



### **Science Arts & Métiers (SAM)**

is an open access repository that collects the work of Arts et Métiers Institute of Technology researchers and makes it freely available over the web where possible.

This is an author-deposited version published in: <https://sam.ensam.eu>  
Handle ID: <http://hdl.handle.net/10985/6619>

#### **To cite this version :**

Marie DUQUESNE, Alain SEMPEY, Stéphane GINESTET, Jean TOUTAIN, Elena PALOMO -  
Décomposition Orthogonale aux valeurs Propres (POD) appliquée à un modèle bidimensionnel  
de stockage d'énergie par adsorption pour une application au bâtiment - 2012

Any correspondence concerning this service should be sent to the repository

Administrator : [scienceouverte@ensam.eu](mailto:scienceouverte@ensam.eu)



# Décomposition Orthogonale aux valeurs Propres (POD) appliquée à un modèle bidimensionnel de stockage d'énergie par adsorption pour une application au bâtiment.

Marie DUQUESNE<sup>1\*</sup>, Alain SEMPEY<sup>1</sup>, Stéphane GINESTET<sup>2</sup>, Jean TOUTAIN<sup>1</sup>, Elena PALOMO DEL BARRIO<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univ Bordeaux, I2M, UMR 5295, F-33400 Talence, France.

CNRS, I2M, UMR 5295, F-33400 Talence, France.

Arts et Metiers ParisTech, I2M, UMR 5295, F-33400 Talence, France.

<sup>2</sup>Université de Toulouse, INSA-Université Paul Sabatier, LMDC EA 3027, 135 avenue de Ranguel - 31077 Toulouse Cedex 04

\* (auteur correspondant : marie.duquesne@ensam.eu)

**Résumé :** Le stockage thermo-chimique par adsorption-désorption dans un adsorbant cylindrique intégrant le couple zéolite 13X-eau a fait l'objet de plusieurs modélisations (1D, 2D) que l'on retrouve dans la littérature. La résolution du modèle bidimensionnel développé dans cette étude implique 6000 équations différentielles non linéaires et couplées générant des temps de calculs conséquents. La POD nous a permis de montrer que ce modèle est fortement réductible.

## Nomenclature

$A$	proportion d'adsorbant dans le lit	$z$	longueur, $m$
$a$	coefficient temporel de la base POD	<i>Symboles grecs</i>	
$a_f$	diffusivité du fluide, $m^2.s^{-1}$	$\delta$	valeur propre de la base POD
$B$	proportion d'adsorbant dans le lit	$\varepsilon$	porosité
$b$	facteur pré-exponentiel	$\lambda$	conductivité thermique $W.m^{-1}.K^{-1}$
$c$	chaleur spécifique, $J.kg^{-1}.K^{-1}$	$\Delta H$	chaleur d'adsorption, $J.kg^{-1}$
$C_\Sigma$	capacité calorifique du couple adsorbant-adsorbant, $J.kg^{-1}.K^{-1}$	$\mu$	viscosité $Pa.s$
$E_k$	énergie statistique au sens de la POD	$\rho$	masse volumique, $kg.m^{-3}$
$E_n$	énergie d'activation, $K$	$\psi$	constante suivant la loi d'Arrhénius
$k$	perméabilité de l'adsorbant, $m^2$	<i>Indices et exposants</i>	
$L$	longueur du lit, $m$	$a$	phase adsorbée
$M$	masse molaire de l'adsorbant, $kg.mol^{-1}$	$b$	lit d'adsorbant
$p$	pression, $Pa$	$e$	équilibre
$q$	quantité d'eau dans le lit, $kg.m^{-3}$	$f$	fluide
$R$	constante des gaz parfaits, $J.mol^{-1}.K^{-1}$	$g$	phase gazeuse
$r$	rayon, $m$	$in$	entrée
$T$	température, $K$	$m$	tube métallique
$t$	temps, $s$	$p$	particules d'adsorbant
$u$	vitesse du gaz dans l'adsorbant, $m.s^{-1}$	$POD$	reconstruite avec la POD
$v$	vitesse moyenne du fluide, $m.s^{-1}$	$s$	adsorbant solide
$V$	mode de la base POD	$0$	initial

