cdot \nabla T)] - \frac{\partial c}{\partial t} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \text{d'où } q_{is} \cdot \left(\frac{\partial c}{\partial q} \right)_T \cdot \frac{\partial q}{\partial t} + \left\{ \rho_o \cdot C_p + \Delta H \cdot \left(\frac{\partial c}{\partial T} \right)_q \right\} \frac{\partial T}{\partial t} \\ = \nabla(\lambda \cdot \nabla T) + q_{is} \cdot \nabla [D_v(\nabla q + \delta \cdot \nabla T)] \end{aligned} \quad (22)$$

On remarque que les équations du bilan massique total et du bilan d'énergie sont fortement couplées.

III.1.1.4- Sorption isotherme dans un grain bidispersé

Le grain est formé de macroparticules supposées sphériques, de rayon R_a , constituées d'assemblage de microparticules de rayon R_i .

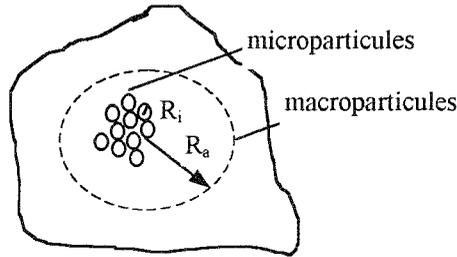


Figure III .3 : Schéma descriptif d'un grain de charbon actif bidispersé

Les équations du modèle isotherme de transfert de masse sont :

Dans une microparticules sphérique :

$$\underbrace{\frac{D_i \epsilon_i}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left[r_i^2 \frac{\partial c_i}{\partial r_i} \right]}_{\text{flux diffusionnel}} = \underbrace{\epsilon_i \frac{\partial c_i}{\partial t}}_{\text{accumulation en volume}} + \underbrace{\vartheta_i \frac{\partial c_{si}}{\partial t}}_{\text{accumulation en surface}} \tag{23}$$

Dans une macroparticules sphérique :

$$\frac{D_a \epsilon_a}{r_a^2} \frac{\partial}{\partial r_a} \left[r_a^2 \frac{\partial c_a}{\partial r_a} \right] = \epsilon_a \frac{\partial c_a}{\partial t} + \vartheta_a \frac{\partial c_{sa}}{\partial t} + \underbrace{n \cdot 4 \cdot \pi \cdot R_i^2 \epsilon_i D_i \frac{\partial c_i}{\partial r_i} \Big|_{r_i=R_i}}_{\text{flux diffusionnel à la surface des n microparticules}} \tag{24}$$

ϑ_i , ϑ_a sont les fractions des surfaces recouvertes d'adsorbat.

Si l'isotherme d'adsorption est supposé linéaire, par échelon de pression :

$$c_{sa} = H_a \cdot c_a ; c_{si} = H_i \cdot c_i \tag{25}$$

avec les conditions initiales et aux limites, la solution est de la forme :

$$\frac{c_a - c_{a0}}{c_{a\infty} - c_{a0}} = 1 + \frac{4 \pi}{\eta \beta} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{q=1}^{\infty} \frac{(-1)^k \sin(k \cdot \pi \cdot \eta) \cdot \exp(-\alpha \cdot \xi_{qk}^2 \cdot \tau)}{\xi_{qk}^2 \left[\frac{\alpha}{\beta} + 1 + \cot g^2 \xi_{qk} - \left(1 - \frac{k^2 \pi^2}{\beta} \right) \cdot \frac{1}{\xi_{qk}^2} \right]} \tag{26.a}$$

$$\text{où } \eta = \frac{r_a}{R_a}, \quad \beta = \frac{3(1-\varepsilon_a)\varepsilon_i R_a^2 D_i}{\varepsilon_a R_i^2 D_a}, \quad \alpha = \frac{D_i R_a^2}{D_a R_i^2}, \quad \tau = \frac{D_a t}{\left(1 + \frac{S_a H_a}{\varepsilon_a}\right) R_a^2} \quad (26.b)$$

et ξ_{qk} sont les racines de l'équation

$$\beta(1 - \xi_{qk} \cot g(\xi_{qk})) + \alpha \xi_{qk}^2 = k^2 \pi^2 ; k = 1, 2, 3, \dots, \infty. \quad (26.c)$$

la masse totale adsorbée est donnée par

$$M_t = \int_0^t D_a \varepsilon_a 4\pi R_a^2 \left(\frac{\partial c_a}{\partial r_a} \right)_{r_a=R_a} dt \quad (27)$$

III.1.1.5- Sorption non isotherme dans un grain bidispersé

En s'inspirant des équations des modèles précédents (§§.III.1.3 et §§.III.1.4), les équations des bilans massique et d'énergie sont :

- Flux de diffusion dans les micropores : $J_{mi} = -D_i(\nabla c_i + \delta_{\mu i} \nabla T)$
- Flux de diffusion dans les macropores : $J_{mp} = -D_p(\nabla c_p + \delta_{\mu p} \nabla T)$
- Bilan massique dans les micropores : $\frac{\partial}{\partial t}(c_i + q) = \frac{D_i}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left(r_i^2 \frac{\partial c_i}{\partial r_i} \right)$
- Bilan massique dans les macropores :

$$\frac{\partial c_p}{\partial t} + n4\pi R_i^2 D_i \left. \frac{\partial c_i}{\partial r_i} \right|_{r_i=R_i} = \frac{D_p}{r_p^2} \frac{\partial}{\partial r_p} \left(r_p^2 \frac{\partial c_p}{\partial r_p} \right) + \delta_p \frac{D_p}{r_p^2} \frac{\partial}{\partial r_p} \left(r_p^2 \frac{\partial T}{\partial r_p} \right) \quad (28)$$

- Bilan calorifique dans le grain :

$$\rho c_s \frac{\partial T}{\partial t} - n4\pi R_i^2 D_i \left. \frac{\partial c_i}{\partial r_i} \right|_{r_i=R_i} \cdot q_{is} = \frac{\lambda}{r_p^2} \frac{\partial}{\partial r_p} \left(r_p^2 \frac{\partial T}{\partial r_p} \right) \quad (29)$$

III.1.2- Modélisation des transferts de chaleur et de masse dans un grain bidispersé non isotherme

III.1.2.1- Modèle de diffusion à deux échelles (macroporeuse et microporeuse)

Cinétique de transfert dans un grain bidispersé :

Ruckenstein et al.[7] ont proposé un modèle physique simplifié mais assez général pour pouvoir considérer simultanément les mécanismes dans les macropores et dans les micropores.

Dans ce modèle, on considère le grain de charbon de forme sphérique de rayon R_p , avec une structure de pores bidispersée, représentée idéalement par un assemblage de microparticules sphériques, de rayon r , identiques et homogènes (figure III. 4).

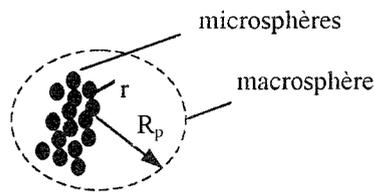


Figure III.4 : Grain sphérique bidispersé

Le phénomène d'adsorption se fait par diffusion et accumulation des vapeurs d'adsorbat dans le volume des macropores. Puis par diffusion massique à travers les surfaces des microsphères pour pénétrer dans les micropores.

III.1.2.1.1- Bilan de masse dans les microparticules

Le bilan de concentration massique dans les microparticules est exprimé par :

$$\frac{\partial}{\partial t}(c_i + q) = \frac{D_i}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left(r_i^2 \frac{\partial c_i}{\partial r_i} \right) \quad (30)$$

où q représente la quantité adsorbée, donnée par l'isotherme d'adsorption supposée linéaire :

$$q - q_o = H_i(c_i - c_{io}) - \delta_i(T - T_o) \quad (31)$$

En éliminant q des équations (III.30) et (III.31), on obtient :

$$(1 + H_i) \cdot \frac{\partial c_i}{\partial t} + \delta_i \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{D_i}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left(r_i^2 \frac{\partial c_i}{\partial r_i} \right) \quad (32)$$

Condition initiale : $c_i = c_{io}$ (33)

Conditions aux limites :

$$\text{- Symétrie au centre : } \left. \frac{\partial c_i}{\partial r_i} \right|_{r_i=0} = 0 \quad (34)$$

- Equilibre d'adsorption à la surface

$$\frac{1}{(c_{i\infty} - c_{i0})} \left[c_i \Big|_{r_i=R_i} - c_{i0} + \delta_{\mu i} (T - T_0) \right] = \frac{1}{(c_{p\infty} - c_{p0})} \left[c_p \Big|_{r_p=R_i} - c_{p0} + \delta_{\mu p} (T - T_0) \right] \quad (35)$$

III.1.2.1.2- Bilan de masse dans les macroparticules

$$\frac{\partial c_p}{\partial t} + n4\pi R_i^2 D_i \left. \frac{\partial c_i}{\partial r_i} \right|_{r_i=R_i} = \frac{D_p}{r_p^2} \frac{\partial}{\partial r_p} \left(r_p^2 \frac{\partial c_p}{\partial r_p} \right) + \delta_p \frac{D_p}{r_p^2} \frac{\partial}{\partial r_p} \left(r_p^2 \frac{\partial T}{\partial r_p} \right) \quad (36)$$

où n est le nombre de microsphères par unité de volume de la macrosphère, D_i et D_p sont les diffusivités massiques respectivement micro et macroparticulaire.

$$\text{Condition initiale : } c_p (r_p, 0) = c_{p0} \quad (37)$$

Condition aux limite :

$$\text{- Symétrie au centre : } \left. \frac{\partial c_p}{\partial r_p} \right|_{r_p=0} = 0 \quad (38)$$

III .1.2.1.3- Bilan de chaleur à travers le grain

Le transfert de chaleur par conduction thermique est supposé rapide à l'échelle du grain, la température est considérée homogène dans le grain mais pas constante dans le temps.

La température à l'intérieur des macroparticules est uniforme, une simple équation est nécessaire :

$$\rho c_s \frac{\partial T}{\partial t} - n4\pi R_i^2 D_i \left. \frac{\partial c_i}{\partial r_i} \right|_{r_i=R_i} \cdot q_{is} = \frac{\lambda}{r_p^2} \frac{\partial}{\partial r_p} \left(r_p^2 \frac{\partial T}{\partial r_p} \right) \quad (38)$$

Condition initiale : $T_p (r_p, 0) = T_o$ (39)

Conditions aux limites :

- Symétrie au centre : $\left. \frac{\partial T_p}{\partial r_p} \right|_{r_p=0} = 0$ (40)

- A l'interface entre le grain et l'adsorbant :

$$-\lambda \cdot \left. \frac{\partial T}{\partial r_p} \right|_{r_p=R_p} = h \cdot [T|_{r_p=R_p} - T] \quad (41)$$

Le système d'équations différentielles (32) - (41) constitue un système complet décrivant l'adsorption non-isotherme dans un grain bidispersé.

III.1.2.2- Adimensionnement

Les grandeurs adimensionnelles introduites sont :

$$C = \frac{c_p - c_{po}}{c_{p\infty} - c_{po}} ; w = \frac{c_i - c_{io}}{c_{i\infty} - c_{io}} ; \theta = \frac{T}{T_o} ; \tau = \frac{D_p \cdot t}{R_p^2} ; \psi = \frac{r_i}{R_i} ; \eta = \frac{r_p}{R_p}$$

$$\alpha = \frac{D_{ie} \cdot R_p^2}{D_p \cdot R_i^2} ; \beta = \alpha (1 - \varepsilon_p) \frac{(1 + H_i)(c_{i\infty} - c_{io})}{c_{p\infty} - c_{po}} ; k_i = \frac{\delta_i \cdot T_o}{(1 + H_i)(c_{i\infty} - c_{io})}$$

$$k_o = \alpha (1 - \varepsilon_p) \frac{\Delta H \cdot (1 + H_i)(c_{i\infty} - c_{io})}{\rho c_s T_o} ; a_p = \frac{\lambda}{\rho \cdot c_s} ; D_{ie} = \frac{D_i}{(1 + H_i)} ; L_e = \frac{a_p}{D_p}$$

$$B_i = \frac{h \cdot R_p}{\lambda} ; P_{np} = \frac{\delta_{np} \cdot T_o}{c_{p\infty} - c_{po}} ; P_{ni} = \frac{\delta_{ni} \cdot T_o}{c_{i\infty} - c_{io}} .$$

III.1.2.3- Equations adimensionnelles du modèle

En introduisant les grandeurs adimensionnelles dans les équations (32 à 41) nous obtenons un système d'équations adimensionnelles suivants :

Transfert de masse dans les micropores :

$$\frac{\partial w}{\partial \tau} - k_i \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\alpha}{\psi^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\psi^2 \frac{\partial w}{\partial \psi} \right) \quad (42)$$

Conditions initiales et aux limites :

$$w(\psi, 0) = 0 \quad (43)$$

$$\left. \frac{\partial w}{\partial \psi} \right|_{\psi=0} = 0 \quad (44)$$

$$w|_{\psi=1} = C \quad (45)$$

Transfert de masse dans les macropores :

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + \beta \cdot \left. \frac{\partial w}{\partial \psi} \right|_{\psi=1} = \frac{1}{\eta^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta^2 \frac{\partial c}{\partial \eta} \right) + \frac{P_{np}}{\eta^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta^2 \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \quad (46)$$

Conditions initiales et au limites :

$$c(\eta, 0) = 0 \quad (47)$$

$$\left. \frac{\partial c}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = 0 \quad (48)$$

$$c|_{\eta=1} - P_{np} (\theta|_{\eta=1} - 1) = 1 \quad (48)$$

Transfert de chaleur dans le grain :

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} - k_o \cdot \left. \frac{\partial w}{\partial \psi} \right|_{\psi=1} = \frac{L_e}{\eta^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta^2 \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \quad (49)$$

Conditions initiales et au limites :

$$\theta(\eta, 0) = 0 \quad (50)$$

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = 0 \quad (51)$$

$$-\left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\eta=1} = B_i [\theta|_{\eta=1} - 1] \quad (52)$$

III.1.2.4- Discrétisation des équations

Les équations aux dérivées partielles (42 à 52) peuvent être écrites sous une formulations mathématique approchée, par passage aux différences finies avec un schéma implicite.

Soit w_i^0 et θ_i^0 la concentration et la température dans les micropores à l'état initial au temps τ (exposant 0)

Après transformation de l'équation (42) en une relation implicite aux différences en utilisant l'expression centrée au noeud pour les dérivée première et seconde d'espace, la concentration au temps $\tau + \Delta\tau$ (exposant 1) s'exprime comme suit :

$$\frac{w_i^1 - w_i^0}{\Delta\tau} - k_i \frac{\theta_i^1 - \theta_i^0}{\Delta\tau} = \frac{2\alpha}{i\Delta\psi} \frac{w_i^1 - w_{i-1}^1}{\Delta\psi} + \alpha \frac{w_{i+1}^1 - 2w_i^1 + w_{i-1}^1}{\Delta\psi^2} \quad (53)$$

où $\Delta\psi$ désigne le pas d'espace dans la direction radiale dans les micropores du grain et $\Delta\eta$ dans les macropores .

L'équation (53) est remplacée par la relation aux différences suivante :

$$A_1 \cdot w_{i-1}^1 + D_1 \cdot w_i^1 + C_1 \cdot w_{i+1}^1 = B_1 \quad (54)$$

La même procédure pour les équations de transfert de masse dans les macropores et le transfert de chaleur dans le grain (46 et 49) :

$$A_2 \cdot C_{j-1}^1 + D_2 \cdot C_j^1 + C_2 \cdot C_{j+1}^1 + D_3 \cdot \theta_j^1 + C_3 \cdot \theta_{j+1}^1 = B_2 \quad (55)$$

$$A_4 \cdot \theta_{j-1}^1 + D_4 \cdot \theta_j^1 + C_4 \cdot \theta_{j+1}^1 = B_4 \quad (56)$$

où les coefficients des systèmes des équations sont résumés dans le tableau 1 et les deuxièmes termes (B_i) sont des valeurs de la matrice d'initialisation ou des valeurs calculées à l'itération précédente :

$$B_1 = w_i^0 + k_i \theta_i^0$$

$$B_2 = C_j^0 - 3\beta \frac{\Delta\tau}{\Delta\psi} (w_N^0 - w_{N-1}^0) \quad (57)$$

$$B_2 = \theta_j^0 + 3k_0 \frac{\Delta\tau}{\Delta\psi} (w_N^0 - w_{N-1}^0)$$

Tableau 1 : Coefficients des systèmes tridiagonaux

$A_1 = \frac{\alpha\Delta\tau}{\Delta\psi^2} \left(\frac{2}{i} - 1 \right)$	$C_1 = -\frac{\alpha\Delta\tau}{\Delta\psi^2}$	$D_1 = 1 - \frac{2\alpha\Delta\tau}{\Delta\psi^2} \left(\frac{1}{i} + 1 \right)$
$A_2 = \frac{\Delta\tau}{\Delta\eta^2} \left(\frac{2}{j} - 1 \right)$	$C_2 = -\frac{\Delta\tau}{\Delta\eta^2}$	$D_2 = 1 - \frac{2\Delta\tau}{\Delta\eta^2} \left(\frac{1}{j} + 1 \right)$
$A_3 = 0$	$C_3 = -\frac{P_{np}\Delta\tau}{\Delta\eta^2}$	$D_3 = \frac{2P_{np}\Delta\tau}{\Delta\eta^2} \left(1 - \frac{1}{j} \right)$
$A_4 = \frac{Le\Delta\tau}{\Delta\eta^2} \left(\frac{2}{j} - 1 \right)$	$C_4 = -\frac{Le\Delta\tau}{\Delta\eta^2}$	$D_4 = 1 - \frac{2Le\Delta\tau}{\Delta\eta^2} \left(\frac{1}{j} + 1 \right)$

Les systèmes d'équations discretisées (54, 55 et 56) sont des systèmes tridiagonaux où les variables w , C et θ sont des variables muettes représentant respectivement les concentrations dans les micropores et les macropores et la température dans le grain.

Les systèmes tridiagonaux sous forme matricielle sont traités par l'algorithme de Thomas ou TDMA (TriDiagonal -Matrix-Algorithm).

Algorithme de résolution :

Les étapes de la résolution des systèmes d'équations matricielles (53, 54 et 55) peuvent être résumées comme suit :

- 1- Initialisation des variables w , C et θ .
- 2- Résolution du système (53) pour trouver la valeur de concentration dans les micropores, (w_i).
- 3- Ensuite résolution du système (54) pour trouver la valeur la concentration dans les macropores, (C_j).
- 4- Résolution de du système (55) pour trouver la température dans le grain, (θ_j).
- 5- Réinitialisation des températures et des concentrations à partir du point 1 en incrémentant le pas de temps à $\tau + \delta\tau$

Les résultats numériques du problème sont représentés au (chapitre V).

Le programme est donné en Annexe 2.

III.2- Modélisation des transferts de chaleur et de masse dans le générateur

III.2- Introduction

La modélisation des transferts de chaleur et de masse au sein du générateur, en liaison avec le condenseur et l'évaporateur, est faite pour les phases d'adsorption-évaporation et de désorption-condensation du cycle de fonctionnement de la machine.

Le générateur, représenté par les figures IV.2 et IV.3 (chapitre IV), est instrumenté en mesure de température, de pression et de masse adsorbée.

Le modèle dynamique bidimensionnel retenu dans cette étude est représenté par l'équation d'énergie dont le terme source exprime le couplage entre la température et la masse sorbée locales.

La discrétisation et la résolution numérique du système d'équations du modèle sont conduites par une méthode de volume finis appliquée à un volume élémentaire cylindrique du générateur (figure III.5)

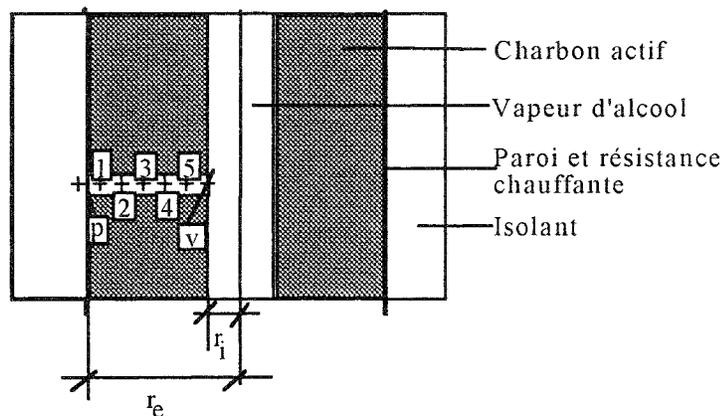


Figure III.5 Structure élémentaire du générateur
(p, 1, ..., 5, v) points de mesure des températures

III.2.1- Mise en équation du modèle

Pour établir l'équation d'énergie, on considère le couple de charbon actif-méthanol comme milieu unique équivalent dans le volume élémentaire.

Par ailleurs, on retient *les hypothèses* suivantes :

#- Le système est à symétrie cylindrique

- #- Le transfert de chaleur suivant la direction angulaire φ du cylindre est négligé.
- #- Le transfert de chaleur par convection volumique à l'intérieur du lit est négligé.
- #- Le flux de chaleur est à la fois radial et axial.
- #- Les propriétés physiques du charbonactif, sont calculées en tenant compte de la porosité. Les pores sont considérés vides de tout gaz non condensable.
- #- La conductivité thermique apparente du couple, λ^* , est fonction de la température.
- #- L'isolation thermique aux extrémités du cylindre est considérée parfaite.

III.2.1.1- Equation de l'énergie

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda^* r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda^* \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \sigma = (\rho c_p)^* \frac{\partial T}{\partial t} \quad (58)$$

σ est le terme source représentant la chaleur endothermique ou exothermique échangée dans le volume élémentaire pendant chaque phase du cycle de fonctionnement de la machine. Cette chaleur dégagée, lors de l'adsorption et absorbée lors de la désorption, est proportionnelle à la chaleur isostérique et au débit du fluide frigorigène .

$$\sigma = \rho_s \cdot q_{st} \cdot \frac{dm_{sor}}{dt} \quad (59)$$

La chaleur isostérique d'adsorption est donnée, à partir de sa définition, par :

$$q_{st} = L_v + \varepsilon - T \cdot \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right|_{m_{sor}} \quad (60)$$

où ε est le potentiel d'adsorption de Polanyi: $\varepsilon = R \cdot T \cdot \ln \left(\frac{P^o}{P} \right)$

Dans les deux phases du cycle, la cinétique de diffusion est le phénomène limitatif du transfert de matière dans le générateur. Le débit massique de sorption est approché par la relation [2]:

$$\frac{dm_{sor}}{dt} = D_t \cdot [m_{sor}^f - m_{sor}^{in}] \quad (61)$$

La diffusivité massique est donnée par une relation généralisée de type d'Arrhénius, de paramètres A_0 et A_1 [10]:

$$D_t = \exp\left(-\frac{A_1}{T} + A_o\right) \quad (62)$$

La masse sorbée est calculée à partir de l'équation de Dubinin-Radushkevich (D.R.), de paramètres m_o et B données par des travaux antérieurs [10] et [11]:

$$m_{\text{sor}}(T) = m_o \cdot \exp(-B \cdot \varepsilon^2) \quad (63)$$

III.2.1.2- Conditions initiales et aux limites

Conditions initiales (de chauffage)

A l'instant initial le charbon est à la température du milieu ambiant, la paroi du générateur est à une température imposée.

Conditions aux limites

les formes mathématiques des conditions aux limites sont :

- à la paroi interne du cylindre, la chaleur est transmise par conduction au charbon actif.

La densité de flux du chaleur échangé avec l'extérieur φ_e est donnée par :

$$\varphi_e = k_c (T_{\text{ex}} - T(r_b)) = -\lambda^* \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=r_b} \quad \text{où} \quad r = r_b \quad 0 \leq z \leq L \quad (64)$$

où k_c est la conductance thermique de contact paroi-charbon actif.

- transfert entre le charbon actif et la vapeur d'adsorbat, du côté de la grille de distribution.

$$\lambda^* \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=r_a} = h(T(r_a) - T_{\text{int}}) \quad \text{où} \quad r = r_a \quad 0 \leq z \leq L \quad (65)$$

La conductivité thermique apparente du charbon actif est donnée par la corrélation polynomiale suivante [12] :

$$\lambda^* = \sum_i a_i T^i \quad (66)$$

- aux extrémités $z = 0$ ou $z = L$ et $r_a \leq r \leq r_b$, on a :

$$0 = \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (67)$$

III.2.2- Discrétisation du système d'équations:

La méthode des volumes finis [13] permet une discrétisation conservative , et satisfait la conservation de masse et de l'énergie dans tous les volumes finis et donc à travers tous le domaine de calcul.

Elle permet un traitement plus correct des milieux hétérogènes et facilite la linéarisation des termes s'ils ne le sont pas, ce qui nous permet donc, d'obtenir un système d'équations algébriques, ou système discrétisé, dont les inconnues sont les valeurs de la grandeur cherchée en un nombre fini de points du domaine d'étude. Cet ensemble de points constitue le maillage du domaine.

Le domaine physique est divisé en un ensemble de petits volumes jointifs, appelés volumes de contrôles, chacun est désigné par un point situé en son centre.

Un exemple de maillage est illustré par la figure suivante (Figure III.6)

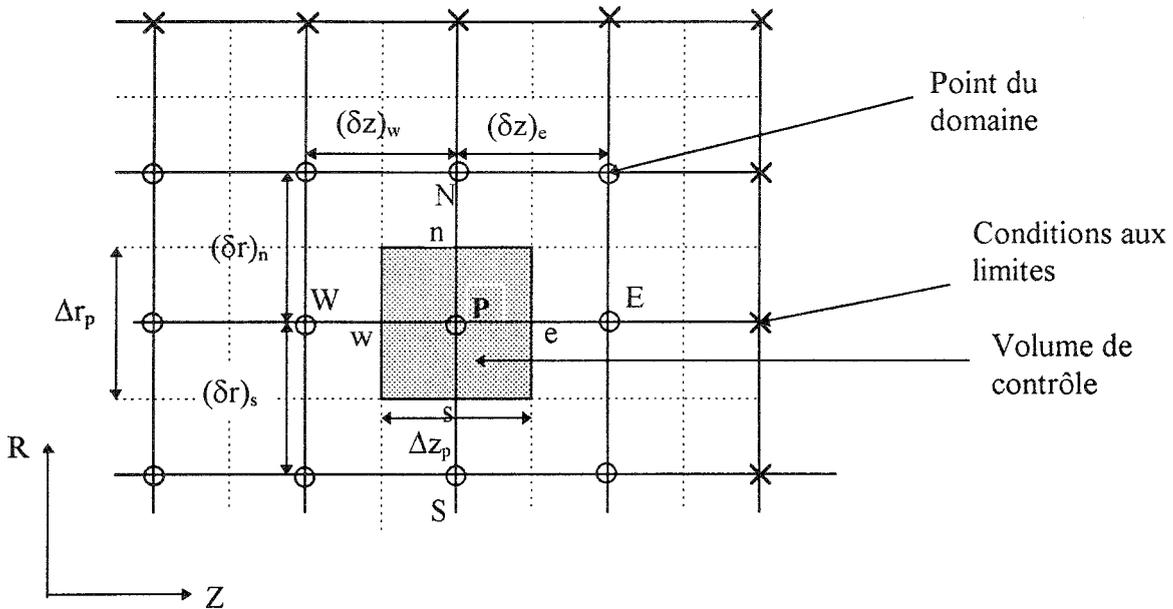


Figure III.6 : Maillage du domaine de calcul

Nous avons choisi un maillage rectangulaire $\Delta z * \Delta r$ du volume de contrôle.

Δz : côté du volume de contrôle dans la direction Z

Δr : côté du volume de contrôle dans la direction R

Les frontières du domaine coïncident avec les faces des volumes de contrôle, ce qui facilite l'incorporation des conditions aux limites pour toutes les variables.

Les centres des volumes de contrôle, représentés par de petits cercles, forment les principaux points de ce maillage. Les distances (δz et δr) séparant ces points dépendent du nombre de ceux-ci ; plus on augmente ce nombre plus les distances diminuent.

La recherche de solution numérique des équations aux dérivées partielles du problème, consiste à remplacer ses dernières par un système d'équations linéarisées dont la résolution détermine le champ de température et par conséquent de masse au point du maillage.

Les éléments de volume et de surface en un point de rayon r du schéma de discrétisation sont, (figure III.6) :

$$\Delta v = 2\pi r \Delta r \Delta z \tag{68}$$

$$\Delta A = 2\pi r \Delta r \tag{69}$$

L'équation de la chaleur discrétisée prend la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta v}{\Delta t} (\rho_p c_p T_p - \rho_p^o c_p^o T_p^o) = & a_n [f(T_n - T_p) + (1-f)(T_n^o - T_p^o)] \\ & - a_s [f(T_p - T_s) + (1-f)(T_p^o - T_s^o)] \\ & + a_e [f(T_e - T_p) + (1-f)(T_e^o - T_p^o)] \\ & - a_w [f(T_p - T_w) + (1-f)(T_p^o - T_w^o)] + \bar{\sigma} \cdot \Delta v \end{aligned} \tag{70}$$

avec

$$a_n = \frac{2\pi r_n \Delta z k_n}{(\delta r)_n} \quad \text{et} \quad a_s = \frac{2\pi r_s \Delta z k_s}{(\delta r)_s} \tag{71}$$

$$a_e = \frac{\Delta A k_e}{(\delta z)_e} \quad \text{et} \quad a_w = \frac{\Delta A k_w}{(\delta z)_w} \tag{72}$$

$$\bar{\sigma} = \sigma_e + \sigma_p [fT_p + (1-f)T_p^o] \quad \text{c'est le terme source linéarisé} \tag{73}$$

Le calcul présenté ci-dessus permet à la fois de résoudre l'équation de la chaleur par une méthode explicite ou par une méthode implicite [13].

Les résultats présentés (Chapitre V) ont été obtenus par une méthode explicite aux volumes finis. Pour résoudre le système d'équations nous avons considéré une température moyenne de surface mesurée expérimentalement et imposée.

Les équations discrétisées des conditions aux limites prennent la forme suivante :

- en $r = r_a$, $0 \leq z \leq L$

$$\frac{a_p^o}{2}(T_p - T_p^o) = a_n(T_n^o - T_p^o) + q_s + \frac{a_e}{2}(T_e^o - T_p^o) - \frac{a_w}{2}(T_p^o - T_w^o) \quad (74)$$

En faisant l'approximation :

$$a_p^o \approx a_p = \frac{\rho^o c_p^o \Delta v}{\Delta t} \quad (75)$$

q_s est le flux de chaleur par convection à travers la grille intérieure, calculé à partir de la formule.

$$q_s = h_{int} 2\pi r_a \Delta z (T_p^o - T_{int}^o) + (\sigma_c + \sigma_p T_p^o) \quad (76)$$

- en $r = r_b$, $0 \leq z \leq L$

$$\frac{a_p^o}{2}(T_p - T_p^o) = q_n - a_s(T_p^o - T_s^o) + \frac{a_e}{2}(T_e^o - T_p^o) - \frac{a_w}{2}(T_p^o - T_w^o) \quad (77)$$

q_n est le flux de chaleur échangé avec la paroi extérieure du générateur, calculé à partir de la formule

$$q_n = k_c 2\pi r_b \Delta z (T_{ext}^o - T_p^o) \quad (78)$$

- en $z = 0$, $r_a \leq r \leq r_b$

$$\frac{a_p^o}{2}(T_p - T_p^o) = q_w - \frac{a_s}{2}(T_p^o - T_s^o) + \frac{a_n}{2}(T_n^o - T_p^o) + a_e(T_e^o - T_p^o) \quad (79)$$

avec le flux de chaleur en tête du générateur nul (parois adiabatiques) on a $q_w = 0$

- en $z = L$, $r_a \leq r \leq r_b$

$$\frac{a_p^\circ}{2}(T_p - T_p^\circ) = q_e - a_w(T_p^\circ - T_w^\circ) + \frac{a_n}{2}(T_n^\circ - T_p^\circ) - \frac{a_s}{2}(T_p^\circ - T_s^\circ) \quad (80)$$

avec comme ci-dessus, $q_e = 0$

Les raccordements pour les effets de bord aux angles du générateur sont traités par une méthode similaire à celle exposée par les équations (74-80).