## 1. Introduction

En France, le secteur du bâtiment est responsable d'environ un quart des émissions de CO<sub>2</sub> et de 46% des consommations énergétiques [1]. Pour faire face au réchauffement climatique

et à l'épuisement des énergies fossiles, il faut consommer moins d'énergie et utiliser des sources faiblement émettrices de CO<sub>2</sub>. Les énergies renouvelables, notamment solaires, représentent un gisement intéressant d'énergie pauvre en carbone. Cependant leur intermittence impose une meilleure anticipation des besoins et la mise en place d'un système de stockage. Tout d'abord, nous rappelons la place du stockage par adsorption parmi les différents systèmes puis nous justifions le choix du couple adsorbant-adsorbat. Ensuite, un modèle bidimensionnel des transferts couplés de chaleur et de masse survenant au cours du stockage d'énergie dans l'adsorbeur d'un système intégrable au sein d'un bâtiment est développé. Enfin, la Décomposition Orthogonale aux valeurs Propres (POD), est utilisée pour envisager de réduire la taille du modèle développé et d'en faciliter la simulation.

## 2. Sélection du type de stockage

S'il existe un grand nombre de modes de stockage (cf. figure 1), le stockage thermo-chimique par sorption présente les caractéristiques requises concernant les gammes de températures et de réversibilité pour une application aux bâtiments. Bien qu'il soit légèrement moins performant en termes de densité énergétique que le stockage chimique, il est compatible avec les températures produites à partir de l'énergie solaire (70 à 220°C hors concentration). Enfin, la grande compacité des adsorbants leur confère des qualités essentielles en termes de coût et de volume.

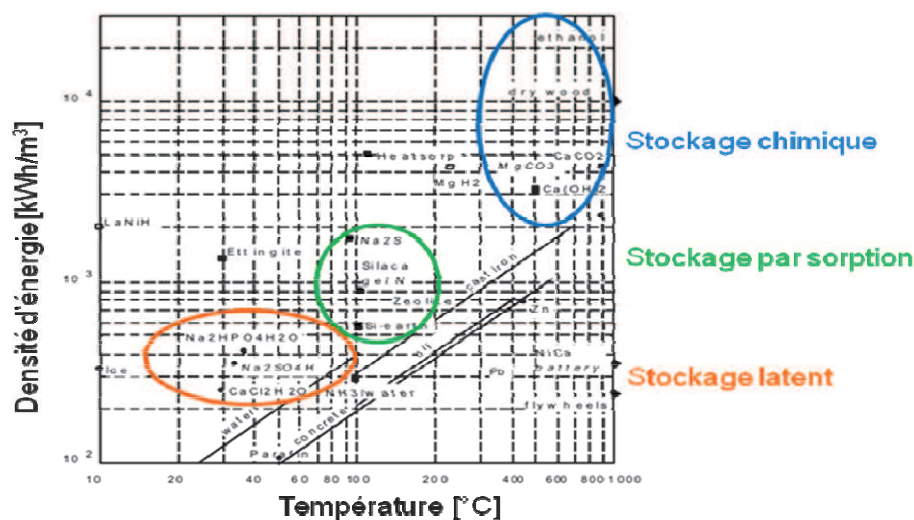


Figure 1 : Matériaux adsorbants et types de stockage [2]

Le choix du couple adsorbant-adsorbat à intégrer au sein d'un système de stockage est primordial car son efficacité en dépend. Tout d'abord, le choix d'un adsorbat est régi par ses propriétés physico-chimiques [3] et [4]. L'eau est parfaitement sûre pour l'Homme, disponible en quantité, avec de bonnes propriétés thermiques et apparaît comme idéale tant aux niveaux hygiène, sécurité et environnement qu'économique et pratique. De nombreux adsorbants associés à l'eau sont à disposition, leurs caractéristiques principales sont présentées dans le tableau 1. Les silices mésoporeuses organisées et les metal-organic frameworks ont des affinités très restreintes pour l'eau. La densité énergétique théorique des zéolites, minéraux microporeux appartenant à la famille des aluminosilicates, est d'environ 180 kWh/m<sup>3</sup> soit le double de l'eau en stockage par chaleur sensible et le tableau 1 montre que le couple zéolite-eau a de très bonnes capacités d'adsorption et de régénération, une faible toxicité, un prix bas

et une grande stabilité à long terme. Ainsi, il semble constituer une des solutions les plus adaptées à un stockage de l'énergie à basse température pour une application aux bâtiments.