Le champs de température et de masse sorbée obtenus par résolution du système d'équations discrétisés doit vérifier le bilan calorifique dans le volume élémentaire pour chaque phase du cycle.

- en phase d'adsorption-évaporation :

$$\varphi_e = (m \cdot c_p)^* \cdot \frac{d\bar{T}}{dt} + m_s \cdot \frac{d}{dt} \left[m_{\text{sor}} \left\{ c_{p_v} (\bar{T} - T_v) - \bar{q}_{\text{st}} \right\} \right] \quad (81)$$

- en phase de désorption-condensation:

$$\varphi_e = (m \cdot c_p)^* \cdot \frac{d\bar{T}}{dt} + m_s \cdot \frac{d}{dt} [m_{\text{sor}} \cdot \bar{q}_{\text{st}}] \quad (82)$$

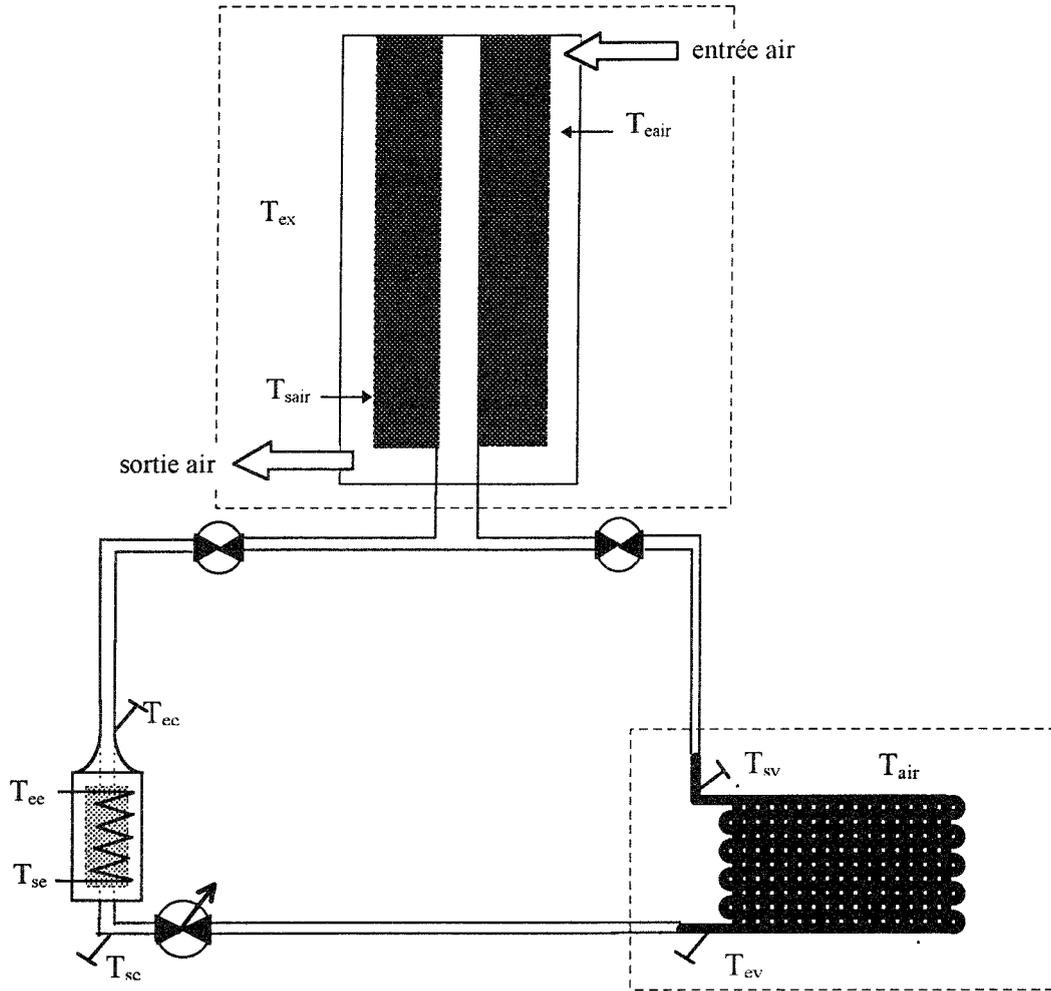
où $(m \cdot c_p)^* = m_s \cdot (c_{p_s} + m_{\text{sor}} \cdot c_{p_v})$ est la capacité calorifique équivalente, \bar{T} et \bar{q}_{st} les moyennes spatiales pondérées de la structure élémentaire du générateur.

III.3 - Modélisation du cycle de fonctionnement de la machine

En régime dynamique, l'étude du fonctionnement du système est conduite par la méthode de bilan de puissances calorifiques et frigorifiques échangées dans chaque composant du système.

III.3.1- Bilans des différents composants de la machine :

Les bilans calorifiques sont effectués, dans le cas du chauffage et du refroidissement du générateur par air pulsé.



Nomenclature

C : Chaleur spécifique de la composante
 E : efficacité
 M : masse des composants
 q : quantité du methanol adsorbée ou désorbée

T : température
 ΔH : chaleur isostérique

Indices

a : adsorption
 air : air ambiant
 ch : charbon actif
 c : condensation
 co : condenseur
 des : desorption
 eair : entrée air
 ee : entrée évaporateur

ev : évaporation
 ex : extérieur
 g : générateur
 m : methanol
 p : Chaleur spécifique
 sair : sortie air
 se : sortie eau
 sv : sortie évaporateur

Le générateur

Pendant la phase de désorption-condensation on a :

$$\dot{m}_{\text{air}} \cdot C_{p_{\text{air}}} \cdot E_g (T_{\text{ex}} - T_a) = M_{\text{ch}} \cdot (C_{\text{ch}} + q_{\text{des}} \cdot C_{p_m}) \cdot \frac{d T_{\text{ch}}}{d t} + M_g \cdot C_g \cdot \frac{d T_g}{d t} + \frac{d (q_{\text{des}} \cdot M_{\text{ch}} \cdot \Delta H_a)}{d t} \quad (83)$$

Pendant la phase d'adsorption-évaporation on a :

$$\dot{m}_{\text{air}} \cdot C_{p_{\text{air}}} \cdot E_g (T_{\text{ex}} - T_a) = M_{\text{ch}} \cdot (C_{\text{ch}} + q_a \cdot C_{p_m}) \cdot \frac{d T_{\text{ca}}}{d t} + M_g \cdot C_g \cdot \frac{d T_g}{d t} + \frac{d (q_a \cdot M_{\text{ch}} \cdot \Delta H_a)}{d t} \quad (84)$$

Dans les deux équations précédentes, les termes à gauche des égalités représentent les puissances échangées avec l'air dans le générateur d'efficacité E_g . Les deux premiers termes à droite de l'égalité expriment le bilan de chaleur sensible du couple, et les derniers termes désignent la puissance calorifique de désorption ou d'adsorption requise pendant le cycle.

Le condenseur

$$M_{\text{co}} \cdot C_{\text{co}} \cdot \frac{d T_c}{d t} + \dot{m}_{\text{eau}} \cdot C_{p_{\text{eau}}} \cdot E_{\text{co}} \cdot (T_{\text{ee}} - T_{\text{se}}) = \dot{m}_{\text{md}} \cdot [L(T_c) + C_{p_m} \cdot (T_g - T_c)] \quad (85)$$

Le premier terme à gauche est relatif à la chaleur sensible du condenseur, et le deuxième terme représente la chaleur transférée à l'eau de refroidissement. Le terme à droite de l'égalité exprime la chaleur latente de condensation et du refroidissement de l'adsorbat venant du générateur.

L'évaporateur

Deux types d'évaporateurs de refroidissement l'eau et de l'air ont été essayés dans l'installation de.

1^{er} Cas : Evaporateur ailette pour le refroidissement d'eau (13 litres) de la chambre froide

$$M_{\text{eau}} \cdot C_{p_{\text{eau}}} \cdot \frac{d T_{\text{eau}}}{d t} + \dot{m}_m \cdot C_{p_m} \cdot (T_c - T_{\text{ev}}) = \dot{m}_m \cdot L(T_e) + M_{\text{ev}} \cdot C_{\text{ev}} \cdot \frac{d T_{\text{ev}}}{d t} \quad (86)$$

2^{er} Cas : Evaporateur ailette pour le refroidissement de l'air de la chambre froide (0,063 [m³]).

$$M_{\text{air}} \cdot C_{p_{\text{air}}} \cdot \frac{d T_{\text{air}}}{d t} + \dot{m}_m \cdot C_{p_m} \cdot (T_c - T_{\text{ev}}) = \dot{m}_m \cdot L(T_e) + M_{\text{ev}} \cdot C_{\text{ev}} \cdot \frac{d T_{\text{ev}}}{d t} \quad (87)$$

3^{er} Cas : Evaporateur coaxial à circulation d'eau.

$$\dot{m}_{\text{eau}} \cdot C_{p_{\text{eau}}} \cdot E_{\text{ev}} \cdot (T_e - T_{\text{ev}}) + \dot{m}_m \cdot C_{p_m} \cdot (T_c - T_{\text{ev}}) = \dot{m}_m \cdot L(T_e) + M_{\text{ev}} \cdot C_{\text{ev}} \cdot \frac{d T_{\text{ev}}}{d t} \quad (88)$$

Le premier terme à gauche de l'égalité représente l'effet frigorifique produit, et le deuxième terme est la chaleur sensible du condensat venant du condenseur. Le premier terme à droite de l'égalité est la chaleur latente de vaporisation, et le deuxième terme est la chaleur sensible de l'évaporateur.

III.3.2- Efficacité des échangeurs et coefficient de performance

Efficacité des échangeurs :

L'écoulement des fluides dans les échangeurs est à contre-courant avec changement de phase.

$$E = \frac{(T_e - T_s) \cdot \dot{m}_m \cdot C_{p_m}}{(T_e - T_{ee}) \cdot \left\{ \dot{m} \cdot C_p \right\}_{\min}} \quad \text{ou} \quad E_i = 1 - \exp \left[\frac{U_i \cdot S_i}{\left(\dot{m} \cdot C_p \right)_{\min}} \right] \quad (89)$$

$$\text{où } \left(\dot{m} \cdot C_p \right)_{\min} = \text{Min} \left(\dot{m}_m \cdot C_{p_m}, \dot{m}_{\text{eau}} \cdot C_{p_{\text{eau}}} \right)$$

Coefficient de performance de l'installation

Le coefficient de performance réel de l'installation est calculé à partir de la relation de définition :

$$\text{COP}_f = \frac{Q_{ev}}{Q_g}$$

A l'équilibre, les puissances calorifiques échangées sont données par :

$$\dot{Q}_g = \begin{cases} \dot{m}_{\text{air}} \cdot C_{\text{pair}} \cdot (T_{\text{ea}} - T_{\text{sa}}) = \dot{m}_{\text{air}} \cdot C_{\text{pair}} \cdot E_g \cdot (T_{\text{ea}} - T_{\text{ch}}) \\ U \cdot I^2 - \dot{Q}_{\text{dé p é r d i t i n}} \end{cases} \quad (89)$$

Références

- [1] : **L.K. LEE, D.M. RUTHVEN**, « Analysis of thermal effect in adsorption rate measurement », J.Chem. Soc. Faraday Trans. I, Vol. 75, pp. 2406-2422, (1979).
- [2] : **K. CHIHARA, M. SUZUKI**, "Control of micropore diffusivities on molecular sieve carbon by deposition of hydrocarbons ", Carbone, Vol.17, pp.339, (1979).
- [3] : **A. BRUNOVSKA, V. HLAVACEK, J. ILAVSKY, J. VALTYNI**, " An analysis of nonisothermal one-component sorption in a single adsorbent particle ", Chemical Engng. Science, Vol. 9, pp. 1385-1391, (1978).
- [4] : **HAUL, STREHMING**, " Nonisothermal sorption kinetics in porous adsorbents ", J. Colloid Interface Sci., Vol. 97, pp. 348-355, (1984).
- [5] : **J. ILAVSKY, A. BRUNOVSKA, V. HLAVACEK**, " Experimental observation of temperature gradients occurring in a single zeolithe pellet ", Chemical Engng. Science, Vol. 35, pp. 2475-2479, (1980).

- [6] : **L.M. SUN, F. MEUNIER**, " A detailed model for nonisothermal sorption in porous adsorbents ", Chem. Engng. Sci., Vol. 42, N° 75, pp. 1585-1593, (1987).
- [7] : **E. RUCKENSTEIN, A.S. VAIDYANATHAN, R. YOUNGQIST**, " Sorption by solids with bidisperse pore structures ", Chem. Engng. Sci., Vol. 26, pp. 1305-1318, (1971).
- [8] : **M. DUBININ, F. STOECKLI**, J. Colloid Interface Sci., Vol.75, pp. 34, (1980).
- [9] : **L.M. SUN, F. MEUNIER**, " Nonisothermal adsorption in a bidisperse adsorbent pellet ", Chem. Engng. Sci., Vol. 42, N° 12, pp. 2899-2907, (1987).
- [10] **R. BOUSSEHAIN**, "Caractérisation thermostatique et cinétique des phénomènes d'adsorption désorption de couples charbons actifs - alcool ", Thèse de Doctorat d'Etat ès Sciences INPL Nancy, (juin 1986).
- [11] **LUO LINGAI**, "Etude thermodynamique et thermique de machine à cycle inverse à adsorption", Thèse de Doctorat de l'INPL Nancy (Nov. 1991).
- [12] **L.C. ONYÉBUEKÉ**, "Contribution à l'étude des transferts de chaleur au générateur de machines trithermes à adsorption ", Thèse de Doctorat de l'INPL Nancy (déc. 1989).
- [13] **S.V. PATANKAR** " Numérical heat transfer and fluid Flow ", Hemisphere publishing corporation, New York, Washington, Philadelphia, London, 1980

CHAPITRE IV

DISPOSITIF EXPERIMENTAL

CHAPITRE IV

DISPOSITIF EXPERIMENTAL

SOMMAIRE DU CHAPITRE IV

IV .1- Installation expérimentale	88
IV .1.1 - Générateur à charbon actif	88
IV .1.2 - Condenseur	90
IV .1.3 - Evaporateur	90
IV .1.4 - Bouteille d'introduction	90
IV .1.5 - Système de chauffage	91
IV .1.6 - Système de pompage à vide	91
IV .1.7 - Les capteurs de mesure	91
IV .2- Instrumentation	93
IV .2.1- Mesure de pressions	93
IV .2.2- Mesure de flux	93
IV .2.3- Mesure des températures	93
IV .2.4- Mesure de la masse d'alcool cyclée	94
IV .3- Etalonnage des capteurs	94
IV .3.1- Etalonnage du capteur de force	94
IV .3.2- Etalonnage des capteurs de pression	97
IV .3.3- Etalonnage des thermocouples	98
IV .4- Station d'acquisition	98
IV .5- Préparation préliminaire de l'installation	99
IV .6- Conclusion partielle	103

Nomenclature du chapitre IV

M	effort de traction traduit en poids	[kg]
P_g	pression dans le générateur	[hPa]
$P_{réf}$	pression de référence	[hPa]
$T_{réf}$	température de référence	[K]
V	tension de sortie des capteurs de pression	[V]

IV .1- Installation expérimentale

La machine à froid à adsorption à cycle intermittent étudiée est illustrée par la figure IV-1. Ce prototype de laboratoire est fortement instrumenté pour le suivi des différents paramètres de fonctionnement des composants de l'installation, qui sont :

- Générateur à charbon actif, absorbeur-désorbeur.
- Un condenseur, refroidi par circulation d'eau.
- Un évaporateur à tubes et ailettes et un évaporateur coaxial.
- Des capteurs de mesure (température, pression, débit, masse sorbée).
- Des vannes manuelles d'arrêt et de laminage.
- Un groupe de pompage à vide.
- Une centrale d'acquisition, pilotée par Labtech Notebook.

IV .1.1 - Générateur à charbon actif

Le générateur à charbon actif (figure IV-1) est l'élément essentiel de la machine, il joue le rôle du compresseur dans une machine frigorifique à compression.

De forme cylindrique, le générateur a un diamètre intérieur de 60 mm, une longueur de 1060 mm et comporte une grille cylindrique axiale de 20 mm de diamètre et de 950 mm de longueur. Ce dispositif permet de maintenir le charbon actif entre la grille et le corps du générateur et facilite la diffusion d'alcool dans le lit poreux.

Le générateur est raccordé au reste de l'installation par un raccord T soudé à la bride inférieure, par où transitent les vapeurs d'alcool en adsorption ou en désorption sur le charbon actif.

L'évolution des températures de sorption est suivie par un ensemble de six thermocouples implantés longitudinalement et radialement au centre du générateur.

Ces thermocouples sont raccordés, à travers un passage verre-métal soudé dans la bride supérieure et une prise Jeager, à la centrale d'acquisition.

L'étanchéité de l'ensemble est assurée par des joints métalliques et des joints Vitons.

Le charbon actif utilisé dans le générateur est du type AC35/3 en grains cylindriques de diamètre 3,5 mm, commercialisé par la société CECA.

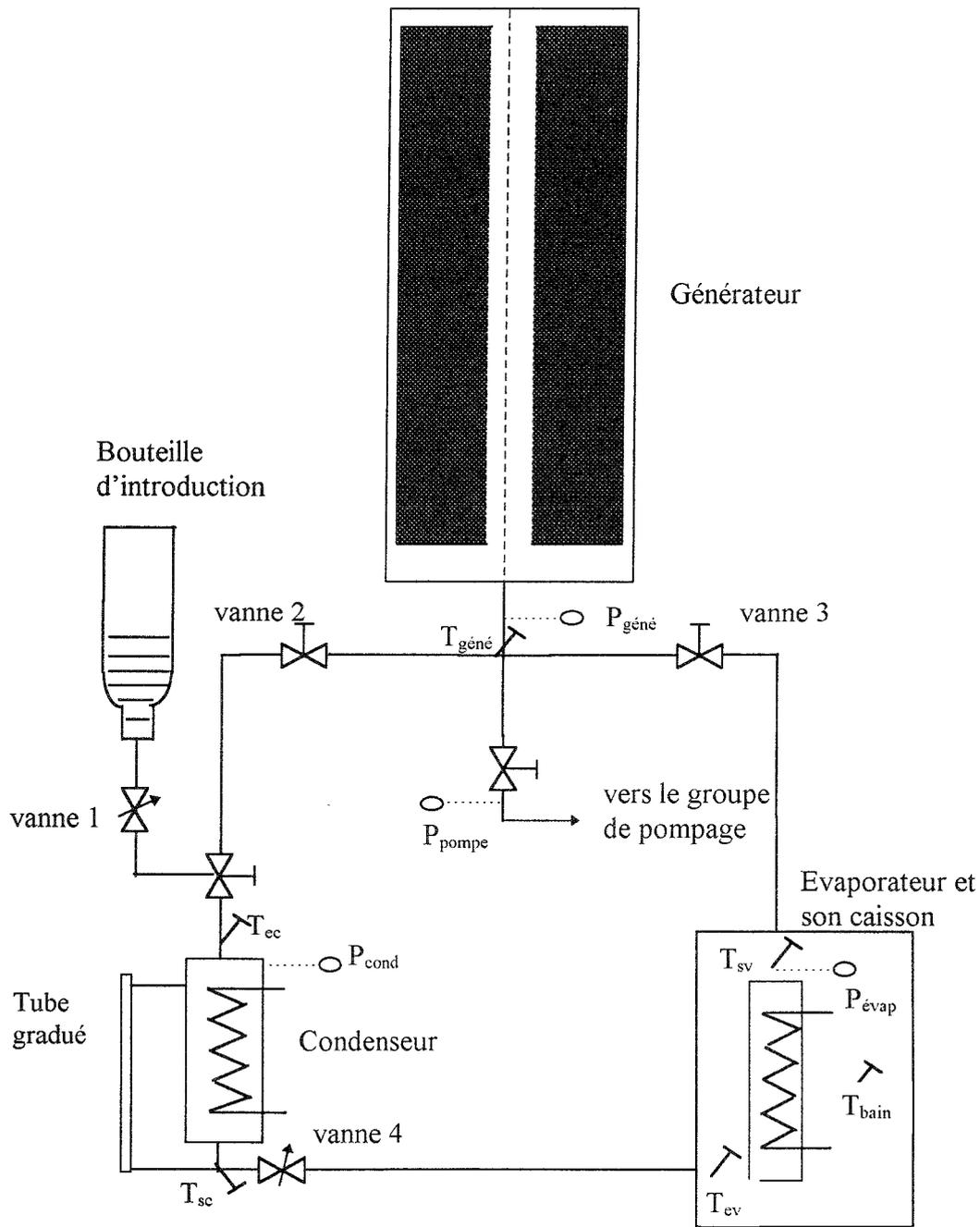


Figure IV-1: Schéma de l'installation expérimentale

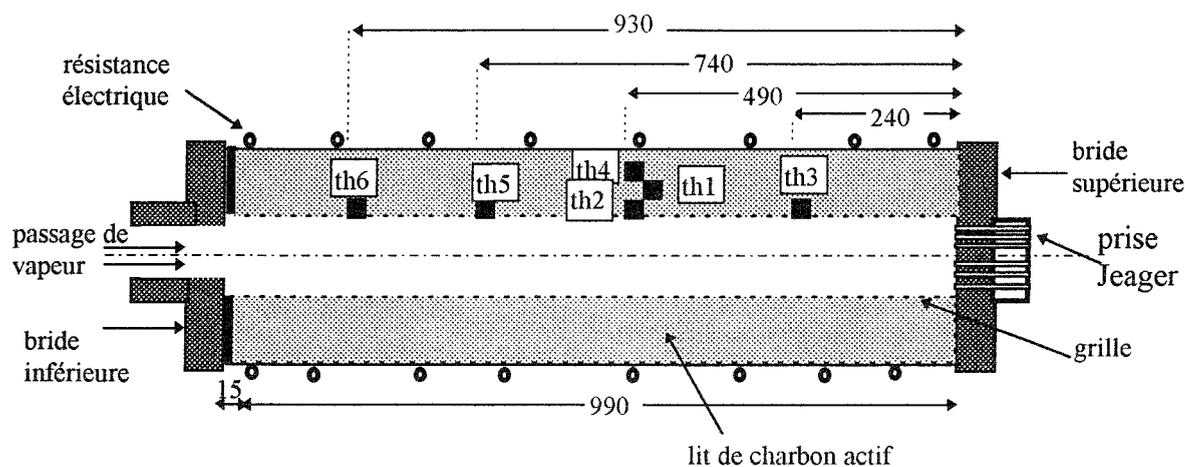


Figure IV-2 : position des thermocouples dans le générateur

IV .1.2 - Condenseur

Le condenseur, de forme cylindrique, à double paroi, et à refroidissement par circulation d'eau froide, a un volume utile de 0,52 litre. Celui-ci est équipé d'un dispositif d'introduction et de mesure de niveau de l'alcool condensé.

A la partie inférieure du condenseur, une vanne de laminage permet de régler la détente du condensat lors de son évaporation.

IV .1.3 - Evaporateur

L'évaporateur est à faisceaux de tubes et ailettes. Il comporte 175 ailettes et quatre passages de tubes d'une surface totale d'échange de 3,22 [m²].

Celui-ci est placé dans une chambre froide de volume utile de 0,063 [m³], isolée de l'extérieur par de la mousse de polyuréthane expansé, l'accès se faisant par la partie supérieure.

Un deuxième évaporateur coaxial a été utilisé dans l'installation ; celui-ci utilise un fluide caloporteur circulant en circuit fermé, refroidi par l'évaporation de l'adsorbat.

IV .1.4 - Bouteille d'introduction

La bouteille d'introduction, d'un litre de volume, sert à la préparation de la quantité nécessaire d'alcool à cycler et à son introduction dans l'installation.

Après avoir dégazé l'alcool dans un groupe de pompage, la bouteille est raccordée au condenseur par un système de brides et joints, une vanne d'arrêt permet alors l'introduction de l'adsorbat dans l'installation.

IV .1.5 - Système de chauffage

Deux types de sources de chaleur ont été utilisés pour la désorption de l'alcool :

- Système de chauffage électrique :

La surface extérieure du générateur est entourée d'un élément chauffant à résistance électrique (FCI-T) permettant d'obtenir un flux maximum de 750 [w/m²].

L'élément chauffant est enroulé autour du générateur de manière à maintenir une répartition uniforme de la température, le nombre de tours ainsi réalisé est de 39 pour un pas de 25 [mm] au centre et de 12,5 [mm] à 200 [mm] des brides.

Pour minimiser les pertes de chaleur pendant la phase de désorption, le générateur est isolé de l'extérieur par un isolant en laine de verre.

- Système de chauffage aéraulique :

Ce type de chauffage est utilisé pour simuler un chauffage par récupération d'énergie provenant de gaz de combustion. Il utilise un flux d'air chaud pulsé dans l'espace annulaire entre un conduit et le générateur (Figure IV-3). Ce système est réglable en température et en vitesse d'air pulsé.

IV .1.6 - Système de pompage à vide

Le système comprend une pompe à palettes avec un piège pour éviter la diffusion de vapeur d'alcool vers le groupe de pompage. Un filtre en Makrolon protège le groupe de pompage des poussières pouvant provenir du générateur au cours du dégazage. La pompe à palettes a un grand débit de pompage 22,4 [m³/h] permet d'obtenir un vide de 3.10⁻³ [hPa].

IV .1.7 - Les capteurs de mesure

Des capteurs de mesure des grandeurs physiques de fonctionnement du prototype ont été installés sur les différents composants de la machine afin de pouvoir déterminer :

- Les grandeurs, les pressions et les températures.
- Les flux de chaleur échangés au cours du cycle.
- La masse d'adsorbat cyclé.

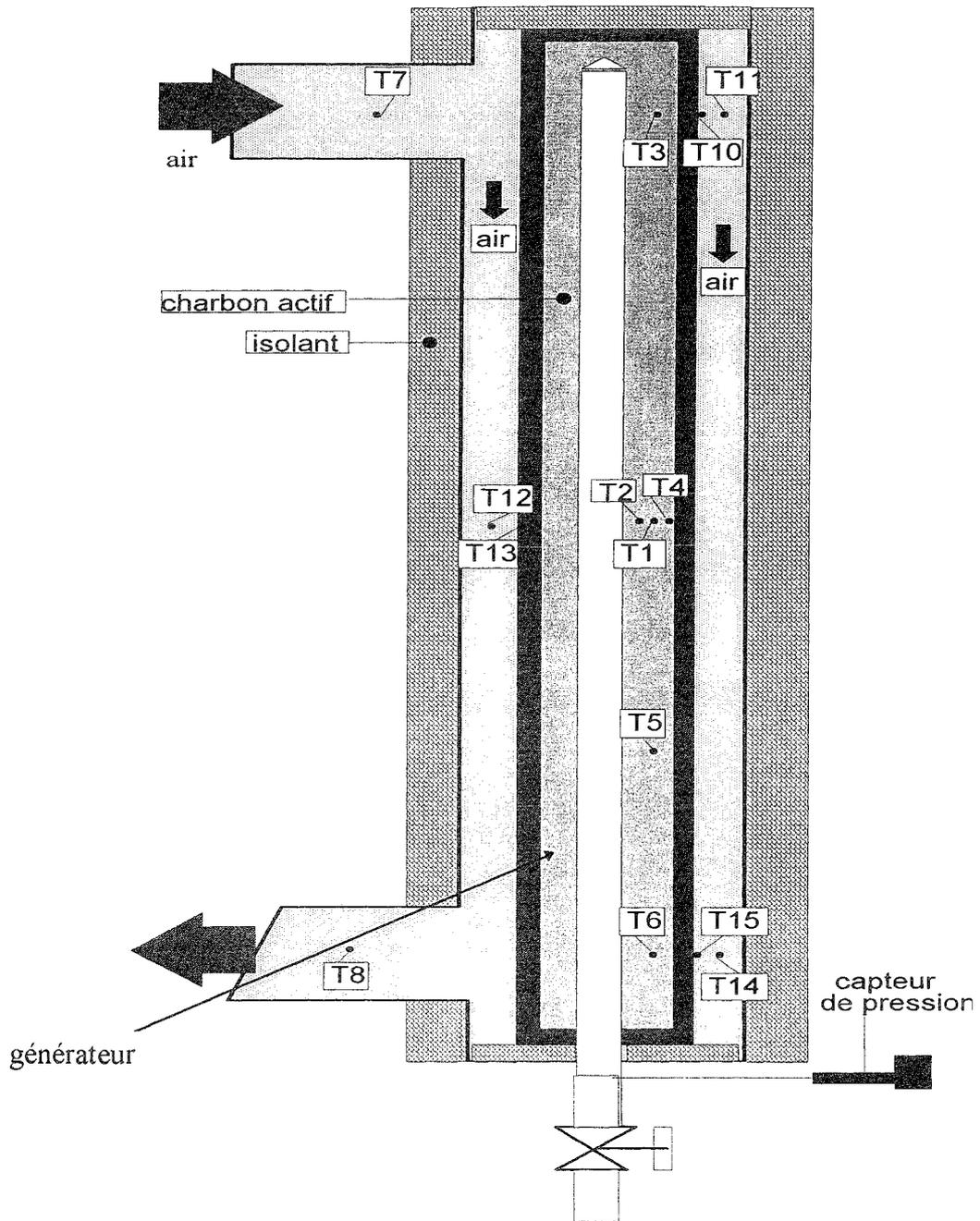


Figure IV-3 : schéma du générateur avec un système de chauffage à air chaud

IV .2- Instrumentation

IV .2.1- Mesure de pressions :

Pour mesurer les pressions à l'intérieur du circuit de vide et dans le prototype, trois types de capteurs de pression ont été utilisés dans l'installation

- un manomètre à convection pour la mesure du vide propre dans la gamme de 10^{-3} à 1000 [hPa].
- des manomètres à membrane pour mesurer la pression du gaz dans le circuit du prototype.
- des jauges à thermocouples pour contrôler le niveau de vide du groupe de pompage.

La pression de vapeur est mesurée en trois endroits du circuit :

- *- en sortie (ou entrée) du générateur, à l'aide d'un capteur de pression DRUCK
- *- en entrée du condenseur et en sortie de l'évaporateur à l'aide de deux capteurs de pression ALCATEL

IV .2.2- Mesure de flux

Un fluxmètre à thermoélément est placé sur la surface externe isolée du générateur afin de mesurer les pertes thermiques superficielles nécessaires à la détermination du coefficient d'échange surfacique. La sensibilité du fluxmètre, donnée par le constructeur est de 480 [μ V/W].

IV .2.3- Mesure des températures

Au minimum douze thermocouples de type K au minimum sont utilisés pour mesurer les températures de fonctionnement des composants de la machine (figures IV-1 et IV-2):

- un thermocouple au moins est placé à la surface extérieure du générateur.
- six thermocouples, placés à l'intérieur du générateur permettent de mesurer les températures de sorption (dans les sens axial et radial).
- cinq autres thermocouples servent à mesurer les autres températures :
 - * - entrée et sortie condenseur
 - * - entrée et sortie évaporateur
 - * - le milieu ambiant de la chambre froide.

IV .2.4- Mesure de la masse d'alcool cyclée

Pour mesurer en continu la masse d'alcool cyclée dans le générateur, on dispose d'un peson à cellule d'effort MECALIX de 1,5 [daN] avec le conditionneur DIGITEC 2840A à 2000 points.

L'ensemble assure une précision de 3‰ et dispose d'une sortie analogique de 0-10 [V].

IV .3- Etalonnage des capteurs

IV .3.1- Etalonnage du capteur de force

Pour suivre en continu l'évolution de la masse sorbée, le générateur est suspendu au peson par la bride supérieure d'un côté et est connecté, de l'autre côté, au reste du circuit de l'installation par un soufflet métallique (figure IV-4a).

Le degré de liberté ainsi acquis par le générateur permet, en prenant les précautions expérimentales nécessaires, de suivre l'évolution de la masse sorbée.

Une étude de sensibilité du capteur de force à la température et à la pression dans le générateur vide muni du soufflet métallique a été faite. Les résultats d'étalonnage in situ du peson sont consignés dans les tableaux I et II :

Tableau I : Etalonnage du capteur de force à 22 [°C]

<i>Pg [hPa]</i>	0,1	1,5	3,1	13,4	24	50	81,6	110	151,5	200
<i>M [kg]</i>	0,507	0,465	0,463	0,451	0,440	0,406	0,368	0,350	0,320	0,317
<i>Pg [hPa]</i>	235	300	360	416	515	606	720	810	912	972
<i>M [kg]</i>	0,276	0,222	0,183	0,157	0,125	0,101	0,071	0,039	0,010	0

Le tableau I donne l'effet de la pression dans le générateur à la température ambiante de 22[°C], sur l'effort de traction de la cellule, en tenant compte de la compression du soufflet métallique sous l'influence de la différence entre la pression atmosphérique à l'extérieur et du vide dans le générateur.

L'effort de traction est traduit en poids, M, représentée par la figure VI- 4b :

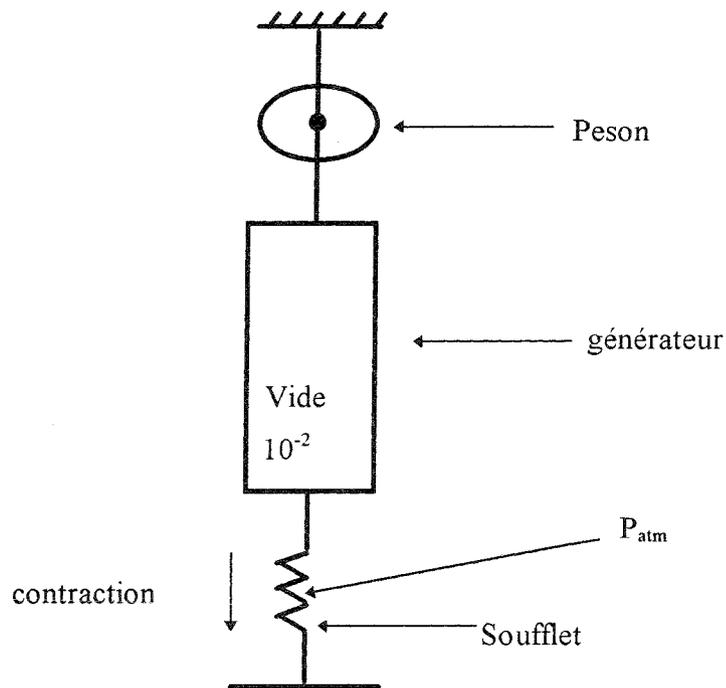


Figure IV-4a : Schéma décrivant la disposition du capteur de force "Peson"

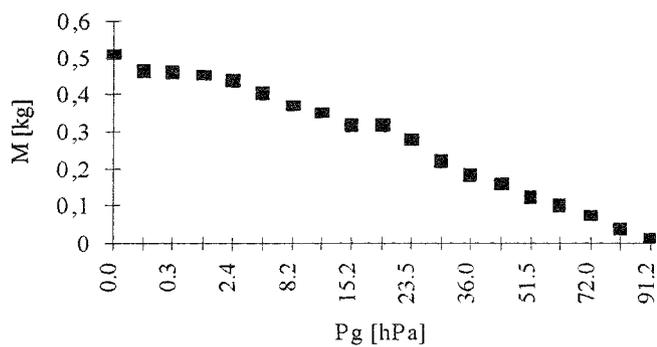


Figure IV-4b : étalonnage du Peson en fonction de la pression

Le lissage des données du tableau I par une loi de régression linéaire donne :

$$M = -28,335P_g + 0,5608 \quad (1)$$

où M et P_g sont respectivement exprimés en [kg] et en [hPa].

La sensibilité du dispositif à la température moyenne du générateur a été étudiée. Le tableau II donne quelques résultats significatifs obtenus pour trois températures de référence 21[°C], 55[°C] et 70[°C].

Tableau II : Sensibilité du capteur de force en fonction de la température et la pression

<i>Tréf</i> 21[°C]	<i>Pg</i> [hPa]	1	5	25	73	125	175	300	473	546	778	984
<i>Tréf</i> 21[°C]	<i>M</i> [kg]	0,3070	0,3059	0,2996	0,2842	0,2679	0,2522	0,2137	0,1589	0,1360	0,0640	0
<i>Tréf</i> 55[°C]	<i>Pg</i> [hPa]	0,8	10	25	73	145	198	299	502	625	725	984
<i>Tréf</i> 55[°C]	<i>M</i> [kg]	0,3097	0,3046	0,2999	0,2851	0,2626	0,2460	0,2187	0,1535	0,1380	0,0824	0
<i>Tréf</i> 70[°C]	<i>Pg</i> [hPa]	1	10	25	75	149	200	300	500	600	703	970
<i>Tréf</i> 70[°C]	<i>M</i> [kg]	0,3085	0,3052	0,2999	0,2836	0,2605	0,2439	0,2125	0,1499	0,1188	0,859	0

L'effort de traction en fonction de la pression , paramétré en température est représenté par la figure IV-5 :

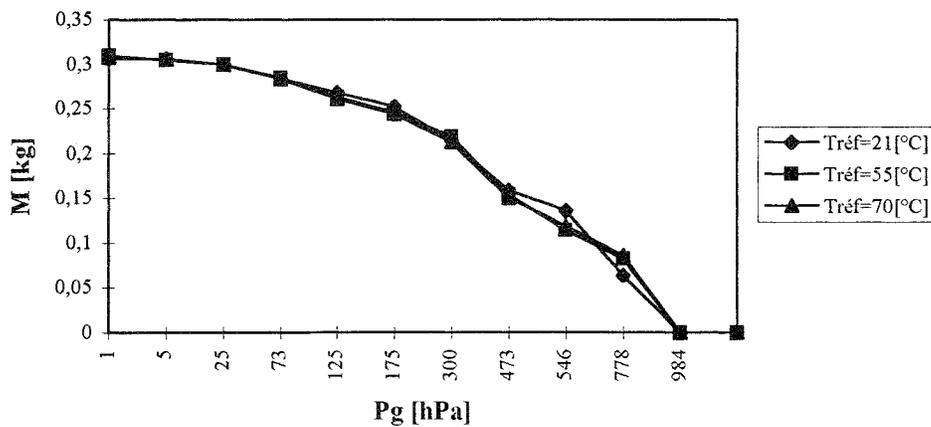


Figure IV -5 : sensibilité du capteur de force à la température

On constate que les effets des fuites thermiques par conduction sur la dilatation du soufflet sont négligeables. Les efforts qui en résulteraient sur le capteur de force induiraient une erreur inférieure à la précision de mesure du peson.

La relation de corrélation des données du tableau II donne :

$$M = -0,002P_g + 0,0625P_g - 0,0853 \quad (2)$$

IV .3.2- Etalonnage des capteurs de pressions

Les capteurs de pression ont été étalonnés à l'aide d'un manomètre absolu KAMMERER dans une gamme de pression de 10^{-2} [hPa] à 100 [hPa] et d'un manomètre à mercure en U au delà de 100 [hPa].

Les étalonnages sont effectués dans des conditions de température et de pression connues.

Ainsi, à la température ambiante de 20 [°C] et à la pression atmosphérique de 987 [hPa], les figures (IV-6 et 7) représentent les courbes d'étalonnages de deux capteurs de pression DRUCK et ALCATEL

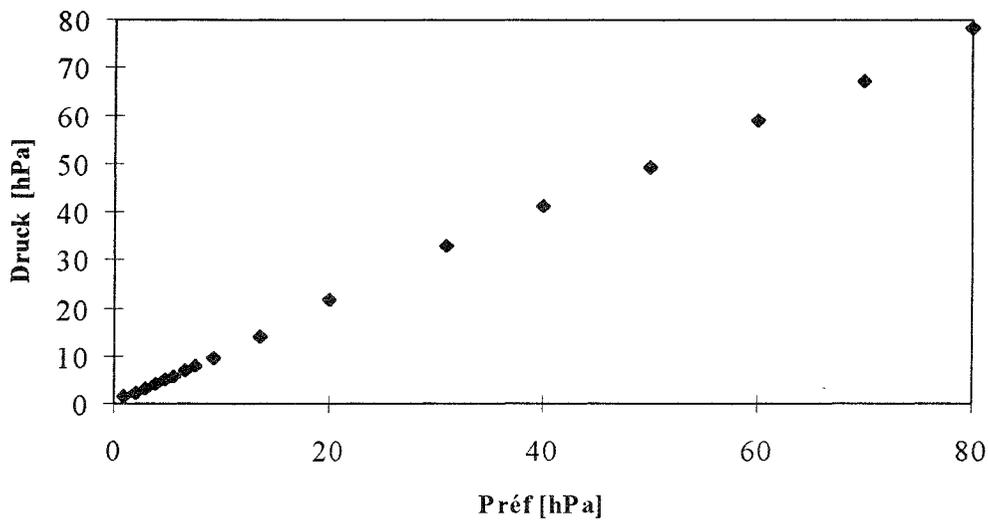


Figure IV -6 : étalonnage du capteur de pression DRUCK

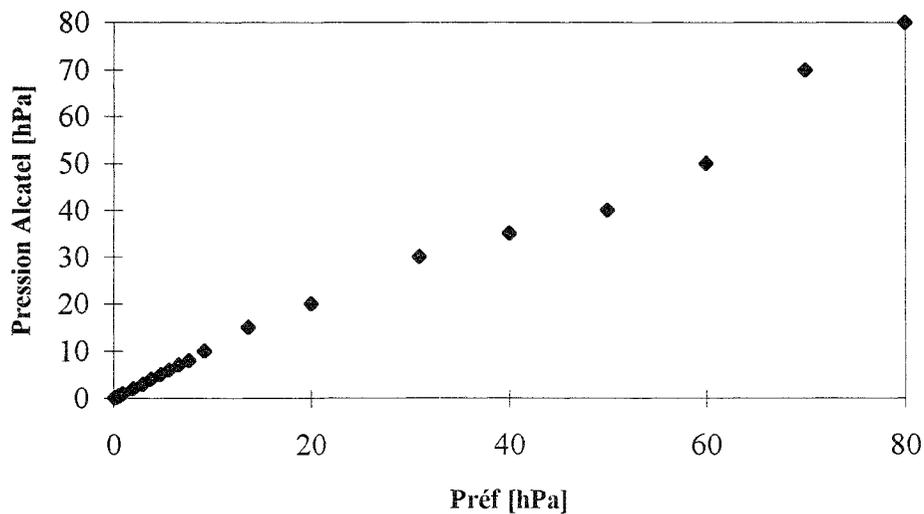


Figure IV -7 : étalonnage du capteur de pression ALCATEL

Le lissage des données expérimentales par une loi de régression linéaire permet de représenter les relations d'étalonnage des capteurs de pression :

Pour le Druck:

$$P_{\text{Druck}} [\text{hPa}] = 0,9718P_{\text{réf}} [\text{hPa}] + 0,829 \quad (3)$$

Pour l'Alcatel:

$$P_{\text{Alc}} [\text{hPa}] = 0,9342P_{\text{réf}} [\text{hPa}] + 0,1793 \quad (4)$$

Les conditionneurs des capteurs de pression ont les caractéristiques suivantes :

- Druck, 0 - 10 [V] pour 0 - 1500 [hPa].
- Alcatel, 0 - 10 [V] pour 0 - 1000 [hPa].

Les pressions mesurées par les capteurs sont alors exprimées en fonction de la tension de sortie V, enregistrée par la station d'acquisition :

$$\text{- Pour le Druck : } P [\text{hPa}] = 1,54V[\text{mV}] - 0,853 \quad (5)$$

$$\text{- Pour l'Alcatel : } P [\text{hPa}] = 0,107V[\text{mV}] - 0,192 \quad (6)$$

IV .3.3- Etalonnage des thermocouples

Les thermocouples ont été étalonnés, in situ de la chaîne d'acquisition, par rapport à un thermomètre à résistance de platine (KEITHLEY) relié à une électronique de mesure dont la précision absolue est de $\pm 0,1^\circ\text{C}$

Les forces électromotrices engendrées par les thermocouples sont conditionnées par des modules 5B d'Analog Device de $\pm 0,05\%$ de précision.

Le domaine de température exploré va de $-16 [^\circ\text{C}]$ à $0 [^\circ\text{C}]$ et de $1 [^\circ\text{C}]$ à $100 [^\circ\text{C}]$ par utilisation respective de bains de carboglace et d'eau thermostatée (Tableau IV).

La précision totale de mesure de température, sur toute la chaîne d'acquisition, est de $\pm 0,2$ à $\pm 0,5 [^\circ\text{C}]$ dans le cas le plus défavorable, correspondant au domaine exploré de -15 à $140 [^\circ\text{C}]$.

Tableau IV : étalonnage des thermocouples en fonction des tensions

$T_{\text{réf}} [^\circ\text{C}]$	-16	-10,1	-4,5	0	5	10	26,6	31,2	41,5
$V [\text{mV}]$	0,26	0,281	0,298	0,315	0,332	0,34	0,374	0,413	0,444
		$T_{\text{réf}} [^\circ\text{C}]$	51,5	60,9	75,1	90,4	99,6		
		$V [\text{mV}]$	0,481	0,518	0,571	0,627	0,654		

La linéarisation des données expérimentales d'étalonnage permet d'exprimer la température réelle par :

$$T [^{\circ}\text{C}] = 291,17V[\text{mV}] - 90,32 \quad (7)$$

IV .4- Station d'acquisition

Les capteurs de pression, de température, de flux et de masse, dotés d'une sortie analogique, sont branchés sur une centrale d'acquisition permettant la lecture et l'enregistrement des mesures.

La station est composée d'un micro-ordinateur, d'une carte d'acquisition A/N et d'une centrale composée d'une carte support DATA TRANSLATION-EZ avec des bornier et des modules B37 et B41 d'ANALOG DEVICE pour le conditionnement des signaux en température et en tension.

La station d'acquisition est pilotée par le logiciel graphique LABTECH NOTEBOOK qui permet de programmer les voies de sorte qu'elles soient scrutées séquentiellement.

De plus, ce logiciel permet aussi :

- de traiter les grandeurs mesurées en convertissant les signaux de tension par calibrage directe en grandeurs physiques (température, pression, flux thermique).
- de choisir le pas de temps d'échantillonnage.
- de suivre l'évolution des expériences en temps réel, par affichage sur écran.

IV .5- Préparation préliminaire de l'installation

Comme toute machine frigorifique, l'installation doit fonctionner en l'absence de tout gaz autre que l'adsorbat ; de plus celle-ci est maintenue sous vide d'air.

Les origines des gaz parasites dommageables au bon fonctionnement de l'installation sont [6 ,Chap II] :

- le dégazage des gaz atmosphériques, initialement adsorbés par les paroi métalliques internes de la machine.
- gaz présents à la livraison dans les pores du charbon actif, ces gaz apparaissent lors des opérations préalables de dégazage
- gaz provenant des microfuites dans la machine
- gaz provenant de la décomposition de l'adsorbat ou d'une réaction chimique entre les composants du couple.

Pour s'affranchir de tous ces problèmes, trois étapes principales sont nécessaires avant de procéder à des expériences :

- préparation du système sans générateur et test au vide de l'installation
- dégazage de l'adsorbant
- dégazage de l'adsorbat

a - Préparation du système sans générateur

Par nettoyage au chlorethylène puis séchage de toutes les pièces du système. Une fois montée, l'installation est soumise à un pompage poussé (10^{-3} [hPa]) et de longue durée 8 heures.

Durant ce pompage, on procède à la détection et au colmatage de toutes les microfuites par des tests en vide primaire puis en secondaire et ce, aussi bien en vide dynamique qu'en vide statique.

b - Dégazage de l'adsorbant (charbon actif)

Le processus de dégazage est conduit pour éliminer les gaz qui réduisent la capacité d'adsorption du solide ; celui-ci se déroule comme suit :

Le système étant étanche et préalablement dégazé, le niveau du vide est de l'ordre de 10^{-3} [hPa].

Le charbon actif préalablement introduit dans le générateur et monté dans l'installation est à son tour dégazé par la combinaison du chauffage et du pompage.

Le système est mis sous vide primaire jusqu'à obtention du vide limite. Dans un premier temps, le générateur est chauffé sous une puissance de 125 Watt pendant 24 heures, la pression augmente normalement de 7.10^{-2} [hPa] à 16.10^{-2} [hPa]. Ce maximum de pression est atteint juste après la mise en route du chauffage et subsiste environ 30 minutes, puis elle diminue par palier jusqu'au vide limite.

En ce qui concerne l'évolution de la température interne du générateur (figure IV- 8), on observe successivement une croissance puis une chute de température qui s'explique par la désorption des gaz résiduels dans le générateur. Une fois le minimum atteint, la température et

la pression au sein du générateur croissent de nouveau en passant par des paliers de températures et de pressions jusqu'aux maximums de leurs valeurs.

Dans un deuxième temps du chauffage, on constate que la pression augmente peu puis diminue pour se stabiliser au niveau du vide limite. La température croît puis se stabilise à sa valeur maximale, ceci montre bien que le charbon actif est parfaitement dégazé.

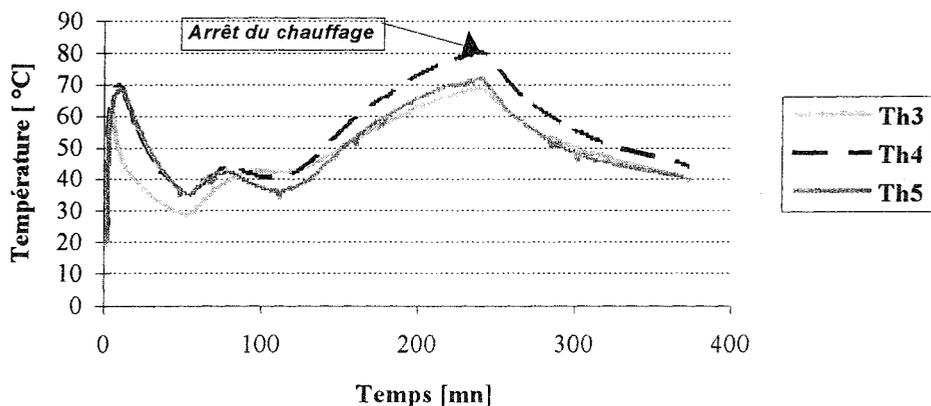


Figure IV -8 : Evolution de la température au sein du générateur sans alcool

c - Dégazage de l'alcool

Le dégazage de l'alcool se fait par ébullition sous vide dans un dispositif schématisé ci-dessous (figure IV 9).

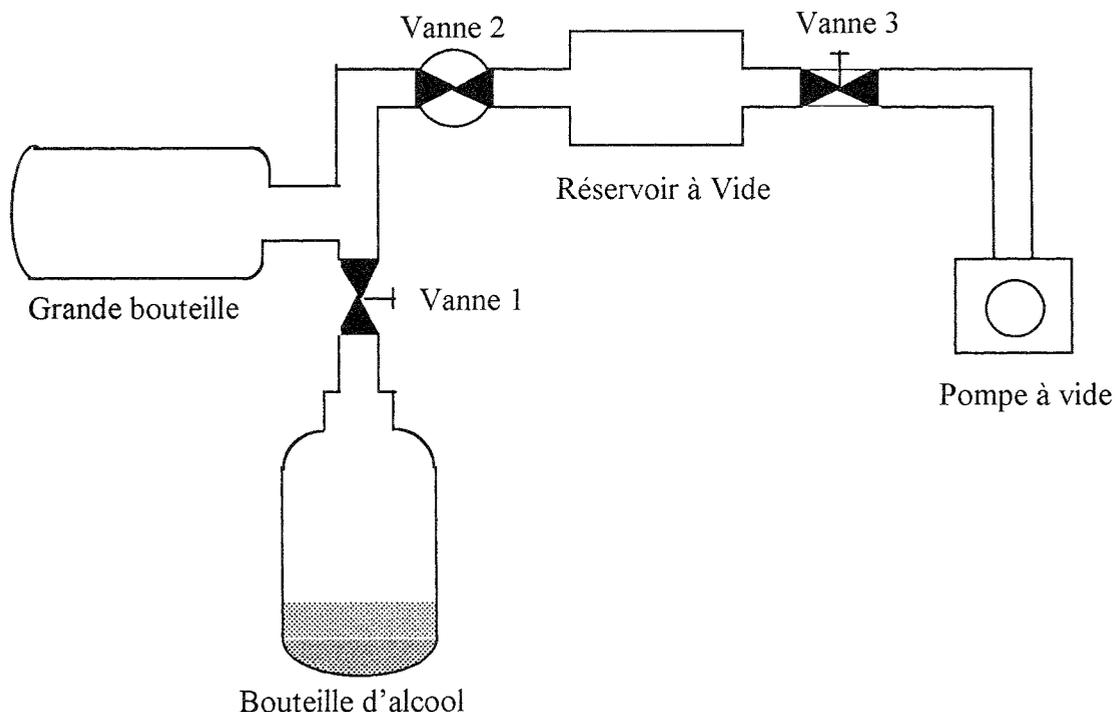


Figure IV -9 : Schéma du dispositif de dégazage de l'alcool

La bouteille d'alcool, contenant initialement le fluide est raccordée au dispositif précédent puis le méthanol dégazé de la façon suivante :

- Les vannes 1 et 2 étant fermées, le réservoir vidé par la pompe à palettes, est maintenu à basse pression 10^{-3} [hPa] en fermant la vanne 3,
- On ouvre la vanne 2 pour faire le vide dans la grande bouteille,
- Après avoir vidé la grande bouteille, on ferme la vanne 2 puis on ouvre progressivement la vanne 1, des bulles de gaz apparaissent à l'ébullition et vont occuper la grande bouteille. Le niveau d'alcool dans la bouteille baisse un peu, du fait de l'entraînement d'une faible quantité de vapeur d'alcool dans la grande bouteille.
- L'élimination des gaz se fait après la fermeture de la vanne 1 et l'ouverture de la vanne 2 par le pompage sous vide sur la grande bouteille.

Les opérations précédentes sont renouvelées jusqu'à la disparition des bulles de gaz dans la bouteille d'alcool.

d - Introduction de l'alcool

Une fois que la bouteille montée dans le prototype, le méthanol est introduit dans le condenseur préalablement sous vide en ouvrant la vanne 1 (figure IV-1).

Les vannes 1 et 2 étant fermées et le dégazage du charbon actif arrêté, on laisse refroidir le générateur jusqu'à la température ambiante, tout en faisant le vide dans le reste du circuit.

Après avoir atteint le vide limite, la pompe est isolée du circuit de l'installation et le vide statique est testé après quelques heures d'arrêt de pompage.

Si le vide statique se maintient, la machine est alors prête pour le premier cycle de fonctionnement.

e - Procédure expérimentale

La procédure expérimentale se déroule en respectant les étapes suivantes :

- Introduction de l'alcool dégazé dans le condenseur, le niveau de pression de celui-ci augmente un peu, donc supérieur à celui de l'évaporateur.

- Ouverture de la vanne de détente 4 et de la vanne d'arrêt 3, (figure IV-1). La différence de pression entre l'évaporateur et le condenseur permet la détente de l'alcool dans l'évaporateur, c'est l'effet frigorifique recherché.
- Fermeture de la vanne d'arrêt 4 dès que la quantité d'alcool s'est écoulée dans l'évaporateur. La pression du condenseur reste constante et la pression de l'évaporateur se stabilise à la pression de saturation équivalente à la température d'évaporation.
- Refroidissement du générateur puis adsorption des vapeurs du méthanol. On constate que la température d'adsorption augmente rapidement pour atteindre le maximum en quelques minutes, cette augmentation est due à la quantité de chaleur isostérique libérée par l'adsorption. A la fin de la phase d'adsorption-évaporation, la masse adsorbée dans le générateur atteint son maximum.

Deux types de refroidissement de la paroi extérieure du générateur ont été utilisés :
refroidissement naturel et refroidissement par air pulsé.

- Fermeture de la vanne d'arrêt 3, début du refroidissement du condenseur par circulation d'eau froide et chauffage externe du générateur.

L'ouverture de la vanne d'arrêt 2 intervient dès que la température du générateur atteint sa valeur seuil, la phase de désorption-condensation commence alors.

IV .6- Conclusion partielle

Après l'étalonnage des différents capteurs de mesure, la station d'acquisition saisie et traite les grandeurs physiques de fonctionnement de l'installation.

Plusieurs essais ont été faits, dans le chapitre suivant (Chap. V) , on donne quelques résultats de mesure des températures et des pressions dans le générateur, le condenseur, l'évaporateur et la chambre froide.

Le peson à jauge de contrainte, a permis de faire des mesures relativement précises des masses adsorbées, par contre cette technique a montré ses limites d'utilisation surtout en désorption. Dans ce cas, la liaison par soufflet métallique se rigidifie et présente moins de degrés de liberté.

Les mesures expérimentales seront par ailleurs comparées aux résultats de la modélisation numérique des transferts de masse dans le générateur et aussi utilisées dans le calcul des bilans calorifiques de l'installation (Chap. V).

CHAPITRE V

RESULTATS EXPERIMENTAUX ET NUMERIQUES

CHAPITRE V**RESULTATS EXPERIMENTAUX ET NUMERIQUES****SOMMAIRE DU CHAPITRE V**

I - Introduction	107
II - Résultats expérimentaux des transferts dans le générateur	107
II .1- Evolution des températures	107
II .2- Evolution des pressions	110
II .3- Evolution expérimentale de la masse sorbée	111
III - Résultats numériques de modélisation des transferts dans le générateur	112
III .1- Modélisation de la température dans le générateur	112
III .2- Modélisation de la masse sorbée	113
III .3- Conductance thermique globale et efficacité du générateur	114
IV - Résultats de modélisation des transferts dans le grain	116
IV .1- Transfert de masse dans le grain	116
IV .1.1- Evolution de la concentration dans les micropores	116
IV .1.2- Evolution de la concentration dans les macropores	116
IV .2- Transfert de chaleur dans le grain	117
V - Résultats expérimentaux et numériques relatifs au fonctionnement de l'installation	118
V .1- Bilans de fonctionnement de l'installation	118
V .2- Cycle de fonctionnement de la machine	120
V .3- Conductances thermiques du condenseur et de l'évaporateur	122

Nomenclature du chapitre

B	mobilité chimique	$[m^2 \text{mole}/Js]$		contact paroi-charbon actif	$[W/m^2 K]$
c_p	chaleur spécifique	$[J/kg.K]$	L_v	chaleur latente de vaporisation	$[J/kg]$
c_s	concentration massique à la surface des pores	$[kg/m^3]$	M	masse molaire	$[g/mole]$
c_v	concentration massique dans le volume des pores	$[kg/m^3]$	m	masse du matériau solide	$[kg]$
D	diffusivité	$[m^2/s]$	\dot{m}	débit	$[kg/s]$
D_e	diffusivité effective globale	$[m^2/s]$	$m_{dés}$	masse désorbée	$[g/kg]$
D_i	diffusivité massique microparticulaire	$[m^2/s]$	m_{sor}	masse sorbée	$[g/kg]$
D_p	diffusivité massique macroparticulaire	$[m^2/s]$	M_t	masse totale adsorbée	$[g/kg]$
E	efficacité		P	pression	$[hPa]$
h	coefficient d'échange interfacial	$[W/m^2.K]$	q	quantité adsorbée	$[g/kg]$
I	terme source ou puits	$[W/m^3]$	q_{is}	chaleur isostérique de sorption	$[J/kg]$
J	flux de diffusion massique	$[kg/m^2.s]$	\mathcal{R}	constante des gaz parfaits	$[J/mole.K]$
k_c	conductance thermique de		r_o	rayon sphérique	$[m]$
			w	concentration microporeuse adimensionnelle	

Symboles

α	pende isobare d'adsorption			d'espace des micropores
β	pende isotherme d'adsorption		ψ	variable adimensionnelle d'espace des macropores
ΔH	enthalpie		ρ_e	masse volumique apparente
ε	porosité ou potentiel d'adsorption		ρ_s	masse volumique du solide
φ_e	densité de flux de chaleur échangée avec l'extérieur		ρ_o	masse volumique de l'adsorbant
λ	conductivité thermique		σ	terme source
λ^*	conductivité thermique apparente		θ	température
μ	potentiel chimique		v_i, v_k	fraction des surfaces recouvertes d'adsorbat
η	variable adimensionnelle			

Indices et exposants

a	phase adsorbée	g	générateur
air	air	in	initial
c	condensation	m	méthanol
co	condenseur	md	méthanol désorbée
ch	charbon	se	sortie eau
des	désorbée	v	phase vapeur
eau	eau	0	initial
ee	entrée eau	∞	à l'équilibre
ex	extérieur	—	moyenne
ev	évaporateur	*	état de référence
f	final		

I - Introduction

Dans ce chapitre on présente une synthèse des résultats expérimentaux et des résultats numériques du fonctionnement de la machine frigorifique dans les deux cas de chauffage électrique et aéraulique du générateur.

Les résultats expérimentaux des transferts dans le générateur seront représentés par l'évolution des températures axiales et radiales, de la pression et de la masse sorbée. Quelques exemples d'évolution des températures et de pressions expérimentales seront donnés pour représenter le comportement des composants de la machine frigorifique.

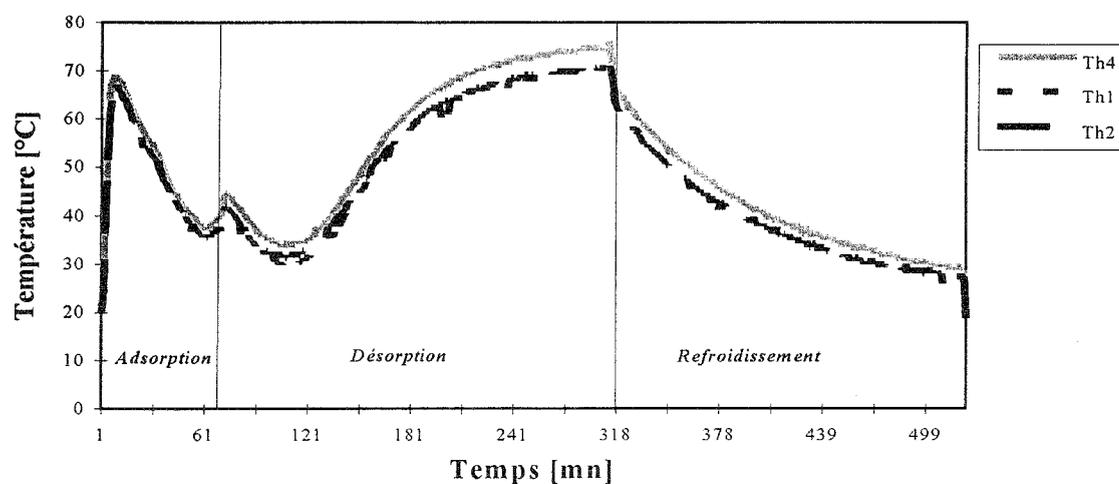
On rend compte par ailleurs, de quelques résultats numériques de la modélisation des transferts de la chaleur et de la masse sorbée dans le grain et dans le générateur, ainsi que les conductances thermiques des composants.

Les résultats expérimentaux de l'étude du cycle de fonctionnement seront donnés sous forme de tracés du cycle réel dans le diagramme ($\ln P$, $-1/T$) et en termes d'efficacité thermique des composants, de bilans calorifiques et de coefficients de performance.