Sorbants	Capacité d'adsorption	Taux d'adsorption	Régénération	Prix	Toxicité	Stabilité à long terme
	(g/g)					
Gel de silice	0.40-0.45	++	+++	+	+	+++
Zéolites	0.20-0.45	+++	+++	+	+	+++
Alumino-phosphates	0.15-0.54	++	++	++	+	+
Silices mésoporeuses	0.45-0.84	++	+	++	+	+
Argiles	0.25-0.48	+++	+	+	+	+

Tableau 1 : Principales caractéristiques des matériaux adsorbants associés à l'eau [5]

### 3. Modélisation bidimensionnelle de l'adsorbant

Les systèmes à sorption sont composés d'un adsorbant, d'un évaporateur et d'un condenseur. Les deux derniers étant des échangeurs diphasiques classiques largement étudiés dans la littérature, nous nous sommes focalisés sur la modélisation bidimensionnelle du stockage de l'énergie dans l'adsorbant, élément clé car contenant le milieu poreux.

#### 3.1. Description du problème physique

L'adsorbant étudié est classique, de nombreux auteurs ont traité le même type de systèmes [6]. Il est constitué d'un fluide caloporteur qui circule dans un tube métallique entouré par un lit de zéolite 13X cylindrique (figure 2). Ainsi, lors de la phase de stockage de l'énergie, le fluide chauffe l'adsorbant par l'intermédiaire du tube métallique et engendre la désorption de l'adsorbant, la vapeur d'eau, qui s'évacue par les deux extrémités du lit.

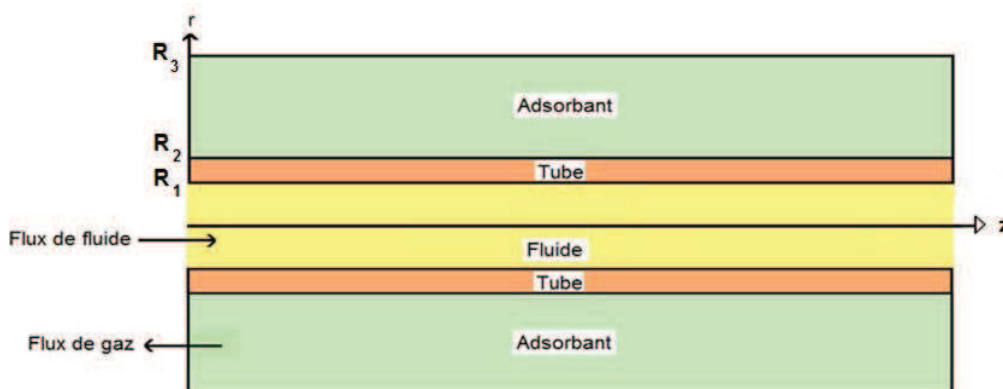


Figure 2 : Schéma du problème physique étudié

### 3.2. Hypothèses

La formulation mathématique du problème physique énoncé repose sur les conditions et hypothèses suivantes :

- d'une part, les grains d'adsorbant ont des propriétés identiques et sont distribués uniformément dans le lit, d'autre part, la phase solide (grains d'adsorbant et phase adsorbée) est localement en équilibre avec la phase gazeuse,
- la phase gazeuse se comporte comme un gaz parfait,

$$\rho = \frac{Mp}{RT} \tag{1}$$

- la vitesse du gaz dans le lit d'adsorbant est déterminée par la loi de Darcy,

$$u = -\frac{k}{\mu} \nabla p \tag{2}$$

- la dispersion de masse de la phase gazeuse est négligée,
- les propriétés de transferts thermiques dans le fluide ainsi que dans le tube, les coefficients d'échange de chaleur entre les composants, la chaleur d'adsorption et la viscosité sont supposés constants,
- le métal est considéré comme une résistance thermique (régime établi dans le tube métallique) et le fluide suit un écoulement de Poiseuille.

### 3.3. Equations de conservation

Les transferts couplés de chaleur et de masse survenant au sein de l'adsorbant ont été étudiés pour développer un modèle s'inspirant des travaux de Sun et al. [7,8]. Les évolutions spatio-temporelles des variables d'état sont simulées permettant ainsi l'analyse de son comportement dynamique. Le modèle bidimensionnel transitoire réalisé a pour variables la température dans le fluide,  $T_f$ , la température  $T$  et la pression  $p$  dans l'adsorbant. Les équations que l'on résout sont :

- l'équation de conservation de l'énergie du fluide s'écoulant à une vitesse moyenne  $v$  dans un tube de rayon  $R_1$ ,

$$\frac{\partial T_f}{\partial t} + 2v \left[ 1 - \left( \frac{r}{R_1} \right)^2 \right] \frac{\partial T_f}{\partial z} - a_f \Delta T_f = 0 \quad \text{avec} \quad \begin{cases} T_f(r, z, 0) = T_0 \\ T_f(r, 0, t) = T_{in} \text{ et } T_f(r, 1, t) \text{ libre} \end{cases} \tag{3}$$