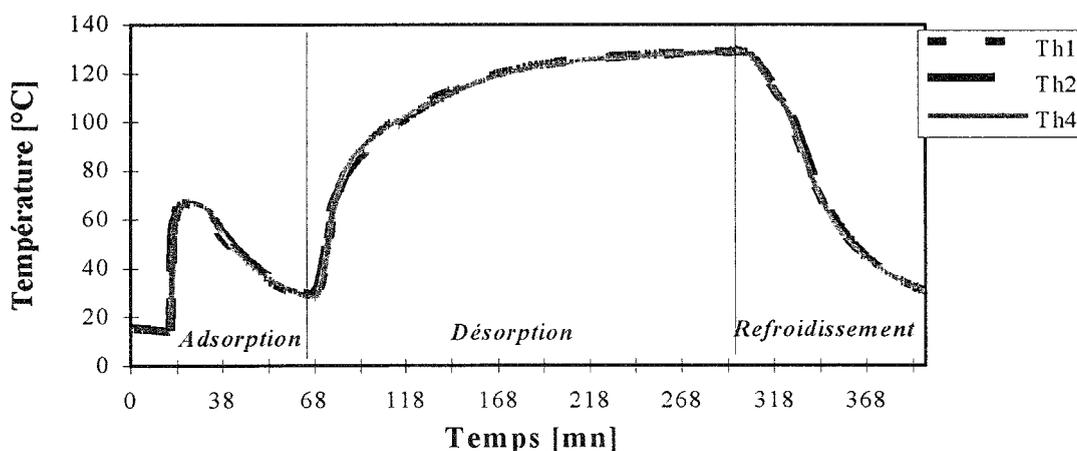
II - Résultats expérimentaux des transferts dans le générateur

II.1- Evolution des températures

Le suivi des températures axiales et radiales, au centre du générateur (Figures IV-2 et IV-3, chapitre IV) pendant un cycle complet, est représenté par les figures suivantes (Figures V.1.a, 1.b). Ces figures sont typiques de celles obtenues pour les différents cycles successifs de fonctionnement de la machine et ce pour les deux modes de chauffage de générateur.



a- Cas du chauffage électrique



b : Cas du chauffage aéraulique

Figure V 1.a et b : Evolution des températures expérimentales

Pour chaque mode de chauffage et durant les deux phases du cycle, on constate qu'il y a une grande similitude dans l'évolution de toutes les températures mesurées dans le générateur.

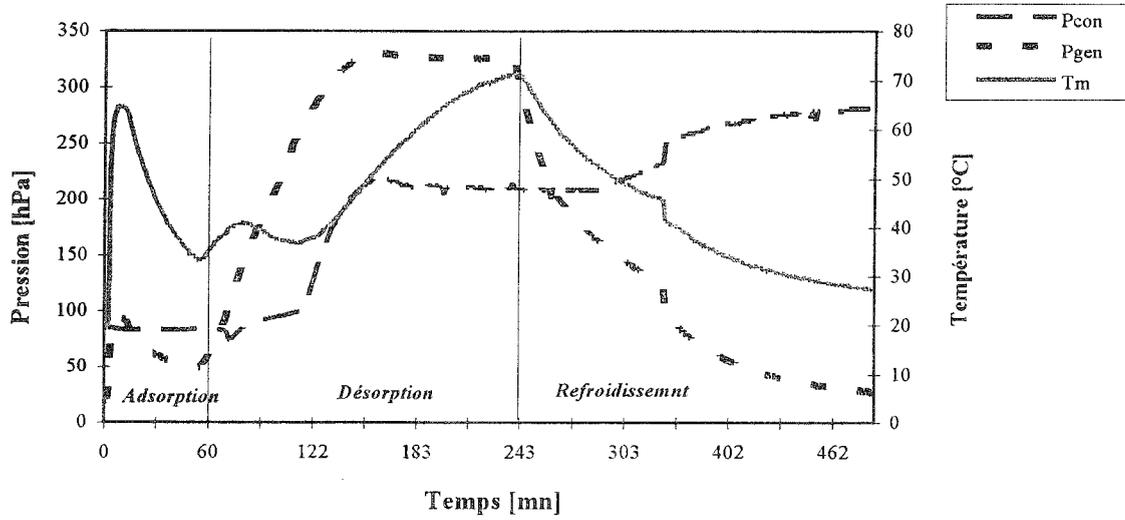
L'adsorption est instantanée, son caractère exothermique conduit à une élévation de la température. Celle-ci diminue ensuite sous l'effet de l'évaporation et de l'équilibre thermique résultant de l'adsorption des vapeurs d'alcool sur la première couche adsorbée à la surface du charbon actif.

L'évolution des températures lors de la désorption est légèrement différente pour les deux modes de chauffage.

Dans le cas du chauffage aéraulique (Figure V 1.b) la température croît régulièrement jusqu'à la température d'équilibre thermique. Par contre en chauffage électrique, l'évolution des températures montre que celles-ci après avoir légèrement augmenté, diminuent sous l'effet de la désorption locale puis reprennent sa croissance jusqu'à l'équilibre thermique.

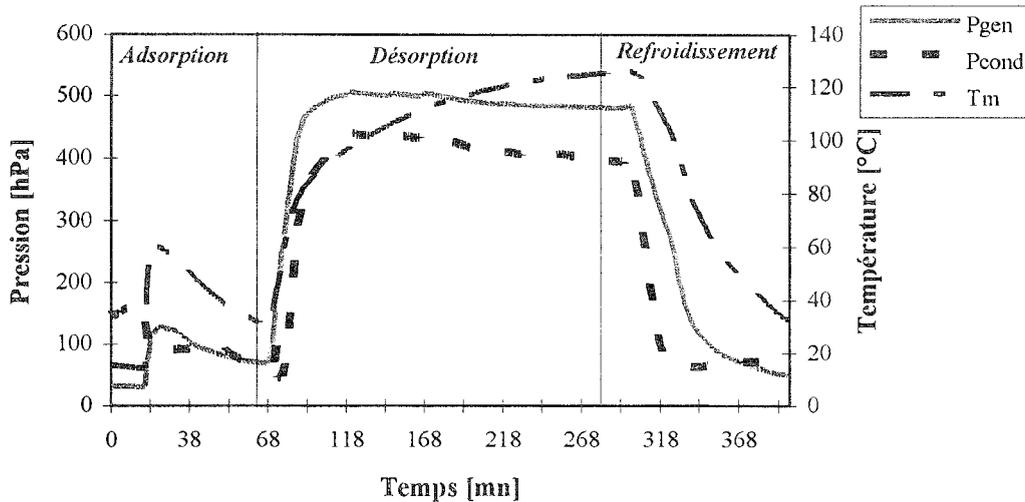
II .2- Evolution des pressions

La pression dans les différents composants de l'installation est mesurée pendant chacune des phases du cycle de fonctionnement (Figures V.2.a,b) :



a : cas du chauffage électrique

($T_{\text{consigne}} = 135[^\circ\text{C}]$, 2^e cycle)



b : Cas du chauffage aéraulique

($T_{\text{consigne}} = 140[^\circ\text{C}]$, 20^e cycle)

Figures V .2.a-b : Evolution des pressions dans le générateur et le condenseur

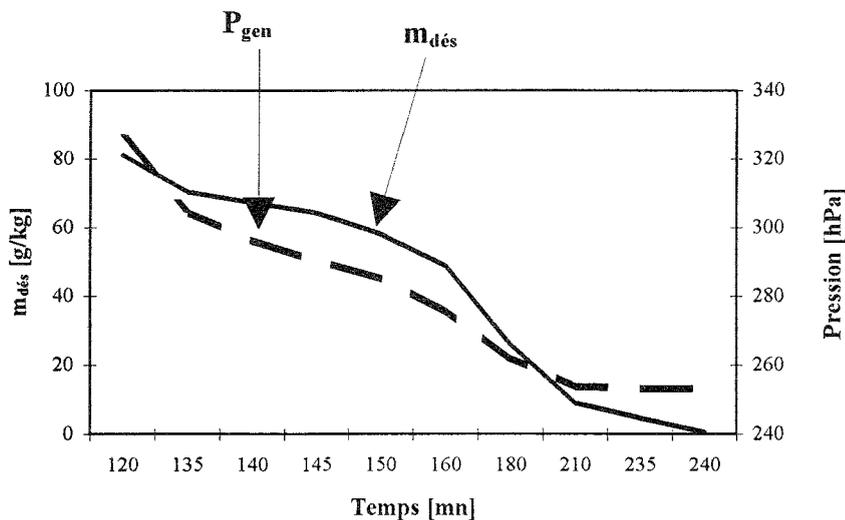
On constate que l'évolution de la pression dans le générateur et dans le condenseur suit celle de la température d'adsorption pour le cas du chauffage aéraulique. En fin de désorption l'écart résiduel de pression entre le générateur et le condenseur est de l'ordre de 75 [hPa].

Dans le cas du chauffage électrique, cette évolution se fait avec déphasage par rapport à l'évolution de la température. L'écart résiduel en pression, à la fin de la phase de désorption est de l'ordre de 100 [hPa].

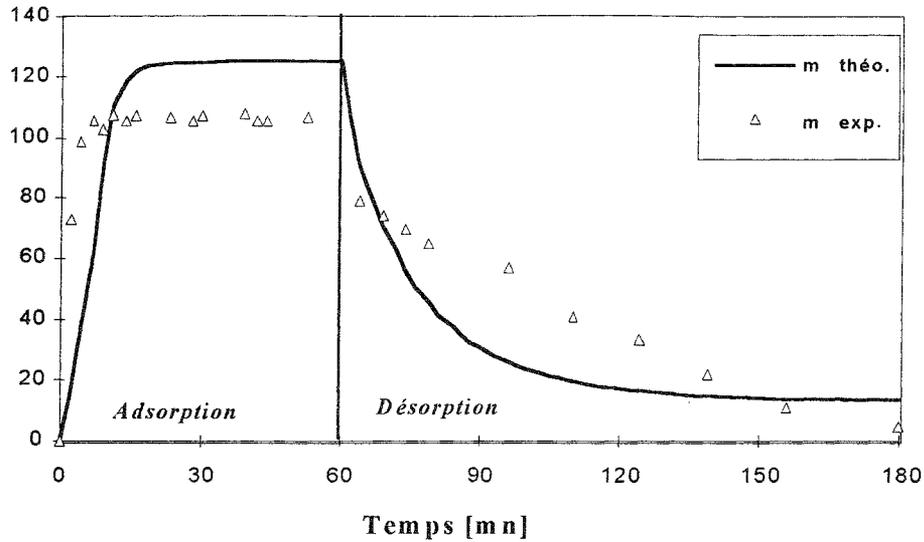
II .3- Evolution expérimentale de la masse sorbée

La masse sorbée est déterminée expérimentalement par le peson en phase d'adsorption, et par le suivi du niveau du condensat en phase de désorption.

La figures suivantes donnent un exemple des relevés effectués :



**Figure V.3.a : Evolution de la masse désorbée et de la pression dans le générateur
(chauffage électrique, $T_{consigne} = 140\text{ °C}$)**



**Figure V.3.b : masse sorbée expérimentale et théorique
(chauffage électrique, $T_{consigne} = 140\text{ }^{\circ}\text{C}$)**

Les évolutions expérimentales et théoriques de la masse totale sorbée sont représentées sur la figure V.3.b . On constate que les résultats théoriques sont en accord avec l’expérimentation, en mode de chauffage électrique et aussi en aéraulique.

III - Résultats numériques de modélisation des transferts dans le générateur

III.1- Modélisation de la température dans le générateur

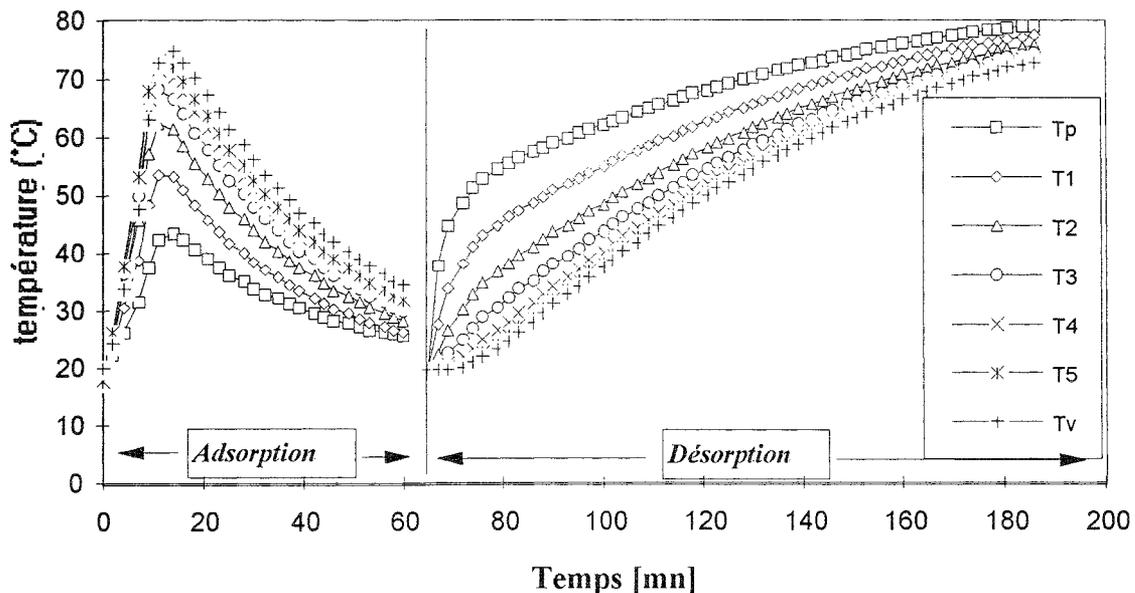


Figure V.4 : Evolution des températures théoriques radiales du volume élémentaire

La figure V.4 représente l'évolution dans le temps des températures dans le générateur pour les deux phases adsorption et désorption. Le profil de température radial est donné sur cette même figure.

On constate que la température croît très vite en phase d'adsorption. La raison de cet échauffement rapide est la vitesse d'adsorption particulièrement élevée.

En phase de désorption l'échauffement est imposé de l'extérieur et la cinétique du processus est lente comme on peut le voir sur les figures (figures V.4 et V.5).

III .2- Modélisation de la masse sorbée

La masse sorbée est représentée par le taux de remplissage défini comme étant le rapport de la masse sorbée à sa valeur maximale $\theta = \frac{m_{\text{sor}}}{m_{\text{max}}}$:

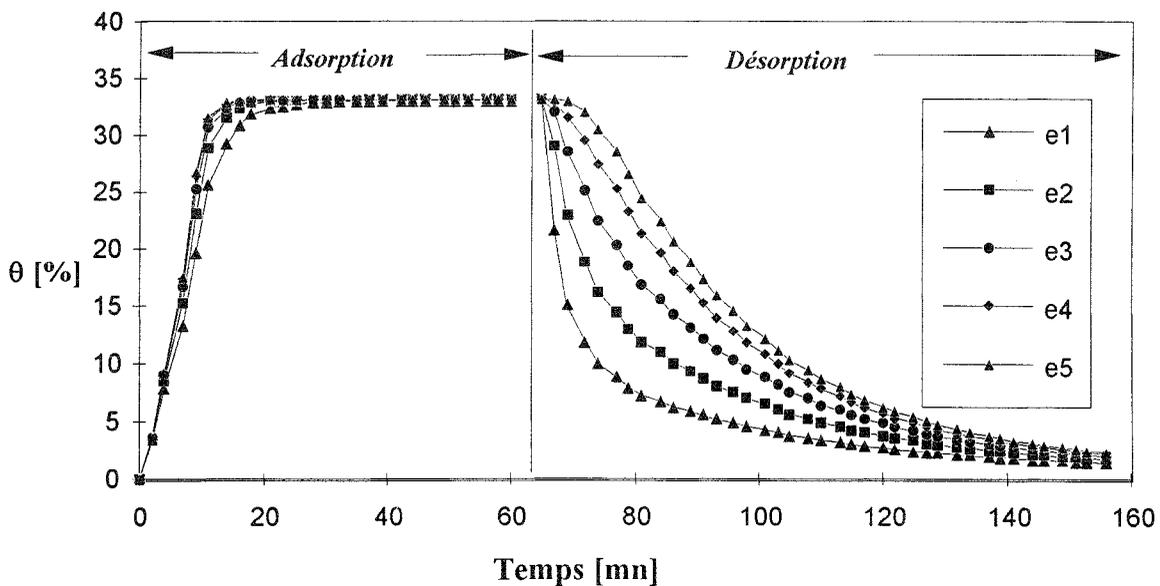


Figure V .5 : Evolution du taux de remplissage dans le volume élémentaire

On remarque sur cette figure (Figure V.5) en particulier la rapidité de l'adsorption qui dure [20 mn] environ, pour atteindre la saturation. D'autre part l'allure des courbes en phase d'adsorption est pratiquement la même pour les différents volumes élémentaires (e_i) du générateur (faible gradient de concentration). Par contre en phase de désorption la cinétique

est plus lente, on remarque un gradient de concentration entre différents volumes élémentaires du générateur qui subsiste.

III.3- Conductance thermique globale et efficacité du générateur

Durant la phase de désorption-condensation et à partir des résultats expérimentaux, on calcule la puissance échangée entre le générateur et la source extérieure à air pulsé, par la relation :

$$\dot{Q}_g = \dot{m}_{\text{air}} \cdot c_{p_{\text{air}}} \cdot (T_{\text{ea}} - T_{\text{sa}}) \quad (1)$$

où

* \dot{Q}_g est la puissance échangée avec le générateur, considérée positive en phase de chauffage et négative en phase de refroidissement.

* \dot{m}_{air} et $c_{p_{\text{air}}}$ sont respectivement le débit massique et la chaleur spécifique de l'air.

* T_{ea} et T_{sa} sont les températures de l'air respectivement à l'entrée et à la sortie de la gaine du générateur.

Par ailleurs, la puissance du générateur est exprimée par la relation :

$$\dot{Q}_g = \dot{m}_{\text{air}} \cdot c_{p_{\text{air}}} \cdot E_g (T_{\text{ea}} - T_{\text{ch}}) \quad (2)$$

où

* E_g est l'efficacité thermique du générateur donnée par :

$$E_g = 1 - \exp\left(-\frac{U_g \cdot S_g}{\dot{m}_{\text{air}} \cdot c_{p_{\text{air}}}}\right) \quad (3)$$

avec - U_g est la conductance globale du générateur en $[\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}]$.

- T_{ch} est la température moyenne de charbon dans le générateur.

- S_g est la surface d'échange du générateur, côté charbon ($S_g = 0.175[\text{m}^2]$).

A partir des relations (1), (2) et (3) on peut déduire la valeur de U_g :

$$U_g = -\frac{\dot{m}_{\text{air}} \cdot c_{p_{\text{air}}}}{S_g} \ln(1 - E_g)$$

où par définition E_g :

$$E_g = \frac{\dot{Q}_g}{\dot{m}_{\text{air}} \cdot c_{p_{\text{air}}} \cdot (T_{\text{ea}} - T_{\text{ch}})} \quad (4)$$

Les figures suivantes (Figures V .6.a et b) représentent l'évolution de la conductance thermique globale et l'efficacité du générateur en phase de désorption.

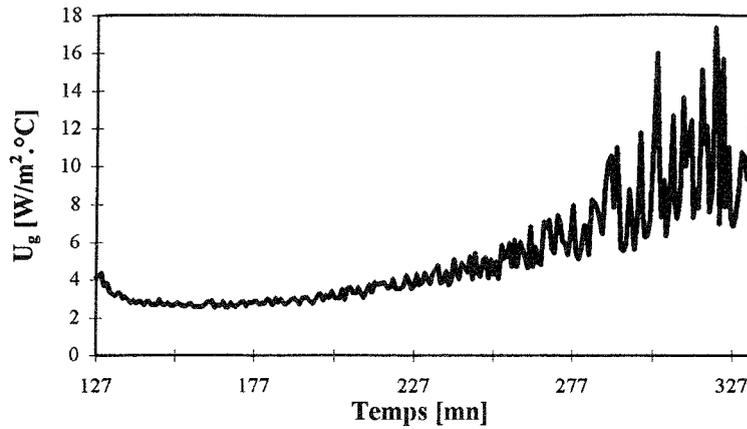


Figure V .6.a : Evolution de la conductance thermique du générateur
(Chauffage à air , $T_{consigne} = 100$ [$^\circ C$])

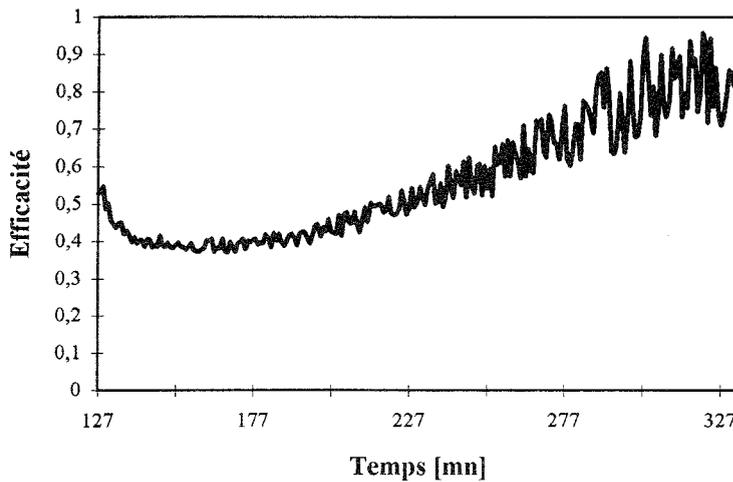


Figure V .6.b : Evolution de l'efficacité du générateur
(Chauffage à air , $T_{consigne} = 100$ [$^\circ C$])

Dans les figures V .6.a et V.6.b , on remarque que l'allure des courbes de la conductance thermique et l'efficacité du générateur est stable pendant le temps de désorption de l'adsorbat, la croissance de celle-ci est amortie une fois que le générateur est vide de la vapeur de l'adsorbat.

IV - Résultats de modélisation des transferts dans le grain

IV .1- Transfert de masse dans le grain

IV .1.1- Evolution de la concentration dans les micropores

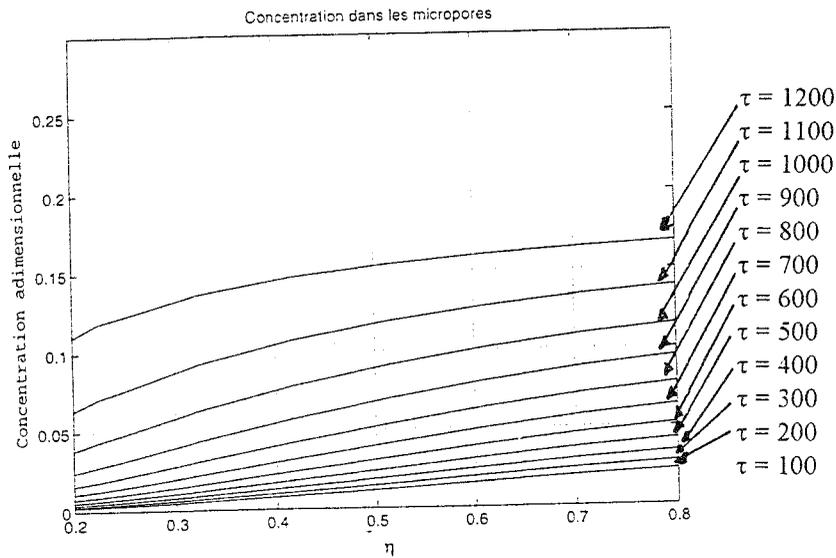


Figure V .7.a : Evolution de la concentration dans les micropores

IV .1.2- Evolution de la concentration dans les macropores

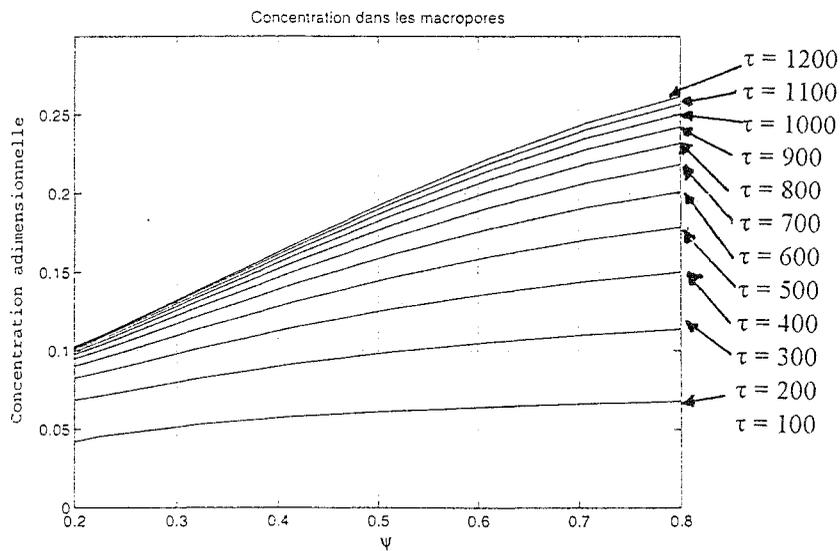


Figure V .7.b : Evolution de la concentration dans les macropores

On remarque sur les figures (Figures V.7.a et V.7.b) des concentrations dans les micropores et les macropores, qu'il y a un front d'adsorbat qui se déplace en fonction du temps et du rayon des micropores ou des macropores .

Dans ces deux figures , le remplissage d'adsorbat dans le grain est mis en évidence. Ce qui vérifie l'hypothèse de départ que le phénomène d'adsorption se fait par diffusion et accumulation des vapeurs d'adsorbat dans le volume des macropores puis par diffusion massique dans les surfaces des microsphères pour pénétrer dans les micropores.

IV .2- Transfert de chaleur dans le grain

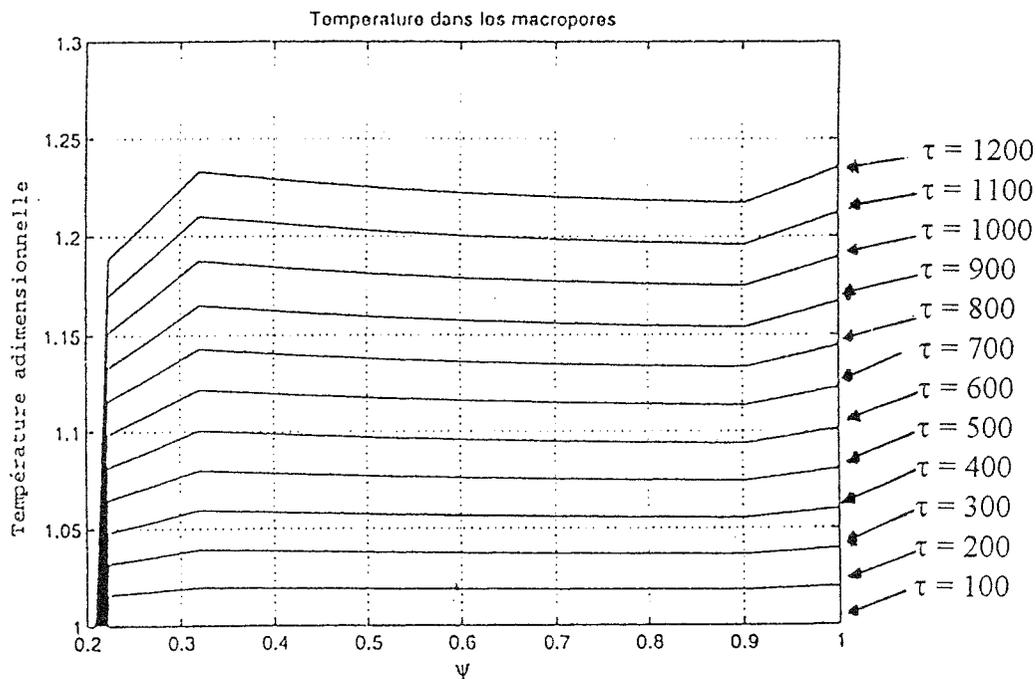


Figure V .7.c : Evolution de la température dans le grain

Dans la figure (Figure V.7.c), le front de la température dans le grain croît progressivement en fonction du temps pendant la phase d'adsorption. En outre, on remarque que la température est presque homogène dans le grain (température uniforme en fonction du rayon).

V - Résultats expérimentaux et numériques relatifs au fonctionnement de l'installation

Les résultats expérimentaux présentés ci-après concernent les bilans calorifiques et frigorifiques de fonctionnement de l'installation, le cycle de fonctionnement dans le diagramme ($\ln P, -1/T$) et l'évolution de la masse cyclée en fonction de la puissance calorifique fournie pendant la phase de désorption-condensation.

La modélisation du fonctionnement des composants de l'installation est rendue compte sous forme d'évolution de l'efficacité thermique, au cours du temps, pour le chauffage aéraulique.

V.1- Bilans de fonctionnement de l'installation

A partir des relevées en temps réel des températures, des pressions et des débits cyclés dans la machine on calcul les bilans thermiques à partir de relations définies précédemment (Chap III, §§III.1-2).

Les tableaux suivants résument quelques résultats obtenus pour les deux cas de chauffage.

Tableau I : Bilans calorifiques et frigorifiques de l'installation

Essai	T_g	T_{ads}	T_c	T_{ev}	Chaleur fournie au générateur [W]	Effet frigorifique \dot{Q}_{ev1} [W]	Puissance frigorifique disponible \dot{Q}_{ev2} [W]	$(COP_f)_{réel}$	$(COP_f)_{théo}$
-------	-------	-----------	-------	----------	-----------------------------------	--	---	------------------	------------------

Manip A Chauffage électrique

cycle 1	58,7	32,7	23,9	-8,9	100	355,8	45,7	0,46	0,67
cycle 2	62,2	34,1	31,3	-8,6	125	237,2	51,3	0,41	0,57
cycle 3	60,1	33,3	36,3	-7,4	125	237	32,8	0,26	0,47
cycle 4	57,8	33	39,8	-8,4	125	355	52,5	0,24	0,35

Manip B Chauffage électrique

cycle 1	76	35	25,3	-8,5	100	239,2	34,3	0,34	0,88
cycle 2	80	33	36,3	-8,3	125	348,1	30,9	0,25	0,79
cycle 3	78	37	33,4	-8,2	125	123,3	33	0,26	0,74
cycle 4	66,4	40	30,6	-8,3	125	143	29,6	0,24	0,58

Manip C Chauffage aéraulique T_g [°C]

cycle 1	88	26,2	24,2	-13	100	320	40	0,33	1,17
cycle 2	88,3	26,6	25,0	-13	100	293,4	61	0,27	1,15
cycle 3	87,8	28	26,3	-12,8	100	237,6	23,6	0,19	1,08
cycle 4	126	26,5	33,3	-14,1	140	475,3	48,6	0,22	1,48

Tableau II : Bilans massiques de l'alcool cyclé

Essai	Débit moyen introduit [kg/s]	Quantité introduite [ml]	Quantité récupérée [ml]	Taux recyclé [%]
-------	------------------------------	--------------------------	-------------------------	------------------

Manip A Chauffage électrique

cycle 1	0,0003	180	100	0,56
cycle 2	0,0002	100	98	0,54
cycle 3	0,0003	120	86	0,48

Manip B Chauffage électrique

cycle 1	0,000202	160	110	0,69
cycle 2	0,000294	156	40	0,25
cycle 3	0,000104	24	140	0,69
cycle 4	0,000096	130	88	0,55

Manip C Chauffage aéraulique

cycle 1	0,00027	150	114	0,76
cycle 2	0,000247	118	108	0,72
cycle 3	0,0002	154	148	0,99
cycle 4	0,00039	100	116	0,77

Le tableau I, des bilans frigorifiques montre que d'une manière générale le mode de chauffage aéraulique conduit à une température d'évaporation plus basse que celle obtenue en mode de chauffage électrique.

Pour les deux modes de chauffage, les effets frigorifiques produits sont de même ordre de grandeur en égard aux quantités de frigorigène introduites et en circulation dans l'évaporateur. Par contre la puissance frigorifique disponible semble être sensiblement plus importante dans le cas du chauffage aéraulique.

Par ailleurs, les coefficients, réel et théorique, de performance frigorifique ont des valeurs comparables à ceux obtenues dans la littérature [1].

Dans le cas du chauffage électrique du générateur, le tableau I montre que les facteurs de qualité ont des valeurs qui varient entre 30 à 72 %, alors que pour le chauffage aéraulique ceux-ci prennent des valeurs de 15 à 28 %, ce qui laisse supposer l'existence d'une large marge pour l'amélioration du coefficient de performance réel et donc une plus grande production frigorifique de la machine.

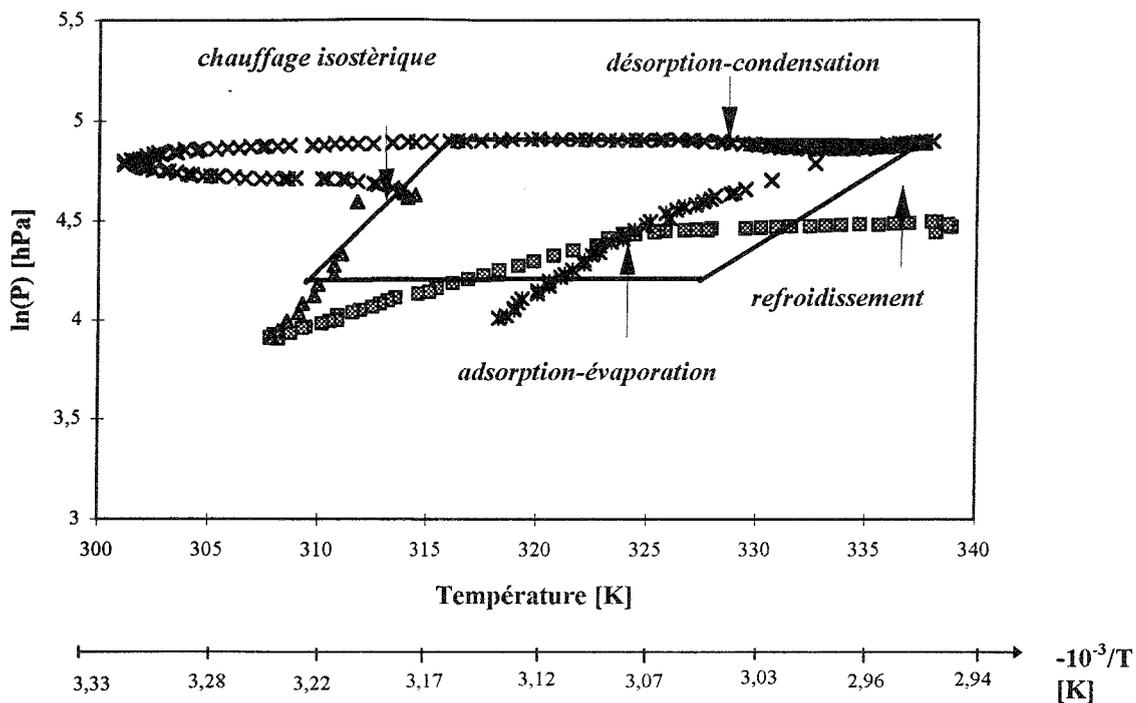
Le tableau II représente les bilans massiques du frigorigène cyclé, il montre que les taux du fluide recyclé sont plus élevés dans le cas du chauffage aéraulique.

L'examen des tableaux I et II montre qu'il n'y pas de relation exclusive entre le taux recyclé et le niveau de désorption, par contre la puissance frigorifique disponible et la température de condensation évoluent dans le même sens que celui de la température de désorption.

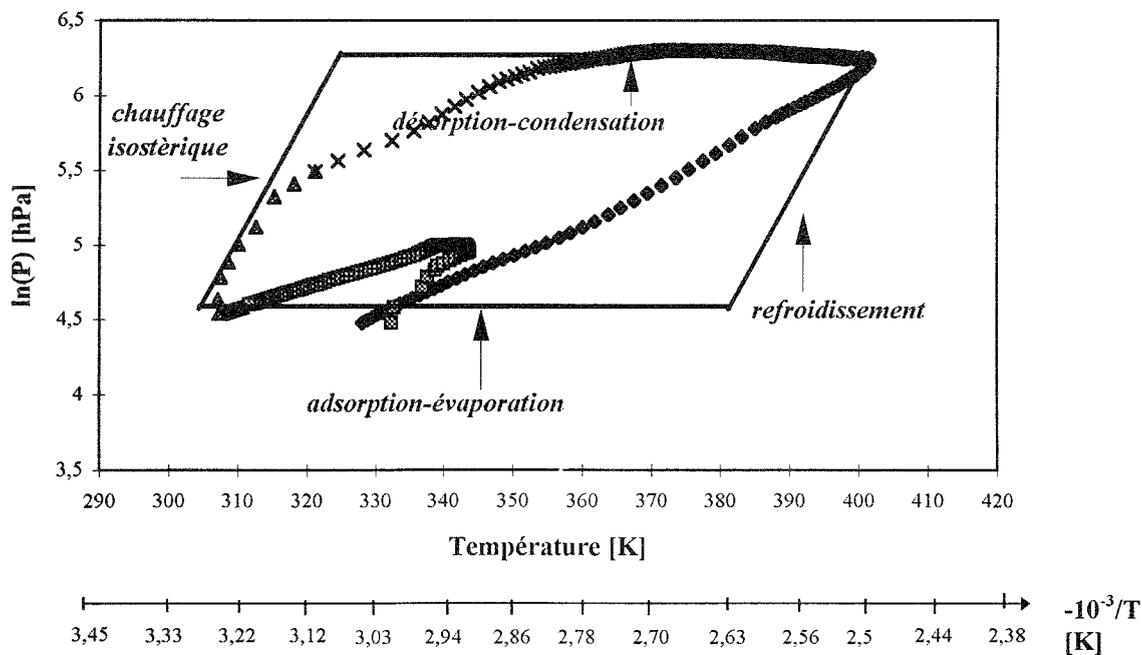
Enfin, l'examen du temps total de cycle montre que, dans le cas du chauffage aéraulique, celui-ci est écourté de 40% près du temps total du cycle obtenu dans le cas du chauffage électrique.

V.2- Cycle de fonctionnement de la machine

Les tracés types des cycles de fonctionnement de la machine, pour les deux cas de chauffage, sont donnés, dans le diagramme $(\ln P, -1/T)$, par les figures suivante (figures V.8.a et b) :



a- cas du chauffage électrique



b- cas du chauffage aéraulique

Figure V .8 : Cycle de fonctionnement de la machine

L'examen des courbes d'évolution des températures expérimentales (Figure V.1.a et b) permet d'avancer quelques explications quant au tracés réels des cycles et les irréversibilités de fonctionnement de la machine.

Dans le cas du chauffage électrique, le début de la phase d'adsorption-évaporation se traduit par une élévation de la température, due essentiellement à l'importance de la chaleur isostérique d'adsorption.

Le chauffage isostérique commence d'abord par une augmentation normale de la température, mais ensuite celle-ci diminue, puis augmente de nouveau. La chute de la température peut s'expliquer par une évaporation locale du frigorigène lors de l'ouverture de la vanne d'arrêt entre le générateur et le condenseur.

Dans le cas du chauffage aéraulique, on constate que le début de la phase d'adsorption-évaporation se traduit par une augmentation de la température, comme dans le cas précédent, mais plus rapide. Par contre la croissance de la température et de la pression se fait avec plus de régularité et sans baisse notable de la température.

V.3- Conductances thermiques du condenseur et de l'évaporateur

Dans le cas du chauffage aéraulique, les évolutions en fonction du temps des conductances du condenseur et l'évaporateur de la machine frigorifique sont représentées par les figures (Figure V.9.a), (Figure V.9.b).

Ces conductances sont calculées à partir des équations des bilans thermiques similaires aux relations (2) et (4) (Chapitre V, II.3.1) :

$$\dot{Q}_c = \dot{m}_{\text{eau}} \cdot c_{p_{\text{eau}}} \cdot E_c \cdot (T_{\text{ec}} - T_{\text{cc}}) \quad \text{et} \quad U_c = - \frac{\dot{m}_{\text{eau}} \cdot c_{p_{\text{eau}}}}{S_c} \ln(1 - E_c) \quad (5)$$

et

$$\dot{Q}_{\text{ev}} = \dot{m}_{\text{eau}} \cdot c_{p_{\text{eau}}} \cdot E_{\text{ev}} \cdot (T_{\text{ec}} - T_{\text{cev}}) \quad \text{et} \quad U_{\text{ev}} = - \frac{\dot{m}_{\text{eau}} \cdot c_{p_{\text{eau}}}}{S_{\text{ev}}} \ln(1 - E_{\text{ev}}) \quad (6)$$

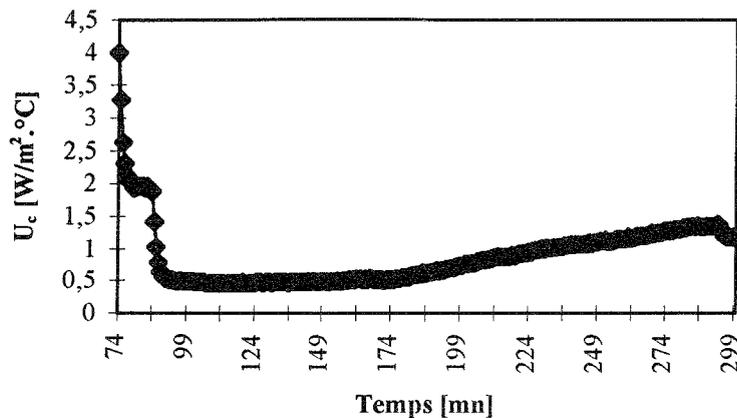


Figure V.9.a : Evolution de la conductance thermique du condenseur
(Chauffage aéraulique, $T_{consigne} = 100[°C]$)

On constate que la conductance thermique U_c décroît rapidement passant de $4 [W.m^{-2}.°C^{-1}]$ au début de la condensation, pour atteindre $1,5 [W.m^{-2}.°C^{-1}]$ à l'équilibre.

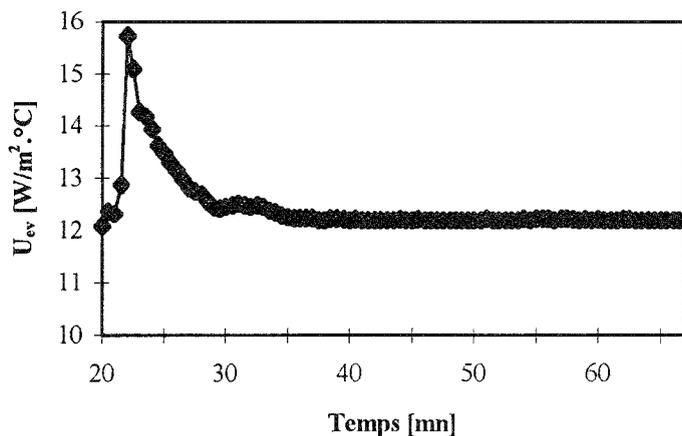


Figure V.9.b : Evolution de la conductance thermique de l'évaporateur
(Chauffage aéraulique, $T_{consigne} = 100[°C]$)

La conductance globale de l'évaporateur après avoir atteint $15,8 [W.m^{-2}.°C^{-1}]$ au début de l'évaporation, décroît rapidement vers une valeur stable de $12,2 [W.m^{-2}.°C^{-1}]$.

La comparaison des valeurs obtenues des conductances globales avec celles données dans la littérature montre que la conductance globale du condenseur est faible, alors que celle de l'évaporateur est du même ordre de grandeur.

Références

- [1] F. MEUNIER, " La sorption solide : une alternative aux CFCs ",I.I.F.-I.I.R.- commision B1, pp.56-64, Paris, (1992).

CHAPITRE VI

MODELISATION ET OPTIMISATION DU FONCTIONNEMENT DES MACHINES TRITHERMES

CHAPITRE VI

MODELISATION ET OPTIMISATION DU FONCTIONNEMENT DES MACHINES TRITHERMES

SOMMAIRE DU CHAPITRE

VI.1- Introduction - bibliographie	128
VI.2- Développement du modèle proposé	129
VI.2.1- Formulaire mathématique du modèle	130
VI.2.2- Résolution analytique dimensionnelle (algébrique)	132
VI.2.3- Adimensionnement	137
VI.2.4- Cas des faibles pincements	138
VI.2.5- Maximum de \dot{q}_F sans contrainte	141
VI.3- Méthode numérique de résolution	144
VI.4- Résultats numériques	144
VI.4.1- Minimisation de la puissance calorifique à fournir à la machine	144
VI.4.2- Cas des faibles pincements	153
VI.5- Conclusion du chapitre	157

Nomenclature du chapitre VI

•	\dot{C}	[W.K]
	C_p : capacité calorifique	[J/kg.K]
	k : conductance surfacique de transfert	[W/K.m ²]
	NUTFT : nombre d'unité de transfert total	
•	\dot{q} : puissance échangée pour un cycle	
	[W]	
•	\dot{q}_p : puissance thermique perdue	[W]
	S : surface d'échange	[m ²]
•	s_T : entropie	[W/K]
	T : température	[K]
	T' : température du fluide cyclé	[K]
•	w : puissance mécanique de circulation	[W]
	X : pincement	[K]
	x : pincement réduit	
	Y : pincement adimensionnel	

Indices :

A : absorbeur
 B : bouilleur
 C : condenseur
 F : évaporateur
 c : source chaude
 e : entrée
 f : source froide
 i : source intermédiaire
 r : paramètre ou variable réduite
 s : sortie
 T : total

Symboles :

θ : température adimensionnelle
 L : Lagrangien

VI.1 Introduction - Bibliographie

Le présent travail a permis de rendre compte de l'état d'avancement technique d'une configuration de machine à froid à adsorption [Chapitre I]. Cette configuration est une des possibilités offertes par les machines trithermes.

La partie expérimentale s'est appesantie sur le comportement du composant clef de ces machines à savoir le générateur. Un certain nombre de renseignements en ont été déduits, dont la caractérisation fine du comportement en régime instationnaire du générateur.

Le chapitre VI, a pour but de montrer l'importance d'une bonne connaissance des composants dans la conception optimale de la machine et de proposer des éléments de solution à ce dimensionnement optimal.

L'approche proposée relève de la thermodynamique dite en temps fini et est très récente. Un des premiers articles publiés dans ce domaine pour les machines trithermes est relatif aux travaux du groupe [1] et date de 1986.

Cette approche a été suivie d'une communication dans une journée de la société française des thermiciens [2], en prolongement des travaux précédents.

Cette démarche semble connaître un certain engouement, puisque récemment plusieurs articles et communications sont parus sur le même sujet [3]-[4]-[5].

Le dernier travail cité consiste en une optimisation en puissance frigorifique, qui constitue la fonction objectif; cette dernière est représentative de la démarche " **thermodynamique en temps fini** " (F.T.T.; abréviation anglo-saxonne pour finite time thermodynamics). L'optimum de puissance est obtenu pour une distribution particulière des surfaces d'échange aux contacts avec les trois thermostats, ainsi que pour des pincements (écart de températures) non quelconques aux trois échangeurs correspondants. Les six valeurs particulières correspondantes au maximum de puissance, définissent le point d'état associé à l'optimum de puissance de la machine.

IL y a lieu de remarquer toutefois que les résultats de CHEN [5] restent limités par le fait que sources et puits sont des thermostats, et que la machine n'a pas de contrainte à la source chaude.

Aussi nous proposons ici de généraliser, les travaux antérieurs cités, en répondant plus particulièrement aux deux points ci-dessus.

VI .2- Développement du modèle proposé

Le schéma de principe de la figure VI .2.1 fait apparaître en fait des contacts thermiques avec quatre sources (\dot{q}_B , \dot{q}_C , \dot{q}_A et \dot{q}_F). En pratique il s'avère que les opérations de condensation et d'absorption se réalisent à partir soit de l'air ambiant, soit à partir d'une même circulation d'eau généralement naturelle, de sorte que ces deux contacts thermiques se font avec une seule et même source qui sera appelée *source intermédiaire* à la température T_i .

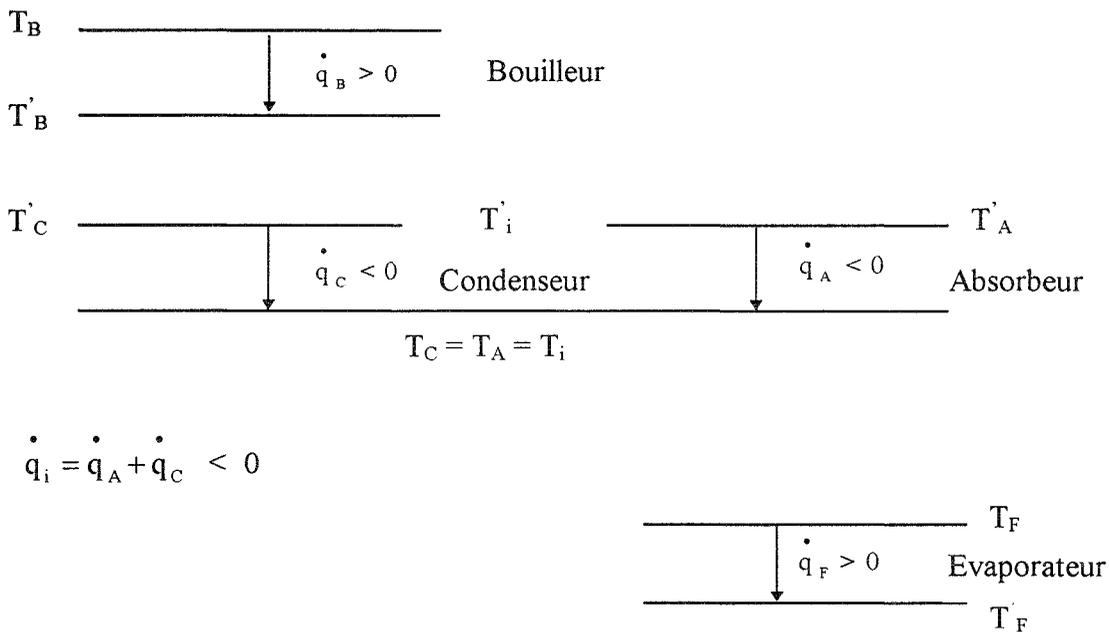


Figure VI .2.1 : Schéma de principe de la machine tritherme

VI .2.1- Formulation mathématique du modèle

Hypothèses :

1# régime dynamique stationnaire : cycle continu parfait (sans dégradation interne d'énergie).

2# Surface de transfert variable.

3# pincements variables.

4# k_i les conductances surfaciques de transfert constantes.

5# capacités thermiques finies.

D'après le premier principe de la thermodynamique, l'équation de conservation de l'énergie s'écrit :

$$\begin{array}{ccccccc} \dot{q}_i & + & \dot{q}_c & + & \dot{q}_f & + & \dot{w} & + & \dot{q}_p & = & 0 \\ < 0 & & > 0 & & > 0 & & \approx 0 & & \approx 0 & & \end{array} \quad (1)$$

avec \dot{w} , puissance mécanique de circulation

\dot{q}_p , puissance thermique perdue.

Le second principe de la thermodynamique donne l'équation de conservation de l'entropie (cycle endoréversible) :

$$\frac{\dot{q}_i}{T'_i} + \frac{\dot{q}_c}{T'_c} + \frac{\dot{q}_f}{T'_f} + \underbrace{\dot{s}_r}_{\approx 0} = 0 \quad (2)$$

$$T'_c \leq T_c \quad , \quad T'_i \geq T_i \quad \text{et} \quad T'_f \leq T_f$$

Les températures T' sont les températures du fluide cyclé lors de son contact avec chacune des sources et puits. Elles sont inférieures aux températures des sources dans le cas de la source chaude et la source froide, alors que dans le cas de la source intermédiaire c'est la température du fluide qui est supérieure à celle du puits.

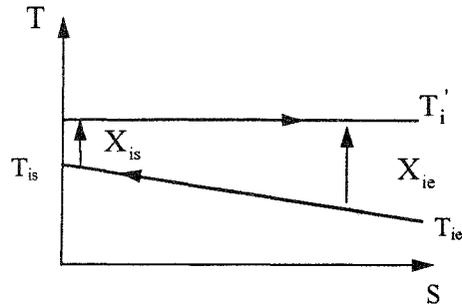
Les quantités de chaleur échangées s'expriment comme suit :

\dot{q}_i est la quantité de chaleur échangée à la source intermédiaire

$$\dot{q}_i = K_i \cdot S_i \cdot \Delta T \ln_i \quad (3)$$

$$\Delta T \ln_i = \frac{(T_i' - T_{ie}) - (T_i' - T_{is})}{\ln \frac{T_i' - T_{ie}}{T_i' - T_{is}}} \quad (4)$$

$$\dot{q}_i = \dot{m}_i \cdot c_{pi} \cdot (T_{is} - T_{ie}) \quad (5)$$



écoulement à contre courant

A partir des équations (3) et (5) on déduit le nombre d'unité de transfert :

$$NUT_i = \frac{k_i S_i}{\dot{m}_i c_{pi}} = \frac{T_{is} - T_{ie}}{\Delta T \ln_i} \quad (6)$$

Or

$$\Delta T \ln_i = \frac{T_{is} - T_{ie}}{\ln \frac{T_i' - T_{ie}}{T_i' - T_{is}}} \quad (7)$$

D'où

$$NUT_i = \ln \left| \frac{T_i' - T_{ie}}{T_i' - T_{is}} \right| \quad (8)$$

Remarques :

- L'expression précédente, où l'on suppose l'isothermie du fluide interne (changement de phase), est valable aussi bien en co courant qu'en contre courant.
- Le raisonnement étant algébrique, il sera vrai aussi bien pour une source que pour un puits.
- On notera les pincements sous la forme :

$$\begin{aligned} X_{ie} &= T_i' - T_{ie} \\ X_{is} &= T_i' - T_{is} \end{aligned} \quad (9)$$

Cas particulier étudié :

A la Haye, on a étudié le cas $\min(\dot{q}_c)$ à \dot{q}_f fixée avec des thermostats.

Ici on fait une extension du travail dans le même cas avec des capacités thermiques finies.

Remarques :

- Autres approches possibles :

$$\text{Max}(\dot{q}_f) \text{ à } \dot{q}_c \text{ fixée (soit par thermostats, soit par capacités finies)}$$

- Travaux de Chen [5] :

Il a étudié :

. \dot{q}_f sans contrainte en thermostats (cas développé dans nos travaux).

. \dot{q}_f sans contrainte en présence de capacités finies

Cas étudié actuellement :

- Fonction objectif : $\dot{q}_c = \dot{C}_c(T_{ce} - T_{cs})$ (10)

- On recherche $\min(\dot{q}_c)$ à \dot{q}_f fixée

Avec $\dot{q}_f = \dot{C}_f(T_{fe} - T_{fs}) > 0$ (11)

et une contrainte supplémentaire de surface :

$S_T = S_c + S_i + S_f$ (12)

- Paramètres dimensionnels du problème :

$\dot{C}_c, \dot{C}_i, \dot{C}_f, T_{ce}, T_{ie}, T_{fe}, k_i, k_f, k_c, S_T$ et \dot{q}_f .

- Variable dimensionnelles :

$T_{cs}, T_{is}, T_{fs}, T_{c'}, T_{i'}, T_{f'}, S_c, S_i$ et S_f .

VI.2.2- Résolution analytique dimensionnelle (algébrique) :

Avec les trois contraintes représentées par l'équation de la conservation de l'énergie, l'équation de la conservation de l'entropie et l'expression de la surface totale :

- Conservation de l'énergie :

$$\dot{C}_c(T_{ce} - T_{cs}) + \dot{C}_i(T_{ie} - T_{is}) + \dot{C}_f(T_{fe} - T_{fs}) = 0 \quad (13)$$

- Conservation de l'entropie :

$$\frac{\dot{C}_c(T_{ce} - T_{cs})}{T_{ce} + X_{ce}} + \frac{\dot{C}_i(T_{ie} - T_{is})}{T_{ie} + X_{ie}} + \frac{\dot{C}_f(T_{fe} - T_{fs})}{T_{fe} + X_{fe}} = 0 \quad (14)$$

- Conservation de la surface d'échange :

$$S_T = S_c + S_i + S_f \quad (15)$$

- Contrainte de puissance froide (M.A.F) :

$$\dot{q}_f = \dot{C}_f \cdot (T_{fe} - T_{fs}) = \dot{q}_o \quad (16)$$

- Transfert à la source chaude :

$$NUT_c = \frac{k_c \cdot S_c}{\dot{C}_c} = \ln\left(\frac{X_{ce}}{X_{cs}}\right) \quad (17)$$

- Transfert au puits intermédiaire :

$$NUT_i = \frac{k_i \cdot S_i}{\dot{C}_i} = \ln\left(\frac{X_{ie}}{X_{is}}\right) \quad (18)$$

- Transfert à la source froide :

$$NUT_f = \frac{k_f \cdot S_f}{\dot{C}_f} = \ln\left(\frac{X_{fe}}{X_{fs}}\right) \quad (19)$$

Nous avons 7 équations pour 9 variables ; ainsi ceci représente 2 degrés de liberté (2 variables indépendantes à choisir).

Les équations (17), (18) et (19) permettent de déterminer les surfaces en fonction des pincements :

$$S_c = \frac{\dot{C}_c}{k_c} \cdot \ln\left(\frac{X_{ce}}{X_{cs}}\right) \quad (20)$$

$$S_i = \frac{\dot{C}_i}{k_i} \cdot \ln\left(\frac{X_{ie}}{X_{is}}\right) \quad (21)$$

$$S_f = \frac{\dot{C}_f}{k_f} \cdot \ln\left(\frac{X_{fe}}{X_{fs}}\right) \quad (22)$$

Les 6 variables restantes sont donc X_{ie} , X_{is} , X_{ce} , X_{cs} , X_{fe} et X_{fs} , qui sont liées par les quatres équations suivantes :

$$\dot{C}_c \cdot (X_{ce} - X_{cs}) + \dot{C}_i \cdot (X_{ie} - X_{is}) + \dot{C}_f \cdot (X_{fe} - X_{fs}) = 0 \quad (23)$$

$$\frac{\dot{C}_c (X_{ce} - X_{cs})}{T_{ce} + X_{ce}} + \frac{\dot{C}_i (X_{ie} - X_{is})}{T_{ie} + X_{ie}} + \frac{\dot{C}_f (X_{fe} - X_{fs})}{T_{fe} + X_{fe}} = 0 \quad (24)$$

$$S_T = \frac{\dot{C}_c}{k_c} \ln\left(\frac{X_{ce}}{X_{cs}}\right) + \frac{\dot{C}_i}{k_i} \ln\left(\frac{X_{ie}}{X_{is}}\right) + \frac{\dot{C}_f}{k_f} \ln\left(\frac{X_{fe}}{X_{fs}}\right) \quad (25)$$

$$\dot{q}_o = \dot{C}_f (X_{fe} - X_{fs}) \quad (26)$$

Effectuons un changement de variables :

$$\text{Soient } Y_c = \frac{X_{cs}}{X_{ce}}, \quad Y_i = \frac{X_{is}}{X_{ie}} \quad \text{et} \quad Y_f = \frac{X_{fs}}{X_{fe}}, \quad (27)$$

les équations (20) à (26) deviennent :

$$\begin{cases} S_c = -\frac{\dot{C}_c}{k_c} \ln(Y_c) \\ S_i = -\frac{\dot{C}_i}{k_i} \ln(Y_i) \\ S_f = -\frac{\dot{C}_f}{k_f} \ln(Y_f) \end{cases} \quad (28)$$

$$\dot{C}_c X_{ce} (Y_c - 1) + \dot{C}_i X_{ie} (Y_i - 1) + \dot{C}_f X_{fe} (Y_f - 1) = 0 \quad (29)$$

$$\frac{\dot{C}_c X_{ce} (Y_c - 1)}{T_{ce} + X_{ce}} + \frac{\dot{C}_i X_{ie} (Y_i - 1)}{T_{ie} + X_{ie}} + \frac{\dot{C}_f X_{fe} (Y_f - 1)}{T_{fe} + X_{fe}} = 0 \quad (30)$$

$$S_T = -\frac{\dot{C}_c}{k_c} \ln(Y_c) - \frac{\dot{C}_i}{k_i} \ln(Y_i) - \frac{\dot{C}_f}{k_f} \ln(Y_f) \quad (31)$$

$$\dot{q}_o = \dot{C}_f X_{fe} (Y_f - 1) \quad (32)$$

Remarque :

A ce niveau, les équations (29), (30) et (32) permettent d'envisager la recherche des variables Y_c , Y_i et Y_f en fonction de X_{ce} , X_{ie} et X_{fe} ou réciproquement .

Il semble que la première solution soit la plus simple, sauf dans le cas des petits pincements, où $X_{ce} \ll T_{ce}$, $X_{ie} \ll T_{ie}$ et $X_{fe} \ll T_{fe}$.

Nous posons donc :

$$Z_c = Y_c - 1, Z_i = Y_i - 1 \text{ et } Z_f = Y_f - 1. \quad (33)$$

On obtient le système d'équations suivant :

$$\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot Z_c + \dot{C}_i \cdot X_{ie} \cdot Z_i + \dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot Z_f = 0 \quad (34)$$

$$\frac{\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot Z_c}{T_{ce} + X_{ce}} + \frac{\dot{C}_i \cdot X_{ie} \cdot Z_i}{T_{ie} + X_{ie}} + \frac{\dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot Z_f}{T_{fe} + X_{fe}} = 0 \quad (35)$$

$$\dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot Z_f = \dot{q}_0 \quad (36)$$

Calculons le déterminant de la matrice du système ainsi obtenue :

$$\Delta = \begin{vmatrix} \dot{C}_c \cdot X_{ce} & \dot{C}_i \cdot X_{ie} & \dot{C}_f \cdot X_{fe} \\ \frac{\dot{C}_c \cdot X_{ce}}{T_{ce} + X_{ce}} & \frac{\dot{C}_i \cdot X_{ie}}{T_{ie} + X_{ie}} & \frac{\dot{C}_f \cdot X_{fe}}{T_{fe} + X_{fe}} \\ 0 & 0 & \dot{C}_f \cdot X_{fe} \end{vmatrix}$$

D'où

$$\Delta = \dot{C}_f \cdot X_{fe} \left[\frac{\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot \dot{C}_i \cdot X_{ie}}{T_{ie} + X_{ie}} - \frac{\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot \dot{C}_i \cdot X_{ie}}{T_{ce} + X_{ce}} \right]$$

$$\Leftrightarrow \Delta = \dot{C}_c \cdot \dot{C}_i \cdot \dot{C}_f \cdot X_{ce} \cdot X_{ie} \cdot X_{fe} \left[\frac{1}{T_{ie} + X_{ie}} - \frac{1}{T_{ce} + X_{ce}} \right] \quad (37)$$

Ainsi Z_c s'exprime de la façon suivante :

$$Z_c = \frac{1}{\Delta} \cdot \begin{vmatrix} 0 & \dot{C}_i \cdot X_{ie} & \dot{C}_f \cdot X_{fe} \\ 0 & \frac{\dot{C}_i \cdot X_{ie}}{T_{ie} + X_{ie}} & \frac{\dot{C}_f \cdot X_{fe}}{T_{fe} + X_{fe}} \\ \dot{q}_0 & 0 & \dot{C}_f \cdot X_{fe} \end{vmatrix}$$

D'où

$$Z_c = \frac{\dot{q}_0}{\Delta} \cdot \left[\frac{\dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot \dot{C}_i \cdot X_{ie}}{T_{fe} + X_{fe}} - \frac{\dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot \dot{C}_i \cdot X_{ie}}{T_{ie} + X_{ie}} \right] \quad (38)$$

De plus l'expression de Y_c devient :

$$Y_c = 1 + \frac{\dot{q}_0}{\dot{C}_c \cdot X_{ce}} \cdot \left[\frac{\frac{1}{T_{fe} + X_{fe}} - \frac{1}{T_{ie} + X_{ie}}}{\frac{1}{T_{ie} + X_{ie}} - \frac{1}{T_{ce} + X_{ce}}} \right] \quad (39)$$

De même que :

$$Z_i = \frac{\dot{q}_0}{\Delta} \cdot \left[\frac{\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot \dot{C}_f \cdot X_{fe}}{T_{ce} + X_{ce}} - \frac{\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot \dot{C}_f \cdot X_{fe}}{T_{fe} + X_{fe}} \right] \quad (40)$$

et

$$Y_i = 1 + \frac{\dot{q}_0}{\dot{C}_i \times X_{ie}} \cdot \left[\frac{\frac{1}{T_{fe} + X_{fe}} - \frac{1}{T_{ie} + X_{ie}}}{\frac{1}{T_{ie} + X_{ie}} - \frac{1}{T_{ce} + X_{ce}}} \right] \quad (41)$$

Ainsi que :

$$Z_f = \frac{\dot{q}_0}{\Delta} \cdot \left[\frac{\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot \dot{C}_i \cdot X_{ie}}{T_{ie} + X_{ie}} - \frac{\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot \dot{C}_i \cdot X_{ie}}{T_{ce} + X_{ce}} \right] \quad (42)$$

$$\Leftrightarrow Z_f = Y_f - 1 \quad (43)$$

Ainsi s'achève la résolution analytique.