- l'équation de conservation de la masse dans l'adsorbant,

$$A \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho u) = -B \frac{\partial q}{\partial t} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} p(r, 0, t) = p(r, 1, t) = p(r, z, 0) = p_0 \\ \frac{\partial p(R_2, z, t)}{\partial r} = \frac{\partial p(R_3, z, t)}{\partial r} = 0 \end{cases} \tag{4}$$

$$A = \varepsilon_b + (1 - \varepsilon_p) \varepsilon_p \quad \text{et} \quad B = (1 - \varepsilon_p)(1 - \varepsilon_b)$$

- l'équation de conservation de l'énergie dans l'adsorbant,

$$\frac{\partial(C_{\Sigma}T)}{\partial t} + \nabla(\rho u c_g T) - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = B \Delta H \frac{\partial q}{\partial t}$$

$$C_{\Sigma} = A \rho u c_g + B(\rho_s c_s + q c_a)$$

$$\text{avec } \begin{cases} T(r, z, 0) = T_0 \\ \frac{\partial T(r, 0, t)}{\partial z} = \frac{\partial T(r, 1, t)}{\partial z} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

De plus, conformément aux hypothèses, il n'y a pas d'accumulation d'énergie dans le métal, la condition de raccordement du flux entre l'interface fluide/métal et celle métal/adsorbant s'exprime donc :

$$\frac{\partial T_f(R_1, z, t)}{\partial r} = \frac{\lambda_m}{\lambda_f} \frac{1}{R_1} \frac{T_f(R_1) - T(R_2)}{\ln(R_1/R_2)} \quad \text{et} \quad \frac{\partial T(R_2, z, t)}{\partial r} = \frac{\lambda_m}{\lambda} \frac{1}{R_2} \frac{T_f(R_1) - T(R_2)}{\ln(R_1/R_2)} \quad (6)$$

### 3.4. Isotherme d'adsorption

La cinétique d'adsorption d'un gaz par un solide poreux joue un rôle prépondérant dans le fonctionnement d'un système de stockage à adsorption. Le modèle cinétique étudié s'appuie sur le modèle généralisé de Langmuir à 3 couches [4] :

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \psi(q - q_e)$$

à l'équilibre,

$$q = q_e \Rightarrow \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial q_e}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial q_e}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}$$

$$\text{avec } \begin{cases} q_e = \frac{q_{s,1} b_1 p}{1 + b_1 p} + \frac{q_{s,2} b_2 p}{1 + b_2 p} + \frac{q_{s,3} b_3 p}{1 + b_3 p} \\ q_{s,n} = a_{0,n} + \frac{a_{1,n}}{T} + \frac{a_{2,n}}{T^2} + \frac{a_{3,n}}{T^3} \\ b_n = b_{0,n} \exp(E_n / T) \quad (n = 1, 2, 3) \end{cases} \quad (7)$$

Compte tenu des grandeurs caractéristiques des zéolites et des conditions d'utilisation, le temps caractéristique de la cinétique de transfert de masse de notre problème est de l'ordre de la microseconde. Ainsi, nous pouvons considérer que le système étudié est à l'équilibre thermodynamique à tout instant.

### 3.5. Résultats numériques

Le schéma de résolution s'appuie sur une méthode d'ordre 4 basée sur un schéma compact centré, précis et stable [9]. Le système est discrétisé en 100 mailles longitudinales, 20 mailles radiales dans le fluide et 20 dans l'adsorbant. Ainsi, 2000 équations sont à résoudre pour chaque variable, soit un système de 6000 équations au total. Une sollicitation (échelon de température appliqué en  $z=0$  :  $T_{in}=493$  K) est appliquée au système, dont l'état initial est à l'équilibre ( $T_0=293$  K et  $P_0=60$  Pa). L'évolution du système est alors étudiée sur une fenêtre temporelle de 3 heures. L'intégration du système est réalisée par une méthode de type Gear à ordre et pas variables [10]. La tolérance du calcul est de l'ordre de  $10^{-6}$ . L'ordinateur utilisé est un Intel (R) Core (TM) I7, CPU 975@3.33 GHz, 2.02 GHz, 12Go de RAM.