Il reste alors, connaissant Y_c , Y_i et Y_f en fonction des paramètres et des variables X_{ce} , X_{ie} et X_{fe} , à optimiser la fonction objectif :

$$\text{Min}(\dot{q}_c) = \dot{C}_c \cdot (X_{cs} - X_{ce}) \quad (44)$$

$$\Leftrightarrow \text{Min}(\dot{q}_c) = \dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot Z_c$$

Avec la contrainte :

$$S_T = -\frac{\dot{C}_c}{k_c} \cdot \ln(Y_c) - \frac{\dot{C}_i}{k_i} \cdot \ln(Y_i) - \frac{\dot{C}_f}{k_f} \cdot \ln(Y_f) \quad (45)$$

VI .2.3- Adimensionnement :

Remarque :

Plusieurs adimensionnements sont possibles.

Celui choisi (ou préconisé) permet l'étude pour de petits pincements.

$$Z_f = Y_f - 1 = \frac{\dot{q}_0}{\dot{C}_f \cdot T_{fe}} \cdot \frac{T_{fe}}{X_{fe}} = \frac{\dot{q}_{or}}{x_{fe}} \quad (46)$$

$$Y_i = 1 - \frac{\dot{q}_0}{\dot{C}_f \cdot x_{ie}} \cdot \frac{\dot{C}_f}{\dot{C}_i} \cdot \frac{\frac{1}{T_{fe}} \cdot \frac{1}{1+x_{fe}} - \frac{1}{T_{ce}} \cdot \frac{1}{1+x_{ce}}}{\frac{1}{T_{ie}} \cdot \frac{1}{1+x_{ie}} - \frac{1}{T_{ce}} \cdot \frac{1}{1+x_{ce}}}$$

$$Y_i = 1 - \frac{\dot{q}_{or}}{x_{ie}} \cdot \frac{1}{\theta_{ie}} \cdot \frac{1}{\dot{C}_{ir}} \cdot \frac{\frac{1}{1+x_{fe}} - \frac{1}{\theta_{ce}} \cdot \frac{1}{1+x_{ce}}}{\frac{1}{1+x_{ie}} - \frac{1}{\theta_{ce}} \cdot \frac{1}{1+x_{ce}}} \quad (47)$$

avec $\theta_{ie} = \frac{T_{ie}}{T_{fe}}$, $\theta_{ce} = \frac{T_{ce}}{T_{fe}}$ et $\dot{q}_{or} = \frac{\dot{q}_0}{\dot{C}_f \cdot T_{fe}}$ comme paramètres réduits

et $x_{fe} = \frac{X_{fe}}{T_{fe}}$, $x_{ce} = \frac{X_{ce}}{T_{ce}}$ et $x_{ie} = \frac{X_{ie}}{T_{ie}}$ comme variables réduites

$$Y_c = 1 + \frac{\dot{q}_{or}}{x_{ce}} \cdot \frac{1}{\dot{C}_{cr}} \cdot \frac{\frac{1}{1+x_{fe}} - \frac{1}{\theta_{ie}} \cdot \frac{1}{1+x_{ie}}}{\frac{\theta_{ce}}{\theta_{ie}} \cdot \frac{1}{1+x_{ie}} - \frac{1}{1+x_{ce}}} \quad (48)$$

La fonction objectif réduite s'écrit :

$$\dot{q}_{or} = \frac{\dot{C}_c}{\dot{C}_f} \cdot \frac{X_{ce}}{T_{ce}} \cdot \frac{T_{ce}}{T_{fe}} (Y_c - 1) = \dot{C}_{cr} \cdot x_{ce} \cdot \theta_{ce} \cdot (Y_c - 1) \quad (49)$$

et la contrainte réduite :

$$-NUT_{FT} = \frac{\dot{C}_{ir}}{k_{ir}} \ln Y_i + \frac{\dot{C}_{cr}}{k_{cr}} \ln Y_c + \ln Y_f \quad (50)$$

Les paramètres réduits passent au nombre de 8 au lieu de 11

Tableau I : Tableau des valeurs pour les paramètres réduites

Paramètre réduite	Valeurs courantes	Valeurs centrales
\dot{q}_{or}	0,01 à 0,1	0,05
θ_{ie}	1 à 2	1,5
θ_{ce}	1 à 5	3
\dot{C}_{cr}	0,5 à 2	1
\dot{C}_{ir}	0,5 à 2	1
k_{cr}	0,5 à 2	1
k_{ir}	0,5 à 2	1
NUT_{FT}	0,5 à 5	2

Connaissant les x_{ie} on remonte au calcul des Y_f , Y_i , Y_c (relations 46-47 et 48), puis on calcule les surfaces réduites :

$$s_{ir} = \frac{S_i}{S_t} = - \frac{\dot{C}_i}{\dot{C}_f} \cdot \frac{k_f}{k_i} \cdot \frac{1}{NUT_{FT}} \cdot \ln Y_i$$

$$s_{ir} = - \frac{\dot{C}_{ir}}{k_{ir}} \cdot \frac{1}{NUT_{FT}} \cdot \ln Y_i \quad (51)$$

On déduit enfin la valeur de la fonction objectif :

$$\dot{q}_{cr \text{ opt}} = \dot{C}_{cr} \cdot x_{ce \text{ opt}} \cdot \theta_{ce} (Y_c \text{ opt} - 1) \quad (52)$$

VI.2.4- Cas des faibles pincements

Dans le système d'équations (13) à (19), seule l'équation (14) peut être approximée vu que : $X_{ce} \ll T_{ce}$, $X_{ie} \ll T_{ie}$ et $X_{fe} \ll T_{fe}$ (53)

Remarque : L'approximation d'ordre zéro, ne fournit pas un véritable optimum.

On reprend le calcul, en conservant l'ordre 1 dans l'équation (39) :

Dans ce cas on choisit l'adimensionnement par rapport à la température de référence T_{fe} .

$$Y_c = 1 + \frac{\dot{q}_{or} \cdot T_{fe}}{\dot{C}_c \cdot T_{fe} \cdot X_{ce}} \left[\frac{\frac{1}{1 + \frac{X_{fe}}{T_{fe}}} - \frac{1}{\frac{T_{ie}}{T_{fe}} + \frac{X_{ie}}{T_{fe}}}}{\frac{1}{\frac{T_{ie}}{T_{fe}} + \frac{X_{ie}}{T_{fe}}} - \frac{1}{\frac{T_{ce}}{T_{fe}} + \frac{X_{ce}}{T_{fe}}}} \right] \quad (54)$$

Après introduction des variables réduites l'équation (54) s'écrit :

$$Y_c = 1 + \frac{\dot{q}_{or}}{x_{ce}} \cdot \frac{1}{\dot{C}_{cr}} \cdot \frac{\theta_{ie} - 1}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \left[1 - \frac{\theta_{ie} \cdot x_{fe} - x_{ie}}{\theta_{ie} - 1} + \frac{\theta_{ce} \cdot x_{ce} - \theta_{ie} x_{ie}}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \right] \quad (55)$$

de même pour les autres :

$$Y_i = 1 - \frac{\dot{q}_{or}}{x_{ie}} \cdot \frac{1}{\dot{C}_{ir}} \cdot \frac{\theta_{ce} - 1}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \left[1 - \frac{\theta_{ce} \cdot x_{fe} - x_{ce}}{\theta_{ce} - 1} + \frac{\theta_{ce} \cdot x_{ie} - \theta_{ie} x_{ce}}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \right] \quad (56)$$

$$Y_f = 1 + \frac{\dot{q}_o}{x_{fe}} \quad (57)$$

d'où l'expression de la fonction objectif :

$$\begin{aligned} \min \dot{q}_c &= \dot{C}_c \cdot X_{ce} (Y_c - 1) = \dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot \frac{\dot{q}_{or}}{\dot{C}_c \cdot X_{ce}} \cdot \frac{\theta_{ie} - 1}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \left[1 - \frac{\theta_{ie} \cdot x_{fe} - x_{ie}}{\theta_{ie} - 1} + \frac{\theta_{ce} \cdot x_{ce} - \theta_{ie} x_{ie}}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \right] \\ \min \dot{q}_{cr} &= \dot{q}_{or} \cdot \frac{\theta_{ie} - 1}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \left[1 - \frac{\theta_{ie} \cdot x_{fe} - x_{ie}}{\theta_{ie} - 1} + \frac{\theta_{ce} \cdot x_{ce} - \theta_{ie} x_{ie}}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \right] \end{aligned} \quad (58)$$

et l'expression correspondante de la contrainte :

$$\begin{aligned}
 -\text{NUT}_{\text{FT}} = & \frac{\dot{C}_{\text{ir}}}{k_{\text{ir}}} \cdot \ln \left\{ 1 - \frac{\dot{q}_{\text{or}}}{x_{\text{ie}}} \cdot \frac{1}{\dot{C}_{\text{ir}}} \cdot \frac{\theta_{\text{ce}} - 1}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} \cdot \left[1 - \frac{\theta_{\text{ce}} \cdot x_{\text{fe}} - x_{\text{ce}}}{\theta_{\text{ce}} - 1} + \frac{\theta_{\text{ce}} \cdot x_{\text{ie}} - \theta_{\text{ie}} x_{\text{ce}}}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} \right] \right\} \\
 & + \frac{\dot{C}_{\text{cr}}}{k_{\text{cr}}} \cdot \ln \left\{ 1 + \frac{\dot{q}_{\text{or}}}{x_{\text{ce}}} \cdot \frac{1}{\dot{C}_{\text{cr}}} \cdot \frac{\theta_{\text{ie}} - 1}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} \cdot \left[1 - \frac{\theta_{\text{ie}} \cdot x_{\text{fe}} - x_{\text{ie}}}{\theta_{\text{ie}} - 1} + \frac{\theta_{\text{ce}} \cdot x_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}} x_{\text{ie}}}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} \right] \right\} \quad (59) \\
 & + \ln \left\{ 1 + \frac{\dot{q}_{\text{or}}}{x_{\text{fe}}} \right\}
 \end{aligned}$$

Remarque : Il faut que les quantités sous les logarithmes soient strictement positives, par

$$\text{exemple: } 1 + \frac{\dot{q}_{\text{or}}}{x_{\text{fe}}} > 0 \Rightarrow |x_{\text{fe}}| > \dot{q}_{\text{or}} \quad (59 \text{ a})$$

$$1 + \frac{\dot{q}_{\text{or}}}{x_{\text{ce}}} \cdot \frac{1}{\dot{C}_{\text{cr}}} \cdot \frac{\theta_{\text{ie}} - 1}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} > 0 \Rightarrow |x_{\text{ce}}| > \frac{\dot{q}_{\text{or}}}{\dot{C}_{\text{cr}}} \cdot \frac{\theta_{\text{ie}} - 1}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} \quad (59 \text{ b})$$

$$1 - \frac{\dot{q}_{\text{or}}}{x_{\text{ie}}} \cdot \frac{1}{\dot{C}_{\text{ir}}} \cdot \frac{\theta_{\text{ce}} - 1}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} > 0 \Rightarrow x_{\text{ie}} > \frac{\dot{q}_{\text{or}}}{\dot{C}_{\text{ir}}} \cdot \frac{\theta_{\text{ce}} - 1}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} \quad (59 \text{ c})$$

avec $1 \leq \theta_{\text{ie}} \leq \theta_{\text{ce}}$

En supposant que les quantités dans les logarithmes sont voisines de 1, donc les pincements supérieurs aux seuils précédents (59 a, b et c) de façon conséquente, tout en restant petits (0,10 au maximum), alors la contrainte peut se simplifier sous la forme :

$$\begin{aligned}
 -\text{NUT}_{\text{FT}} = & -\frac{\dot{q}_{\text{or}}}{x_{\text{ie}}} \cdot \frac{1}{k_{\text{ir}}} \cdot \frac{\theta_{\text{ce}} - 1}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} \cdot \left[1 - \frac{\theta_{\text{ce}} \cdot x_{\text{fe}} - x_{\text{ce}}}{\theta_{\text{ce}} - 1} + \frac{\theta_{\text{ce}} \cdot x_{\text{ie}} - \theta_{\text{ie}} x_{\text{ce}}}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} \right] \\
 & + \frac{\dot{q}_{\text{or}}}{x_{\text{ce}}} \cdot \frac{1}{k_{\text{cr}}} \cdot \frac{\theta_{\text{ie}} - 1}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} \cdot \left[1 - \frac{\theta_{\text{ie}} \cdot x_{\text{fe}} - x_{\text{ie}}}{\theta_{\text{ie}} - 1} + \frac{\theta_{\text{ce}} \cdot x_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}} x_{\text{ie}}}{\theta_{\text{ce}} - \theta_{\text{ie}}} \right] + \frac{\dot{q}_{\text{or}}}{x_{\text{fe}}} \quad (60)
 \end{aligned}$$

Pour rechercher l'optimum de la puissance on utilise la méthode des multiplicateurs de de Lagrange.

Le lagrangien s'exprime sous la forme :

$$L = \dot{q}_{or} \cdot \frac{\theta_{ie} - 1}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \cdot \left[1 - \frac{\theta_{ie} \cdot X_{fe} - X_{ie}}{\theta_{ie} - 1} + \frac{\theta_{ce} \cdot X_{ce} - \theta_{ie} X_{ie}}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \right] + \lambda \left\{ \begin{aligned} &NUT_{FT} - \frac{\dot{q}_{or}}{X_{ie}} \cdot \frac{1}{k_{ir}} \cdot \frac{\theta_{ce} - 1}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \cdot \left[1 - \frac{\theta_{ce} \cdot X_{fe} - X_{ce}}{\theta_{ce} - 1} + \frac{\theta_{ce} \cdot X_{ie} - \theta_{ie} X_{ce}}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \right] \\ &+ \frac{\dot{q}_{or}}{X_{ce}} \cdot \frac{1}{k_{cr}} \cdot \frac{\theta_{ie} - 1}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \cdot \left[1 - \frac{\theta_{ie} \cdot X_{fe} - X_{ie}}{\theta_{ie} - 1} + \frac{\theta_{ce} \cdot X_{ce} - \theta_{ie} X_{ie}}{\theta_{ce} - \theta_{ie}} \right] + \frac{\dot{q}_{or}}{X_{fe}} \end{aligned} \right\} \quad (61)$$

d'où le système à résoudre en λ , X_{ie} , X_{ce} et X_{fe} est :

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = \frac{\partial L}{\partial X_{ie}} = \frac{\partial L}{\partial X_{fe}} = \frac{\partial L}{\partial X_{ce}} = 0 \quad (62)$$

La démarche de calcul est alors la même que dans le cas général pour déduire les surfaces réduites et la puissance optimum réduite.

VI.2.5- Maximum de \dot{q}_r sans contrainte

Le maximum de puissance frigorifique , sans contrainte, mais avec des capacités thermiques finies constitue une extension particulière du travail de CHEN [5].

Pour ce cas particulier, on reprend les mêmes équations de départ (13-14-15 et 17-18-19) hormis que l'équation (16) disparaît du système d'équations à résoudre.

Système d'équations correspondant:

$$\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot (Y_c - 1) + \dot{C}_i \cdot X_{ie} \cdot (Y_i - 1) + \dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot (Y_f - 1) = 0 \quad (63)$$

$$\frac{\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot (Y_c - 1)}{T_{ce} + X_{ce}} + \frac{\dot{C}_i \cdot X_{ie} \cdot (Y_i - 1)}{T_{ie} + X_{ie}} + \frac{\dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot (Y_f - 1)}{T_{fe} + X_{fe}} = 0 \quad (64)$$

$$S_T = -\frac{\dot{C}_i}{k_i} \ln Y_i - \frac{\dot{C}_c}{k_c} \ln Y_c - \frac{\dot{C}_f}{k_f} \ln Y_f \quad (65)$$

La fonction objectif est le maximum de \dot{q}_r qui s'écrit:

$$\dot{q}_f = \dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot (Y_f - 1) = \dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot Z_f \quad (66)$$

On pose $Z_i = Y_i - 1$, $Z_f = Y_f - 1$, $Z_c = Y_c - 1$

Le système d'équations (63, 64 et 65) s'écrit :

$$\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot Z_c + \dot{C}_i \cdot X_{ie} \cdot Z_i + \dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot Z_f = 0 \quad (67)$$

$$\frac{\dot{C}_c \cdot X_{ce} \cdot Z_c}{T_{ce} + X_{ce}} + \frac{\dot{C}_i \cdot X_{ie} \cdot Z_i}{T_{ie} + X_{ie}} + \frac{\dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot Z_f}{T_{fe} + X_{fe}} = 0 \quad (68)$$

$$\frac{\dot{C}_c}{k_c} \ln(1 + Z_c) + \frac{\dot{C}_i}{k_i} \ln(1 + Z_i) + \frac{\dot{C}_f}{k_f} \ln(1 + Z_f) = -S_T \quad (69)$$

Ce système est à résoudre en Z_c , Z_i , et Z_f .

Dans le cas où Z_c , Z_i , et Z_f sont petits, c'est à dire le cas où on est proche des thermostats; les équations du système restent les mêmes sauf l'équation (69) qui devient:

$$\frac{\dot{C}_c}{k_c} Z_c + \frac{\dot{C}_i}{k_i} Z_i + \frac{\dot{C}_f}{k_f} Z_f = -S_T \quad (70)$$

On fait le changement de variable suivant :

$$C = \dot{C}_c \cdot Z_c \quad I = \dot{C}_i \cdot Z_i \quad F = \dot{C}_f \cdot Z_f$$

Le système d'équation prend la forme suivante:

$$C \cdot X_{ce} + I \cdot X_{ie} + F \cdot X_{fe} = 0 \quad (71)$$

$$C \cdot \frac{X_{ce}}{T_{ce} + X_{ce}} + I \cdot \frac{X_{ie}}{T_{ie} + X_{ie}} + F \cdot \frac{X_{fe}}{T_{fe} + X_{fe}} = 0 \quad (72)$$

$$\frac{C}{k_c} + \frac{I}{k_i} + \frac{F}{k_f} = -S_T \quad (73)$$

Le déterminant de la matrice du système ainsi obtenue:

$$\Delta = \begin{vmatrix} X_{ce} & X_{ie} & X_{fe} \\ \frac{X_{ce}}{T_{ce} + X_{ce}} & \frac{X_{ie}}{T_{ie} + X_{ie}} & \frac{X_{fe}}{T_{fe} + X_{fe}} \\ \frac{1}{k_c} & \frac{1}{k_i} & \frac{1}{k_f} \end{vmatrix} \quad (74)$$

d'où on déduit C, I et F, c'est à dire, Z_c , Z_i et Z_f (Y_c , Y_i , Y_f)

Un exemple de calcul du maximum de \dot{q}_f est :

$$\begin{aligned} \text{MAX} \dot{q}_f &= \text{MAX}(\dot{C}_f \cdot X_{fe} \cdot Z_f) = \text{MAX}(X_{fe} \cdot F) \\ \text{MAX} \dot{q}_f &= \text{Max.} \frac{-S_T \cdot X_{ce} \cdot X_{ie} \cdot X_{fe} \cdot \left[\frac{1}{T_{ie} + X_{ie}} - \frac{1}{T_{ce} + X_{ce}} \right]}{\Delta} \end{aligned} \quad (75)$$

où Δ s'exprime ainsi :

$$\begin{aligned} \Delta &= X_{ce} X_{ie} X_{fe} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \frac{1}{T_{ce} + X_{ce}} & \frac{1}{T_{ie} + X_{ie}} & \frac{1}{T_{fe} + X_{fe}} \\ \frac{1}{k_c X_{ce}} & \frac{1}{k_i X_{ie}} & \frac{1}{k_f X_{fe}} \end{vmatrix} \\ \text{MAX} \dot{q}_f &= \text{MAX} \left\{ \frac{-S_T \left[\frac{1}{T_{ie} + X_{ie}} - \frac{1}{T_{ce} + X_{ce}} \right]}{\frac{1}{k_f X_{fe}} \left(\frac{1}{T_{ie} + X_{ie}} - \frac{1}{T_{ce} + X_{ce}} \right) + \frac{1}{k_i X_{ie}} \left(\frac{1}{T_{ie} + X_{ie}} - \frac{1}{T_{fe} + X_{fe}} \right) + \frac{1}{k_c X_{ce}} \left(\frac{1}{T_{fe} + X_{fe}} - \frac{1}{T_{ce} + X_{ce}} \right)} \right\} \end{aligned}$$

Cette expression ressemble à celle obtenue par CHEN [4].

VI.3- Méthode numérique de résolution :

Pour faire cette étude d'optimisation, nous avons utilisé le logiciel MATLAB, qui possède toute une gamme de fonction avec des sous-routines dont la fonction " **constr.m** ", cette dernière utilise une méthode de recherche de minimum d'une fonction de plusieurs variables soumise à des contraintes.

La fonction " **constr.m** " fait appel à des sous-routines dont la principale est celle qui utilise la méthode d'optimisation de Lagrange.

La résolution du problème passe par la résolution d'un système d'équations à l'aide d'une méthode itérative. Le programme nécessite donc une initialisation pour débiter la recherche de l'optimum désiré (voir annexe constr.m).

Le choix du point initial est un problème délicat pour notre calcul. En effet, suivant certaines valeurs, le programme peut converger ou diverger. Dans le cas où il y a convergence, il faut s'assurer que le résultat obtenu est bien une solution physiquement acceptable.

Nous n'avons pas pu sortir des résultats de façon continue et systématique, par ce qu'il n'y a pas de méthode permettant de déterminer un point initial qui aboutit à une solution physique à notre connaissance.

VI.4- Résultats numériques

Quelques résultats numériques obtenus sur les modèles adimensionnels sont présentés dans ce paragraphe, et illustrent la sensibilité de l'optimum obtenue en terme de valeur optimale de la fonction objectif d'une part et du point d'état associé d'autre part, conformément aux plages de variation des paramètres définies au paragraphe VI.2.

VI.4.1- Minimisation de la puissance calorifique à fournir à la machine

La puissance froide étant imposée, les figures (VI.4.1 a,b,c et VI.4.2 a,b,c) montrent respectivement l'évolution des pincements aux sources et puits. La figure VI.4.1 montre dans ce cas que la valeur absolue de ceux-ci est une fonction décroissante de θ_{cc} . Globalement la décroissance dans un rapport voisin de deux des trois pincements est associée à un doublement de θ_{cc} , température réduite de la source chaude.

Dans le même temps une augmentation de θ_{ic} , température réduite du puits intermédiaire augmente de façon significative les pincements à la source froide et à la source chaude ; par

contre le phénomène peut s'inverser au puits intermédiaire, selon la valeur de θ_{cc} (l'inversion se produit pour une valeur de θ_{cc} , voisine de 2,9).

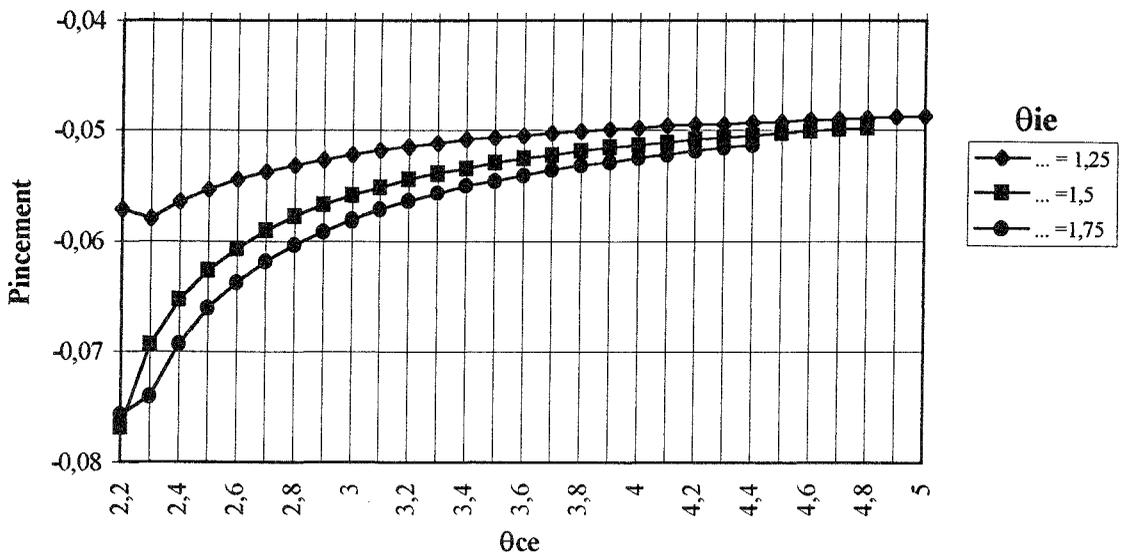


Figure VI.4.1 a : Evolution du pincement de la source froide en fonction de θ_{cc} paramétré en θ_{ie}

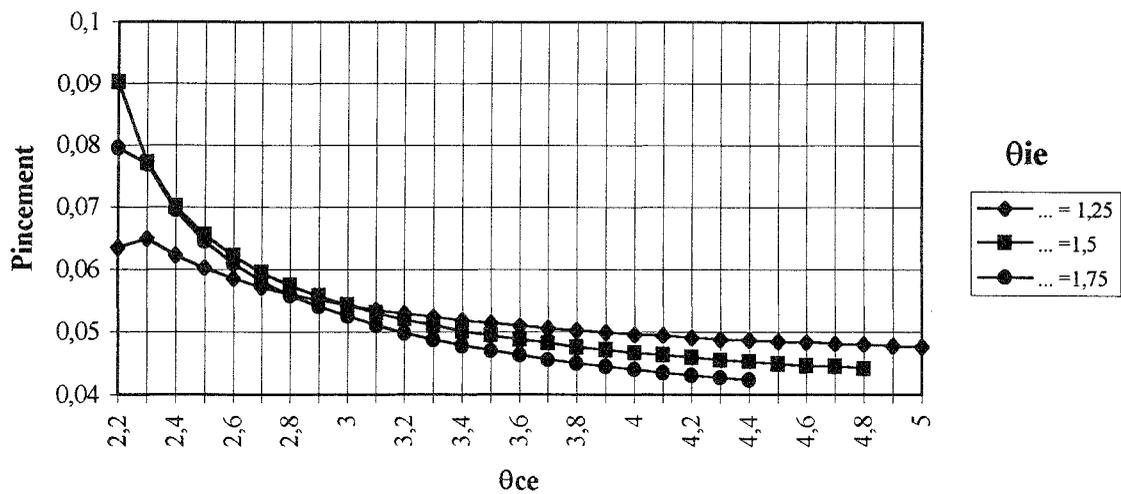


Figure VI.4.1 b : Evolution du pincement de la source intermédiaire en fonction de θ_{cc} paramétré en θ_{ie}

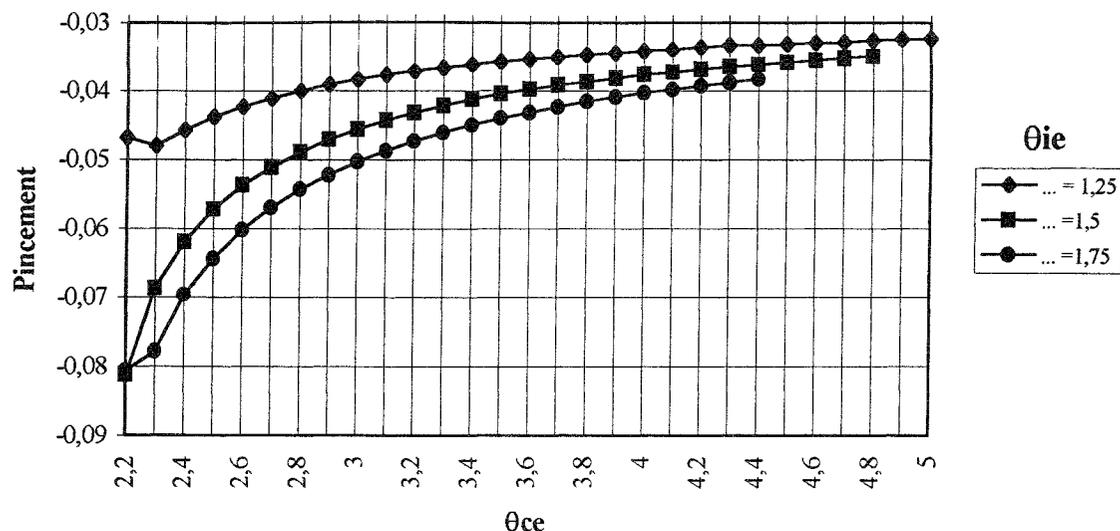


Figure VI.4.1 c : Evolution du pincement de la source chaude en fonction de θ_{ce} paramétré en θ_{ie}

La figure VI.4.2.a- indique que dans les mêmes conditions la puissance chaude minimale réduite est une fonction décroissante de θ_{ce} , mais croissante de θ_{ie} .

La répartition des surfaces correspondant à l'optimum précédent ressort des figures VI.4.2.b-c ; la troisième surface réduite est obtenue par différence à l'unité des deux autres.

Il apparaît clairement sur la figure VI.4.2.b que la surface réduite au puits intermédiaire est sensible à θ_{ie} , mais ne dépend pratiquement pas de θ_{ce} dans la plage physiquement acceptable des valeurs de ce paramètre.

Par contre (figure VI.4.2.c), la surface allouée à la source chaude dépend de ces deux températures réduites : elle décroît avec θ_{ce} et croît avec θ_{ie} .

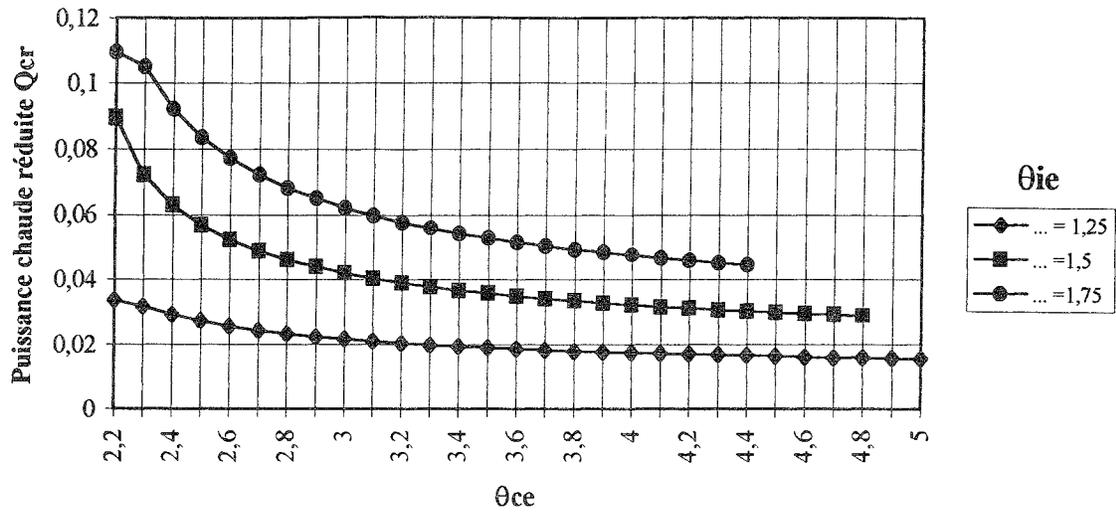


Figure VI.4.2 a : Evolution de la puissance chaude minimale réduite en fonction de θ_{ce} paramétré en θ_{ie}

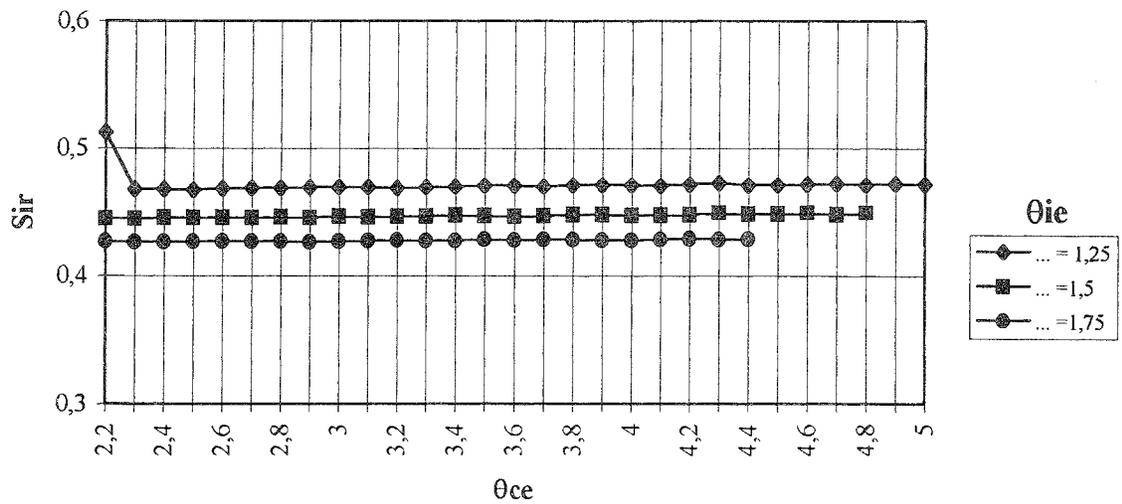


Figure VI.4.2 b : Evolution de la surface intermédiaire réduite en fonction de θ_{ce} paramétré en θ_{ie}

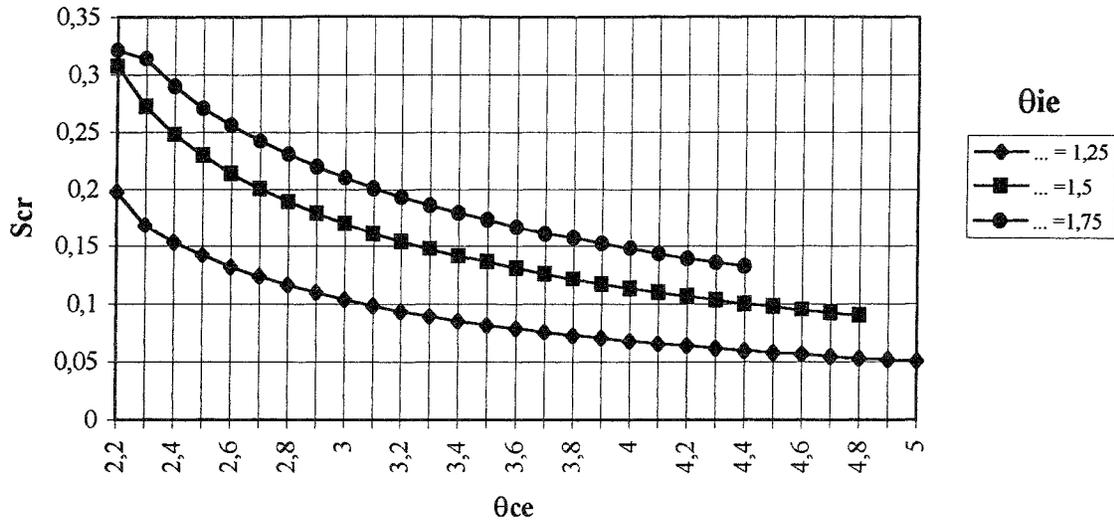


Figure VI.4.2 c : Evolution de la surface chaude réduite en fonction de θ_{ce} paramétré en θ_{ie}

Les figures VI.4.3 et VI.4.4 complètent les remarques précédentes.