La résolution numérique de ce système implique l'intégration temporelle de 6000 équations différentielles générant des temps de calculs conséquents (1h30). Pour pallier cette difficulté, les poids relatifs des différents mécanismes de transfert de masse et de chaleur ont été comparés. Cependant l'importance relative de chaque mécanisme de transfert ne permet

raisonnablement pas de pouvoir simplifier physiquement les équations, d'où l'application d'une méthode de réduction.

#### 4. Décomposition orthogonale aux valeurs Propres

La POD est appliquée à notre modèle afin d'approximer le système créé de dimension élevée nécessitant une intégration temporelle par un autre système de dimension nettement plus faible [11]. Elle nous permet donc de déterminer si le modèle est fortement réductible afin d'éviter les temps de calculs prohibitifs.

La POD consiste à considérer les variables comme une combinaison linéaire de modes propres  $V$  et de coefficients temporels  $a$  tout en conservant les caractéristiques et le couplage du modèle :

$$\forall (r, z, t) \quad T_{POD}(r, z, t) = \bar{T}(r, z) + \sum_{m=1}^k V_m(r, z) a_m(t) \tag{8}$$

Cette décomposition est obtenue à partir d'un ensemble de données provenant selon le cas de simulations numériques ou d'expériences. Les modes propres définissent alors une base de projection orthogonale représentative des réalisations les plus probables et optimale au sens énergétique [12]. Un faible nombre de modes est alors suffisant pour décrire correctement l'évolution dynamique du système. Afin de déterminer ce nombre  $k$  de modes à conserver nous avons considéré plusieurs critères :

- L'énergie statistique au sens de la POD, énergie cumulée  $E_k$  des modes conservés, doit être supérieure à 99% et la dernière valeur propre ( $\delta$ ) conservée doit être inférieure au centième de la première. Conserver les 3 premiers modes nous assure le respect des 2 critères précédents (cf tableau 2).

$$E_k = \frac{\sum_{i=1}^k \delta_i}{\sum_{i=1}^{\infty} \delta_i} \tag{9}$$

Modes	$E_k (T_f)$	$\delta (T_f)$	$E_k (T)$	$\delta (T_f)$	$E_k (p)$	$\delta (p)$
1	97,2092	$1,883.10^{-6}$	98,8177	$2,197.10^{-5}$	88,2055	$9,716.10^{-4}$
2	99,5742	$0,046.10^{-6}$	99,5805	$0,017.10^{-5}$	99,0648	$1,196.10^{-4}$
3	99,8423	$0,005.10^{-6}$	99,8569	$0,006.10^{-5}$	99,7437	$0,075.10^{-4}$
4	99,9630	$0,002.10^{-6}$	99,9540	$0,002.10^{-5}$	99,9277	$0,020.10^{-4}$
5	99,9985	$< 10^{-8}$	99,9739	$< 10^{-8}$	99,9711	$0,005.10^{-4}$

Tableau 2 : Energie cumulée et valeurs propres selon les modes

- La reconstruction des variables à partir de la combinaison linéaire de modes propres et de coefficients temporels est comparée aux variables réelles pour la température et la pression dans l'adsorbant grâce au calcul de l'écart-type entre les variables réelles et reconstruites dans l'adsorbant.

$$e_p = \sqrt{\frac{\iint (p - p_{POD})^2 2\pi r dr dz}{\iint 2\pi r dr dz}} \quad \text{et} \quad e_T = \sqrt{\frac{\iint (T - T_{POD})^2 2\pi r dr dz}{\iint 2\pi r dr dz}} \tag{10}$$

La figure 3 montre que 3 modes semblent suffisants pour reconstruire la température dans l'adsorbant. En effet, la température étant comprise entre 293 K et 493 K, l'écart-type obtenu entre les températures réelle et reconstruite est faible. Par contre, la pression initiale est 60 Pa, on peut donc déduire de la figure 4 que 5 modes semblent nécessaires pour reconstruire précisément la pression dans l'adsorbant.