On remarquera simplement, que la surface réduite au puits intermédiaire reste toujours très voisine par valeur inférieure de 50% de la surface totale allouée. La répartition de surface entre la source chaude et la source froide évolue par contre très fortement en fonction des niveaux de température mis en jeu (θ_{ce} , θ_{ie}).

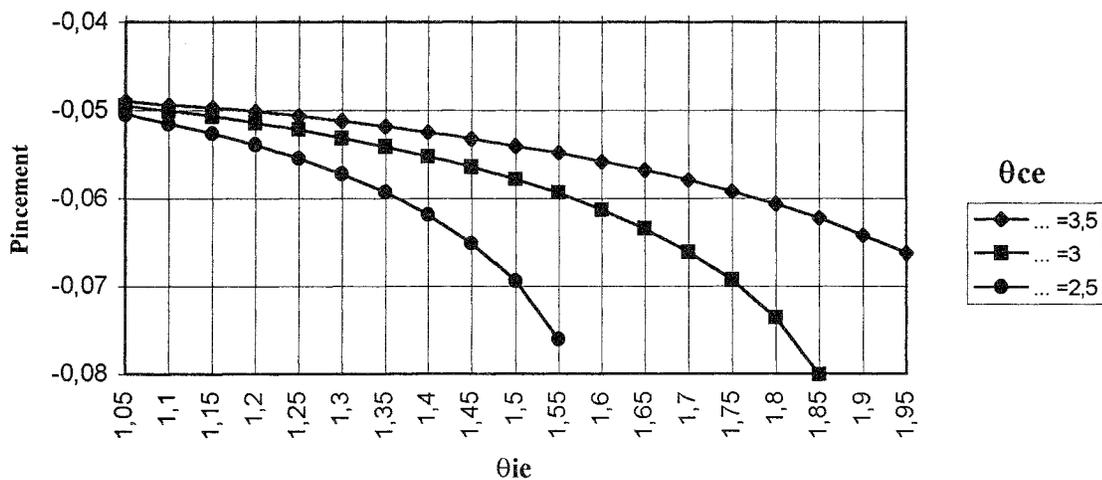


Figure VI.4.3 a : Evolution du pincement de la source froide en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{ce}

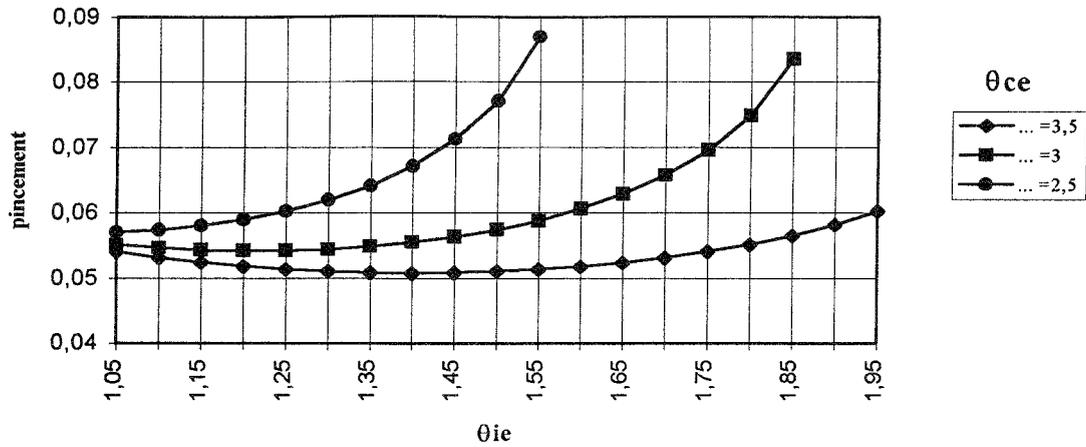


Figure VI.4.3 b : Evolution du pincement de la source intermédiaire en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{ce}

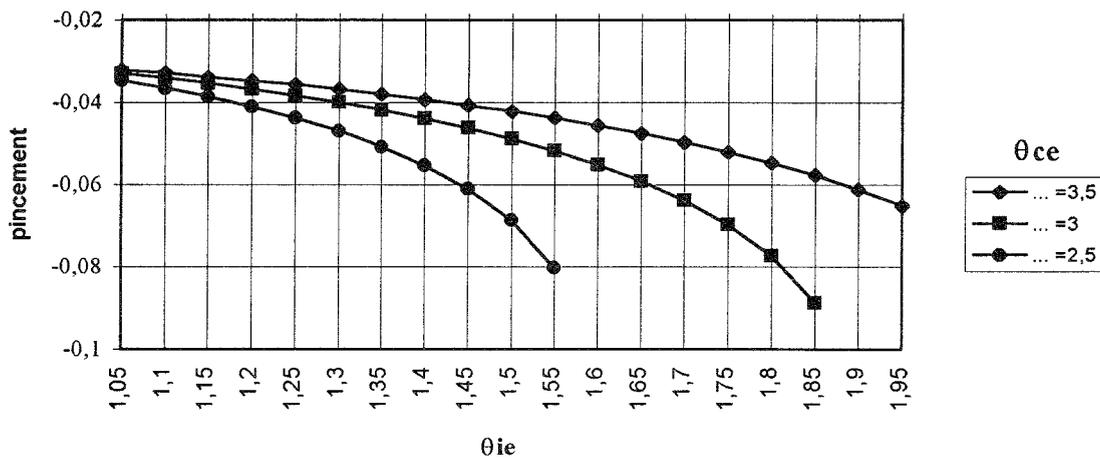


Figure VI.4.3 c : Evolution du pincement de la source chaude en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{ce}

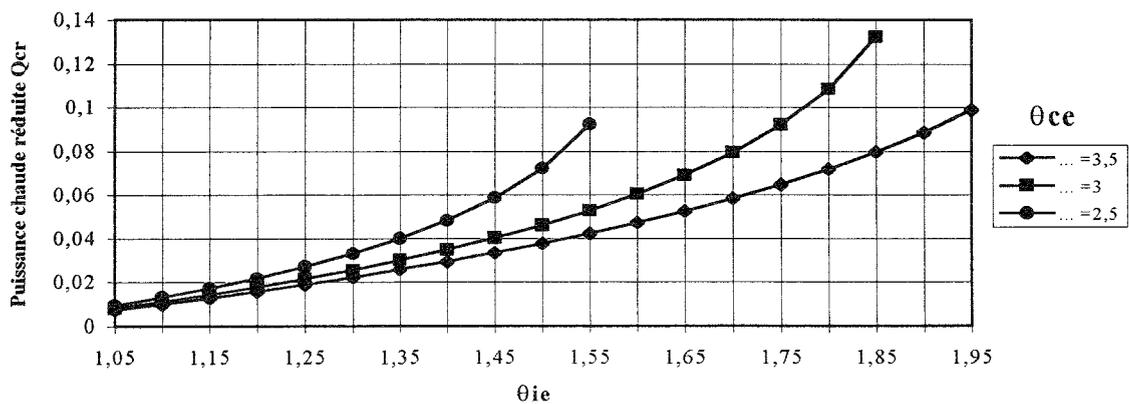


Figure VI.4.4 a : Evolution de la puissance chaude minimale réduite en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{ce}

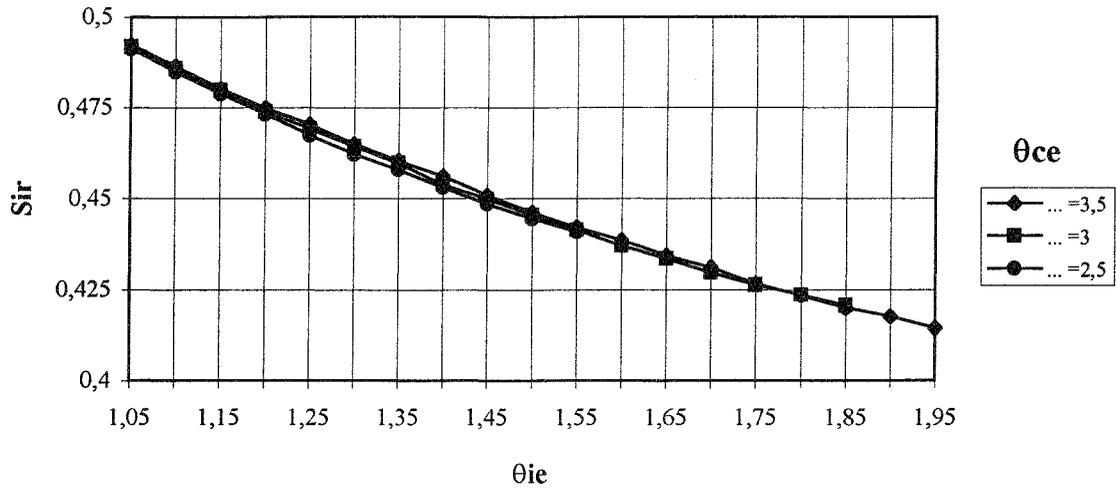


Figure VI.4.4 b : Evolution de la surface intermédiaire réduite en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{ce}

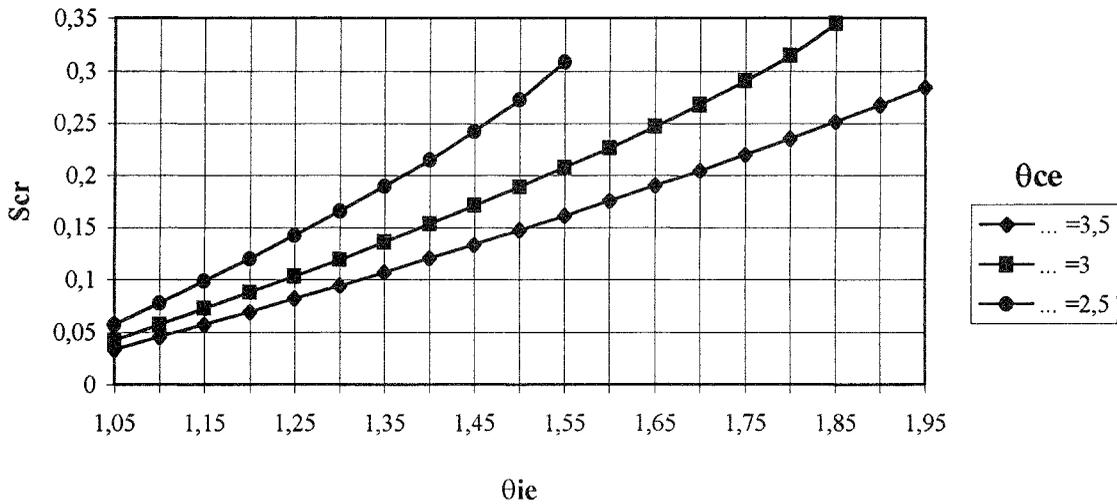


Figure VI.4.4 c : Evolution de la surface chaude réduite en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{ce}

Les figures VI.4.5-6 montrent que la disponibilité en surface totale affectent les pincements (mais aussi fortement le coût de la machine).

Plus on disposera de surface d'échange, plus les pincements à l'optimum (pour le cas étudié) seront faibles aux sources et puits, comme on pouvait le penser (figure VI.4.5) ; on voit par contre sur la figure VI.4.6.b que la puissance calorifique diminue quand la surface totale augmente (diminution du coût de fonctionnement).

On peut donc penser qu'il existe un optimum thermoéconomique qui reste à déterminer ; ceci fait partie des perspectives du présent travail.

Enfin la figure (VI.4.6.a), montre que la répartition relative des surfaces est affectée de façon non négligeable par la surface totale disponible pour les transferts de chaleur.

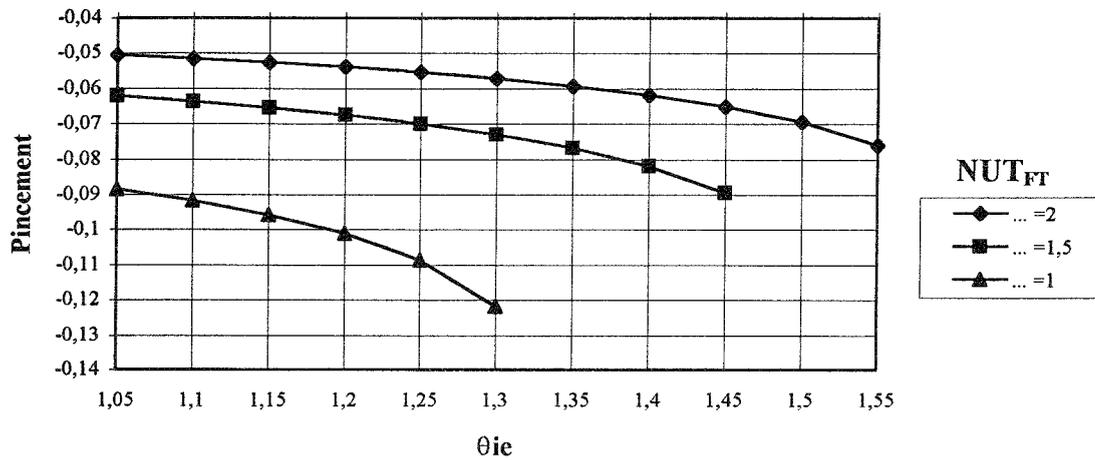


Figure VI.4.5 a : Evolution du pincement de la source froide en fonction de θ_{ie} paramétré en NUT_{FT}

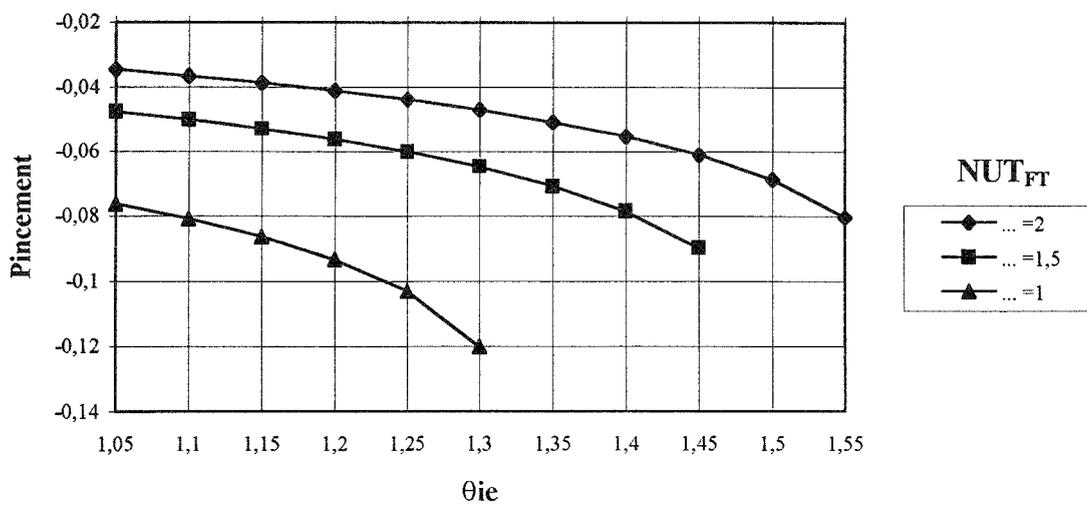


Figure VI.4.5 b : Evolution du pincement de la source chaude en fonction de θ_{ie} paramétré en NUT_{FT}

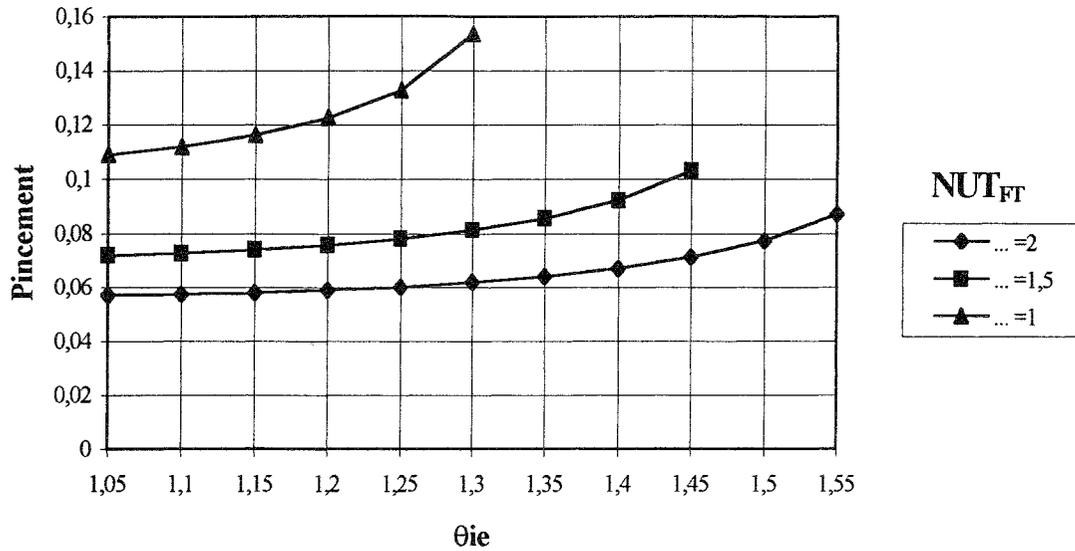


Figure VI.4.5 c : Evolution du pincement de la source intermédiaire en fonction de θ_{ie} paramétré en NUT_{FT}

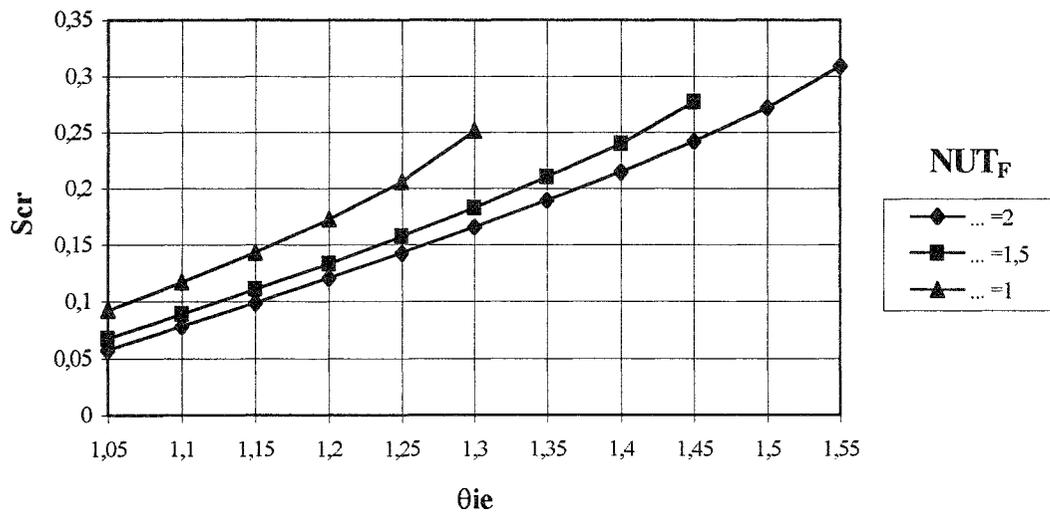


Figure VI.4.6 a : Evolution de la surface de la source chaude en fonction de θ_{ie} paramétré en NUT_{FT}

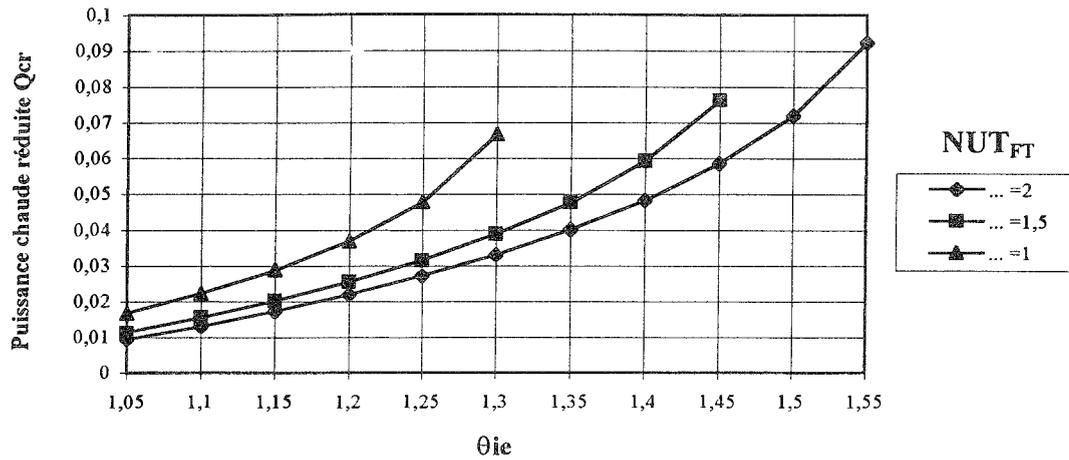


Figure VI.4.6 b : Evolution de la puissance chaude réduite en fonction de θ_{ie} paramétré en NUT_{FT}

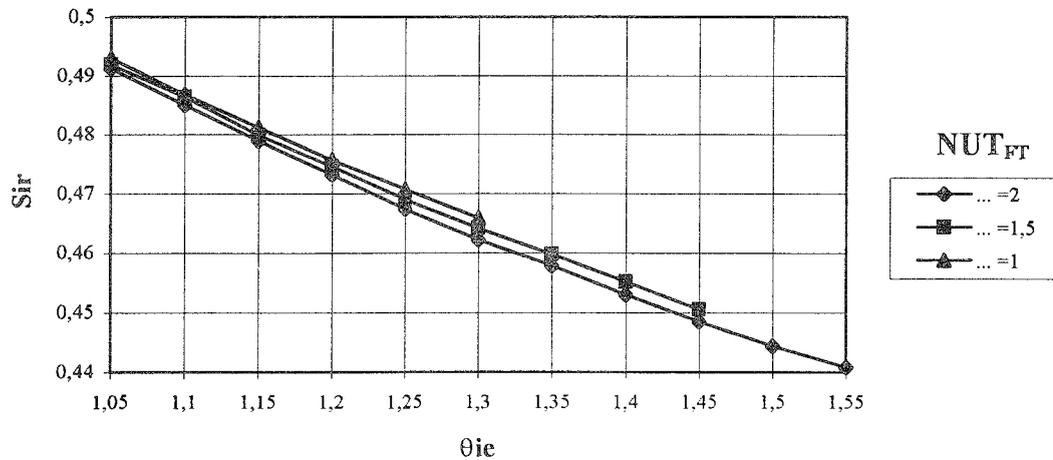


Figure VI.4.6 c : Evolution de la surface de la source intermédiaire en fonction de θ_{ie} paramétré en NUT_{FT}

VI.4.2- Cas des faibles pincements

La figure VI.4.7 montre l'ensemble des résultats obtenus, dans le même cas de figure qu'au paragraphe précédent, mais en utilisant l'approximation des petits pincements. On peut juger à partir de ces courbes du degré de validité de l'approximation.

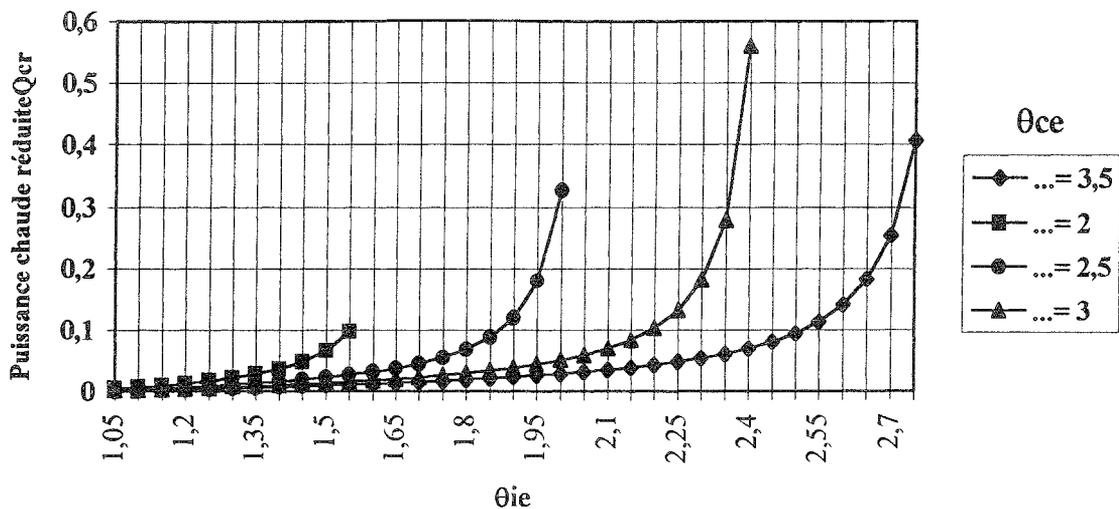


Figure VI.4.7 a : Evolution de la puissance chaude minimale réduite en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{ce}

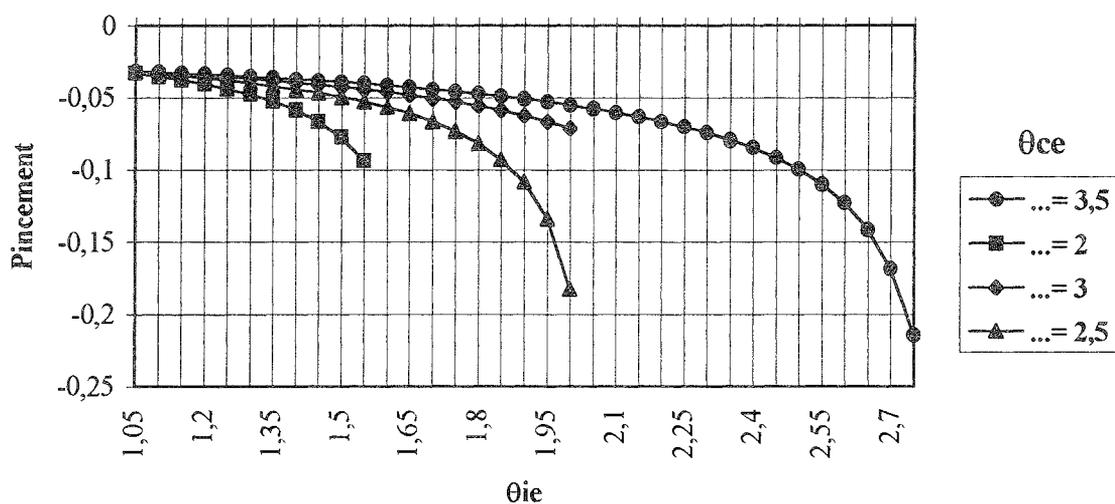


Figure VI.4.7 b : Evolution du pincement de la source froide en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{ce}

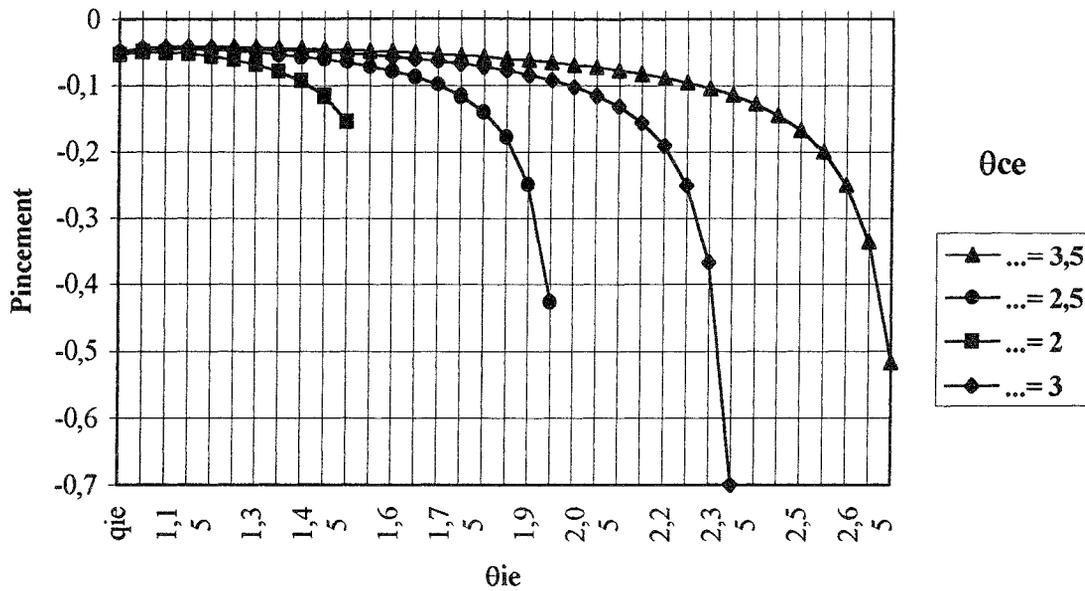


Figure VI.4.7 c : Evolution du pincement de la source chaude en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{ce}

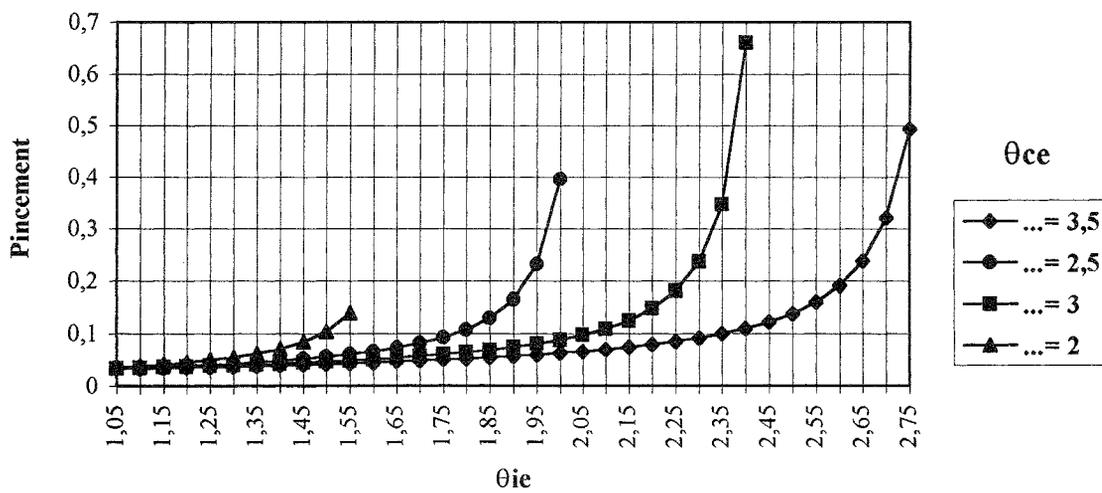


Figure VI.4.7 d : Evolution du pincement de la source intermédiaire en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{ce}

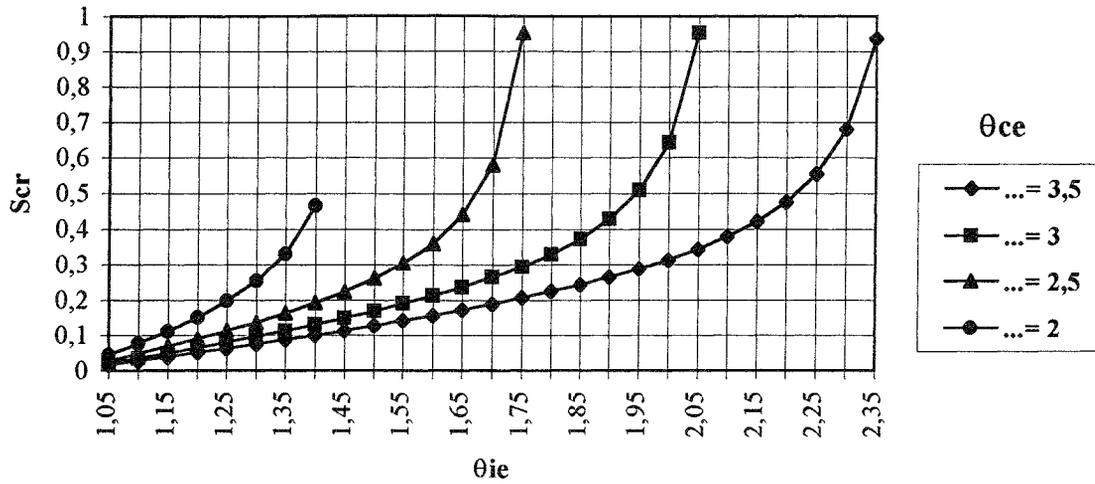


Figure VI.4.7 e : Evolution de la surface de la source chaude en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{cc}

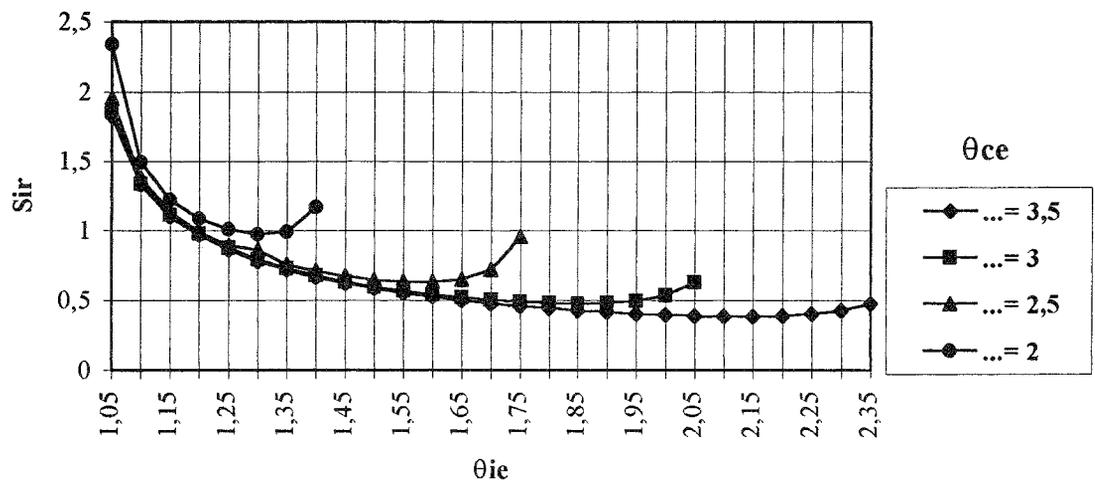


Figure VI.4.7 f : Evolution de la surface de la source intermédiaire en fonction de θ_{ie} paramétré en θ_{cc}

Aussi en considérant le pincement à la source froide correspond à l'optimum, on voit que pour

$\theta_{cc} = 2,5$ et $\theta_{ie} = 1,35$ on a : $x_{fe} \approx -0,06$ cas général
 $x_{fe} \approx -0,045$ cas faibles pincements

$\theta_{cc} = 3$ et $\theta_{ie} = 1,3$ on a : $x_{fe} \approx -0,052$ cas général
 $x_{fe} \approx -0,05$ cas faibles pincements

Donc le point d'état reste sensible à l'approximation, selon les valeurs des paramètres.

La valeur de l'optimum reste par contre assez fortement affectée par l'approximation

$$\dot{q}_{cr} = 0,1 \quad \theta_{ce} = 3 \text{ et } \theta_{ic} = 1,77 \quad \text{cas général}$$

$$\dot{q}_{cr} \approx 0,03 \quad \theta_{ce} = 3 \text{ et } \theta_{ic} = 1,77 \quad \text{cas faibles pincements}$$

Il y a lieu de rester très prudent sur l'usage de cette approximation, dont l'intérêt réside dans la rapidité des calculs numériques.

L'idéal serait une comparaison systématique des résultats pour déterminer un écart maximum (par exemple quelques pourcent) ; mais on perd alors l'intérêt de l'approximation (perte de temps liée à cette recherche préalable)

VI.5- Conclusion du chapitre

Ce chapitre a permis de montrer que si les études entreprises sur les composants des machines à adsorption sont importantes pour la maîtrise des mécanismes de transfert, le fonctionnement global de la machine fait intervenir des couplages forts entre composants, qui commande la configuration optimale de la machine en vue d'un objectif de puissance donné.

Ainsi le modèle proposé constitue une étape dans l'amélioration de la description thermodynamique du système, en relation avec *les conditions thermiques* à satisfaire (pincements aux échangeurs), ainsi qu'avec *les conditions de conception* (distribution des surfaces d'échange). On remarquera par ailleurs que ce modèle restitue les résultats de la solution purement analytique proposée par CHEN [5], qui semble un cas particulier de ceux que nous avons étudié.

Il apparaît qu'un prolongement thermoéconomique semble souhaitable dans l'avenir ; ceci constituera une des suites de ce travail.

Références

- [1] : R.BOUSSEHAIN, M.FEIDT, " Cycle optimization for adsorption of refrigeration system with three heat reservoirs ", Mathematische Modellierung Kassel, 1986, Proceedings Mc Graw-Hill, pp.46-56.
- [2] : M.FEIDT, R.BENELMIR, " première approche de l'optimisation des échangeurs de chaleur d'une machine à trois sources", journée S.F.T. Optimisation thermoéconomique des procédés, le 8 avril 1992, Paris.
- [3] : E.VASILESCU, D.ISVORANU, V.RADCENCO, " Three sources machines optimization based on external dissipation ", FLOWERS '94, Florence, 1994, Proceedings, pp.469-476.
- [4] : M.DINY, R.BOUSSEHAIN, M.FEIDT, " Optimisation thermodynamique du cycle des machines à froid trithermes ", 19th international congress of refrigeration, LA HAYE, 1995, Proceedings, vol. IV.a, pp.147-154.
- [5] : J.CHEN, "Performance of absorption refrigeration cycle at maximum cooling rate ", CRYOGENICS, 1994, vol. 34, n°12, pp.997-1000.

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Conclusion générale et perspectives

L'étude expérimentale a permis de mettre en évidence le phénomène de front d'adsorption dans le générateur et l'influence de la pression locale sur le transport de masse.

Les transferts de chaleur et de masse dans le grain ont été abordés d'une manière originale par rapport aux travaux antérieurs, en considérant une approche en structure poreuse bidispersée du charbon actif. La modélisation proposée décrit le couplage des transferts thermique et massique et tient compte de la diffusion massique microporeuse et macroporeuse du méthanol.

La modélisation des transferts de chaleur et de masse dans le générateur a été abordée par une approche volumique. Nous avons pu nous affranchir des difficultés de généralisation de l'approche granulaire en utilisant une méthode de volume de contrôle. Cette technique a été utilisée pour la résolution de l'équation de l'énergie, couplée au transport de masse par le terme source, représentant la chaleur isostérique de sorption.

Grâce à une approche thermique et thermodynamique de l'adsorption, la méthode simplifiée utilisée décrit l'échange dans le volume de contrôle.

L'évolution dans le temps des champs de température et de masse sorbée est représenté suivant la direction radiale du volume élémentaire.

Malgré les difficultés rencontrées lors de la résolution numérique des équations, quelques résultats ont été proposés, moyennant des hypothèses simplificatrices justifiées. Ainsi, des perspectives d'études fondamentales sont ouvertes pour le futur.

Par ailleurs, une étude thermodynamique du cycle de fonctionnement et de caractérisation thermique des composants du prototype a été réalisée.

Cette étude a permis la caractérisation du fonctionnement de l'installation en termes de bilans calorifiques, de coefficients de performance frigorifiques et d'évolution au cours du cycle, de conductances thermiques et d'efficacités des composants de la machine.

La comparaison des performances obtenues, en fonction de l'énergie calorifique utilisée dans le générateur, montre que dans le cas du chauffage aéraulique, le temps total du cycle est réduit de 40% par rapport à celui obtenu par chauffage électrique.

L'étude théorique d'optimisation thermodynamique d'une machine tritherme a permis de dégager des corrélations entre les conditions thermiques de fonctionnement et les contraintes dimensionnelles des échangeurs, la puissance étant fixée par ailleurs.

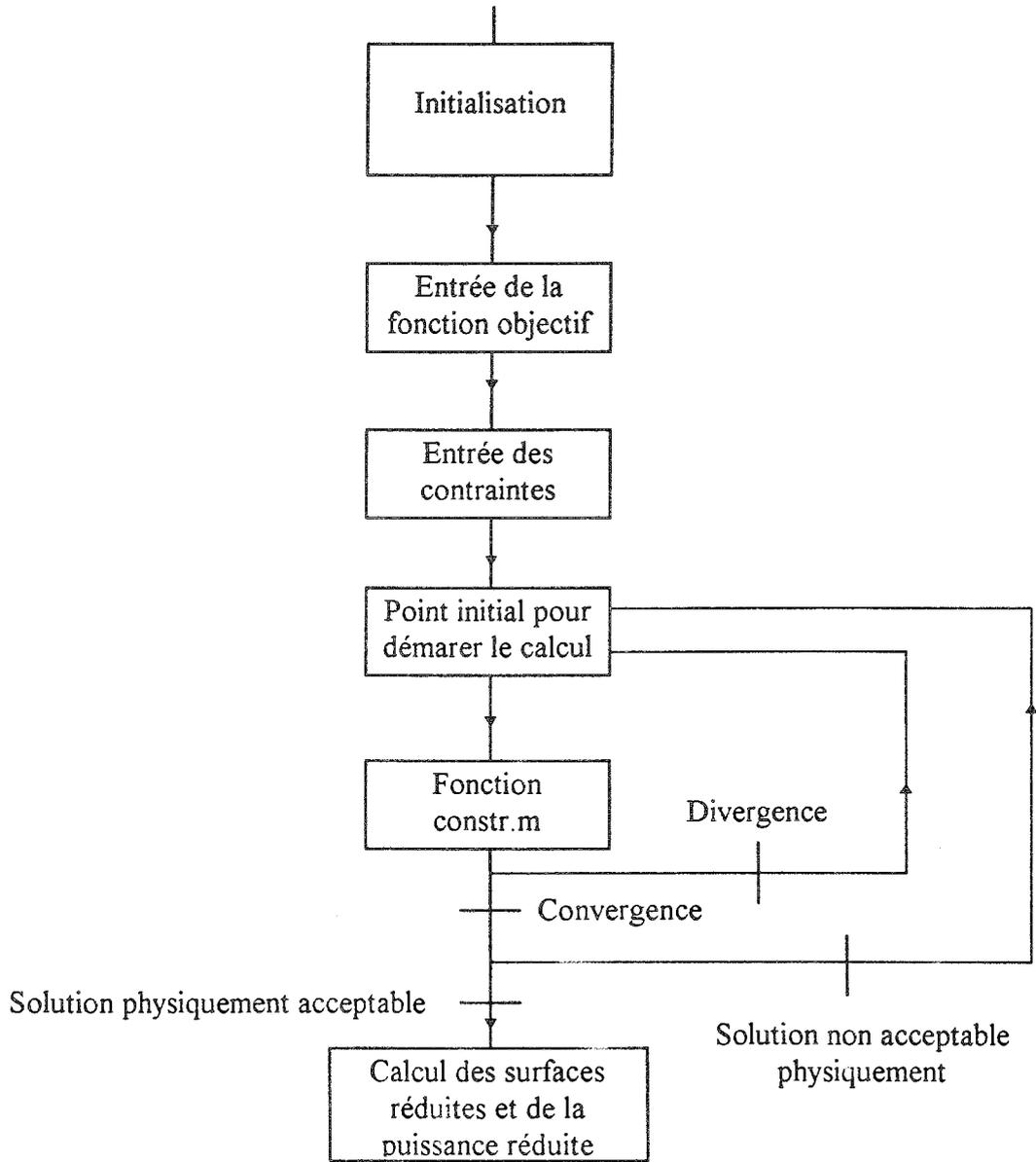
Les résultats expérimentaux obtenus montre la nécessité de maîtriser les commutations de vannes, de réduire le temps de cycle et d'améliorer le transfert thermique entre la paroi et le charbon.

De nombreuses perspectives de recherche subsistent ; l'optimisation du fonctionnement de la machine nécessite la réalisation de nombreuses expériences pour étudier l'influence des différents paramètres. Certaines sont déjà engagées dans ce sens.

De plus, il convient d'améliorer le modèle de transfert au niveau du grain bidispersé et d'étudier la sensibilité des différents paramètres intervenant dans le transfert de chaleur et de masse.

ANNEXE

Organigramme du programme d'optimisation



```
function [x, OPTIONS,lambda,
HESS]=constr(FUN,x,OPTIONS,VLB,VUB,GRADFUN,P1,P2,P3,P4,P5,P6,P7,P8,P9,P10,P
11,P12,P13,P14,P15)
%CONSTR Finds the constrained minimum of a function of several variables.
%
% X=CONSTR('FUN',X0) starts at X0 and finds a constrained minimum to
% the function which is described in FUN (usually an M-file: FUN.M).
% The function 'FUN' should return two arguments: a scalar value of the
% function to be minimized, F, and a matrix of constraints, G:
% [F,G]=FUN(X). F is minimized such that G < zeros(G).
%
% X=CONSTR('FUN',X,OPTIONS) allows a vector of optional parameters to
% be defined. For more information type HELP FOPTIONS.
%
% X=CONSTR('FUN',X,OPTIONS,VLB,VUB) defines a set of lower and upper
% bounds on the design variables, X, so that the solution is always in
% the range VLB < X < VUB.
%
% X=CONSTR('FUN',X,OPTIONS,VLB,VUB,'GRADFUN') allows a function
% 'GRADFUN' to be entered which returns the partial derivatives of the
% function and the constraints at X: [gf,GC] = GRADFUN(X).

% Copyright (c) 1990 by the MathWorks, Inc.
% Andy Grace 7-9-90.

%
% X=CONSTR('FUN',X,OPTIONS,VLB,VUB,GRADFUN,P1,P2,...) allows
% coefficients, P1, P2, ... to be passed directly to FUN:
% [F,G]=FUN(X,P1,P2,...). Empty arguments ([]) are ignored.

global OPT_STOP OPT_STEP;
OPT_STEP = 0;
OPT_STOP = 0;

% Set up parameters.
XOUT(:)=x;

if ~any(FUN<48) % Check alphanumeric
    etype = 1;
    evalstr = [FUN,];
    evalstr=[evalstr, '(x)'];
    for i=1:nargin - 6
        etype = 2;
        evalstr = [evalstr, 'P',int2str(i)];
    end
end
```

```
    evalstr = [evalstr, ');
else
    etype = 3;
    evalstr=[FUN,','; g=g(:)'];
end

if nargin < 3, OPTIONS=[]; end
if nargin < 4, VLB=[]; end
if nargin < 5, VUB=[]; end
if nargin < 6, GRADFUN=[]; end

VLB=VLB(:); lenvlb=length(VLB);
VUB=VUB(:); lenvub=length(VUB);
bestf = Inf;

nvars = length(XOUT);

CHG = 1e-7*abs(XOUT)+1e-7*ones(nvars,1);
if lenvlb*lenvub>0
    if any(VLB(1:lenvub)>VUB), error('Bounds Infeasible'), end
end
for i=1:lenvlb
    if lenvlb>0,if XOUT(i)<VLB(i),XOUT(i)=VLB(i)+1e-4; end,end
end
for i=1:lenvub
    if lenvub>0,if XOUT(i)>VUB(i),XOUT(i)=VUB(i);CHG(i)=-CHG(i);end,end
end

% Used for semi-infinite optimization:
s = nan; POINT =[]; NEWLAMBDA =[]; LAMBDA = []; NPOINT =[]; FLAG = 2;

x(:) = XOUT;

if etype == 1,
    [f, g(:)] = feval(FUN,x);
elseif etype == 2
    [f, g(:)] = eval(evalstr);
else
    eval(evalstr);
end

ncstr = length(g);
if ncstr == 0
    g = -1;
    ncstr = 1;
    if etype ~= 3
        evalstr = ['[f,g] =', evalstr, ','];
        etype = 3;
    end
end
```

```
        end
        evalstr = [evalstr,'g=-1;'];
end

if length(GRADFUN)
    if ~any(GRADFUN<48) % Check alphanumeric
        gtype = 1;
        evalstr2 = [GRADFUN,'(x)'];
        for i=1:nargin - 6
            gtype = 2;
            evalstr2 = [evalstr2,',P',int2str(i)];
        end
        evalstr2 = [evalstr2, ')'];
    else
        gtype = 3;
        evalstr2=[GRADFUN,',';];
    end
end

end

OLDX=XOUT;
OLDG=g;
OLDgf=zeros(nvars,1);
gf=zeros(nvars,1);
OLDAN=zeros(ncstr,nvars);
LAMBDA=zeros(ncstr,1);
sizep = length(OPTIONS);
OPTIONS = foptions(OPTIONS);
if lenvlb*lenvlb>0
    if any(VLB(1:lenvub)>VUB), error('Bounds Infeasible'), end
end
for i=1:lenvlb
    if lenvlb>0,if XOUT(i)<VLB(i),XOUT(i)=VLB(i)+eps; end,end
end
OPTIONS(18)=1;
if OPTIONS(1)>0
    disp("")
    disp('f-COUNT FUNCTION    MAX{g}    STEP Procedures');
end
HESS=eye(nvars,nvars);
if sizep<1 |OPTIONS(14)==0, OPTIONS(14)=nvars*100;end
OPTIONS(10)=1;
OPTIONS(11)=1;
GNEW=1e8*CHG;

%-----Main Loop-----
status = 0;
```

```

while status ~= 1

%-----GRADIENTS-----

    if ~length(GRADFUN) | OPTIONS(9)
% Finite Difference gradients
        POINT = NPOINT;
        oldf = f;
        oldg = g;
        ncstr = length(g);
        FLAG = 0; % For semi-infinite
        gg = zeros(nvars, ncstr); % For semi-infinite
% Try to make the finite differences equal to 1e-8.
        CHG = -1e-8./(GNEW+eps);
        CHG = sign(CHG+eps).*min(max(abs(CHG),OPTIONS(16)),OPTIONS(17));
        OPT_STEP = 1;
        for gcnt=1:nvars
            if gcnt == nvars, FLAG = -1; end
            temp = XOUT(gcnt);
            XOUT(gcnt)= temp + CHG(gcnt);
            x(:)=XOUT;
            if etype == 1,
                [f, g(:)] = feval(FUN,x);
            elseif etype == 2
                [f, g(:)] = eval(evalstr);
            else
                eval(evalstr);
            end
            OPT_STEP = 0;
% Next line used for problems with varying number of constraints
            if ncstr~=length(g), diff=length(g); g=v2sort(oldg,g); end
            gf(gcnt,1) = (f-oldf)/CHG(gcnt);
            gg(gcnt,:) = (g - oldg)/CHG(gcnt);
            XOUT(gcnt) = temp;
        end
% Gradient check
        if OPTIONS(9) == 1
            gfFD = gf;
            ggFD = gg;
            x(:)=XOUT;
            if gtype == 1
                [gf(:), gg] = feval(GRADFUN, x);
            elseif gtype == 2
                [gf(:), gg] = eval(evalstr2);
            else
                eval(evalstr2);
            end
            disp('Function derivative')
            graderr(gfFD, gf, evalstr2);
        end
    end
end

```

```

                disp('Constraint derivative')
                graderr(ggFD, gg, evalstr2);
                OPTIONS(9) = 0;
            end
            FLAG = 1; % For semi-infinite
            OPTIONS(10) = OPTIONS(10) + nvars;
            f=oldf;
            g=oldg;
        else
            % User-supplied gradients
            if gtype == 1
                [gf(:), gg] = feval(GRADFUN, x);
            elseif gtype == 2
                [gf(:), gg] = eval(evalstr2);
            else
                eval(evalstr2);
            end
        end
        AN=gg';
        how="";

%-----SEARCH DIRECTION-----

        for i=1:OPTIONS(13)
            schg=AN(i,:)*gf;
            if schg>0
                AN(i,:)=-AN(i,:);
                g(i)=-g(i);
            end
        end

        if OPTIONS(11)>1 % Check for first call
            % For equality constraints make gradient face in
            % opposite direction to function gradient.
            if OPTIONS(7)~=5,
                NEWLAMBDA=LAMBDA;
            end
            [ma,na] = size(AN);
            GNEW=gf+AN'*NEWLAMBDA;
            GOLD=OLDgf+OLDAN'*LAMBDA;
            YL=GNEW-GOLD;
            sdiff=XOUT-OLDX;
            % Make sure Hessian is positive definite in update.
            if YL'*sdiff<OPTIONS(18)^2*1e-3
                while YL'*sdiff<-1e-5
                    [YMAX,YIND]=min(YL.*sdiff);
                    YL(YIND)=YL(YIND)/2;
                end
                if YL'*sdiff < (eps*norm(HESS,'fro'));

```

```

        how=' mod Hess(2)';
        FACTOR=AN'*g - OLDAN'*OLDG;
        FACTOR=FACTOR.*(sdiff.*FACTOR>0).*(YL.*sdiff<=eps);
        WT=1e-2;
        if max(abs(FACTOR))==0; FACTOR=1e-5*sign(sdiff); end
        while YL'*sdiff < (eps*norm(HESS,'fro')) & WT < 1/eps
            YL=YL+WT*FACTOR;
            WT=WT*2;
        end
    else
        how=' mod Hess';
    end
end

%-----Perform BFGS Update If YL'S Is Positive-----
if YL'*sdiff>eps
    HESS=HESS+(YL*YL)/(YL'*sdiff)-
(HESS*sdiff*sdiff*HESS)/(sdiff*HESS*sdiff);
% BFGS Update using Cholesky factorization of Gill, Murray and Wright.
% In practice this was less robust than above method and slower.
% R=chol(HESS);
% s2=R*S; y=R\YL;
% W=eye(nvars,nvars)-(s2'*s2)\(s2*s2') + (y'*s2).(y*y');
% HESS=R'*W*R;
    else
        how=[how,' (no update)'];
    end

else % First call
    OLDLAMBDA=(eps+gf*gf)*ones(ncstr,1)/(sum(AN'.*AN')+eps) ;
end % if OPTIONS(11)>1
OPTIONS(11)=OPTIONS(11)+1;

LOLD=LAMBDA;
OLDAN=AN;
OLDgf=gf;
OLDG=g;
OLDF=f;
OLDX=XOUT;
XN=zeros(nvars,1);
if (OPTIONS(7)>0&OPTIONS(7)<5)
% Minimax and attgoal problems have special Hessian:
    HESS(nvars,1:nvars)=zeros(1,nvars);
    HESS(1:nvars,nvars)=zeros(nvars,1);
    HESS(nvars,nvars)=1e-8*norm(HESS,'inf');
    XN(nvars)=max(g); % Make a feasible solution for qp
end
if lenvlb>0,
    AN=[AN;-eye(lenvlb,nvars)];

```

```

        GT=[g;-XOUT(1:lenvub)+VLB];
    else
        GT=g;
    end
    if lenvub>0
        AN=[AN;eye(lenvub,nvars)];
        GT=[GT;XOUT(1:lenvub)-VUB];
    end
    [SD,lambda,howqp]=qp(HESS,gf,AN,-GT, [], [], XN,OPTIONS(13),-1);
    lambda(1:OPTIONS(13)) = abs(lambda(1:OPTIONS(13)));
    ga=[abs(g(1:OPTIONS(13)));g(OPTIONS(13)+1:ncstr)];
    mg=max(ga);
    if OPTIONS(1)>0
        if howqp(1) == 'o'; howqp = ''; end
        disp([sprintf('%5.0f %12.6g %12.6g ',OPTIONS(10),f,mg), sprintf('%12.3g
',OPTIONS(18)),how, '',howqp]);
    end
    LAMBDA=lambda(1:ncstr);
    OLDLAMBDA=max([LAMBDA';0.5*(LAMBDA+OLDLAMBDA)'])';

%-----LINESEARCH-----
    MATX=XOUT;
    MATL = f+sum(OLDLAMBDA.*(ga>0).*ga) + 1e-30;
    infeas = (howqp(1) == 'i');
    if OPTIONS(7)==0 | OPTIONS(7) == 5
% This merit function looks for improvement in either the constraint
% or the objective function unless the sub-problem is infeasible in which
% case only a reduction in the maximum constraint is tolerated.
% This less "stringent" merit function has produced faster convergence in
% a large number of problems.
        if mg > 0
            MATL2 = mg;
        elseif f >=0
            MATL2 = -1/(f+1);
        else
            MATL2 = 0;
        end
        if ~infeas & f < 0
            MATL2 = MATL2 + f - 1;
        end
    else
% Merit function used for MINIMAX or ATTGOAL problems.
        MATL2=mg+f;
    end
    if mg < eps & f < bestf
        bestf = f;
        bestx = XOUT;
    end
    MERIT = MATL + 1;

```

```

MERIT2 = MATL2 + 1;
OPTIONS(18)=2;
while (MERIT2 > MATL2) & (MERIT > MATL) & OPTIONS(10) < OPTIONS(14)
    OPTIONS(18)=OPTIONS(18)/2;
    if OPTIONS(18) < 1e-4,
        OPTIONS(18) = -OPTIONS(18);

        % Semi-infinite may have changing sampling interval
        % so avoid too stringent check for improvement
        if OPTIONS(7) == 5,
            OPTIONS(18) = -OPTIONS(18);
            MATL2 = MATL2 + 10;
        end
    end
    XOUT = MATX + OPTIONS(18)*SD;
    x(:)=XOUT;
    if etype == 1,
        [f, g(:)] = feval(FUN,x);
    elseif etype == 2
        [f, g(:)] = eval(evalstr);
    else
        eval(evalstr);
    end
    OPTIONS(10) = OPTIONS(10) + 1;
    ga=[abs(g(1:OPTIONS(13)));g(OPTIONS(13)+1:length(g))];
    mg=max(ga);
    MERIT = f+sum(OLDLAMBDA.*(ga>0).*ga);
    if OPTIONS(7)==0 | OPTIONS(7) == 5
        if mg > 0
            MERIT2 = mg;
        elseif f >=0
            MERIT2 = -1/(f+1);
        else
            MERIT2 = 0;
        end
        if ~infeas & f < 0
            MERIT2 = MERIT2 + f - 1;
        end
    else
        MERIT2=mg+f;
    end
end
end
%-----Finished Line Search-----

if OPTIONS(7)~=5
    mf=abs(OPTIONS(18));
    LAMBDA=mf*LAMBDA+(1-mf)*LOLD;
end

```

```

    if max(abs(SD))<2*OPTIONS(2) & abs(gf*SD)<2*OPTIONS(3) &
(mg<OPTIONS(4) | (howqp(1) == 'i' & mg > 0 ) )
        if OPTIONS(1)>0
            disp([sprintf('%5.0f %12.6g %12.6g
',OPTIONS(10),f,mg),sprintf('%12.3g ',OPTIONS(18)),how, ' ',howqp]);
            if howqp(1) ~= 'i'
                disp('Optimization Terminated Successfully')
                disp('Active Constraints:'),
                find(LAMBDA>0)
            end
        end
        if (howqp(1) == 'i' & mg > 0)
            disp('Warning: No feasible solution found.')
        end
        status=1;
    else
        %   NEED=[LAMBDA>0]|G>0
        if OPTIONS(10) >= OPTIONS(14) | OPT_STOP
            XOUT = MATX;
            f = OLDF;
            if ~OPT_STOP
                disp('Maximum number of iterations exceeded')
                disp('increase OPTIONS(14)')
            else
                disp('Optimization terminated prematurely by user')
            end
            status=1;
        end
    end
end

% If a better unconstrained solution was found earlier, use it:
if f > bestf
    XOUT = bestx;
    f = bestf;
end
OPTIONS(8)=f;
x(:) = XOUT;

```

Nom : DINY

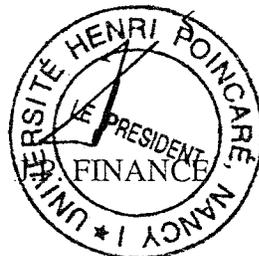
Prénom : Mouad

DOCTORAT de l'UNIVERSITE HENRI POINCARÉ, NANCY-I
en MECANIQUE & ENERGETIQUE

VU, APPROUVÉ ET PERMIS D'IMPRIMER

Nancy, le 23 DÉC 1996 UHP 137

Le Président de l'Université



Résumé : Le travail présenté dans cette thèse concerne l'étude du fonctionnement d'une machine frigorifique à adsorption à charbon actif-méthanol.

L'étude porte sur l'optimisation du fonctionnement de la machine et sur la modélisation des transferts de chaleur et de masse dans le milieu poreux du générateur de la machine.

La modélisation des transferts de chaleur et de masse a permis le suivi de l'évolution de la masse cyclée, les températures et les pressions pendant les phases du cycle de fonctionnement.

La partie expérimentale, consacrée au comportement des différents composants de la machine, a été confortée par des modèles en transitoire sur la quasi-totalité du cycle de fonctionnement.

La dernière partie de la thèse porte sur l'optimisation thermodynamique en temps fini du fonctionnement des machines trithermes avec une contrainte de puissance calorifique.

Abstract : The work presented in this thesis concerns the theoretical and experimental studies of adsorption methanol on active charcoal in freezing machine.

The study wears on the optimization of the functioning of the machine and on the modelisation of the heat and mass transfer in porous media of the generator.

The modelisation of heat and mass transfers has put in obviousness the evolution of the amount of adsorbat , temperatures and pressures during phases of the cycle.

The experimental part has devoted to the behavior of the different machine component in transient operation, to validate the model on the quasi - totality of the cycle.

The last part of the thesis wears on the optimization of the functioning of tree heat sources machines. This study consists in an optimization of freezing power, that constitutes the objective function.

Mots-clés : adsorption, désorption, charbon actif, méthanol, machines frigorifiques, transferts de chaleur et de masse, milieu poreux.

Key words : adsorption, desorption, active charcoal, methanol, freezing machine, heat and mass transfer, porous media.