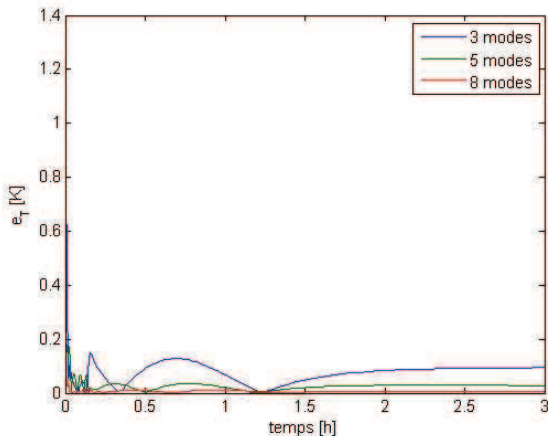


Figure 3 : écart-type  $e_T$

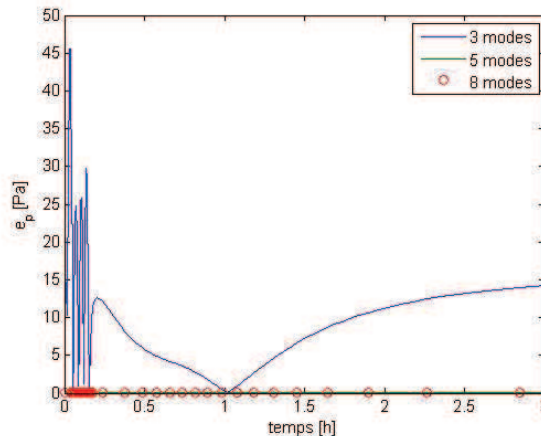


Figure 4 : écart-type  $e_p$

- Dans le cadre de notre étude, l'énergie stockée est la grandeur qui importe. Aux trois critères précédents classiquement utilisés avec la POD, nous ajoutons donc ce critère supplémentaire. L'énergie  $E$  stockée dans le matériau et l'écart-type  $e_E$  entre les énergies réelle et reconstruites s'écrivent :

$$E = \int_0^t B\Delta H \frac{\partial Q}{\partial t} dt \text{ avec } Q = \iint q 2\pi r dr dz \text{ et } e_E = \sqrt{\frac{\iint (E - E_{POD})^2 2\pi r dr dz}{\iint 2\pi r dr dz}} \quad (11)$$

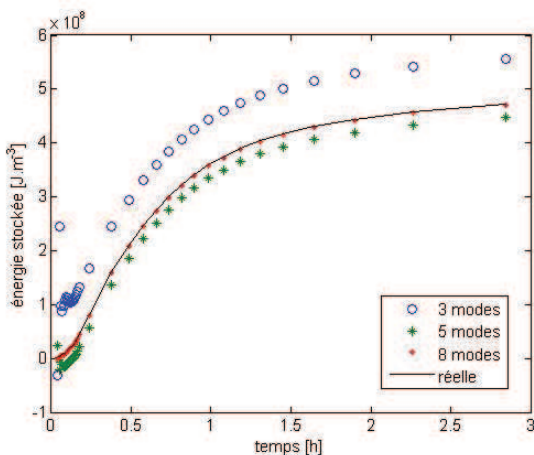


Figure 5 : Comparaison entre énergies stockées réelle et reconstruite

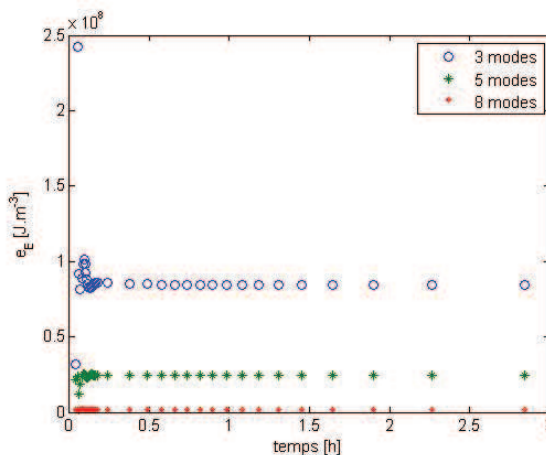


Figure 6 : écart-type  $e_E$

La figure 5 montre que conserver 3 ou 5 modes induit des erreurs aux temps courts dans la reconstruction de l'énergie stockée. Par conséquent, pour que la reconstruction soit suffisamment précise et notamment aux temps courts, 8 modes doivent être conservés pour chaque variable.



## 5. Conclusion

Dans cet article, un type de stockage et un système technique ont été sélectionnés. L'étude des transferts couplés de chaleur et de masse au sein de l'adsorbeur, élément clé de ce système, a donné lieu à un modèle bidimensionnel. L'analyse des poids relatifs de chacun des mécanismes entrant en jeu a montré que ce modèle ne pouvait être simplifié physiquement. La POD nous a donc permis de déterminer que 8 modes pour chaque variable suffisent pour décrire le comportement dynamique de l'adsorbeur étudié. Nous envisageons à présent de réduire le modèle afin d'en faciliter la simulation et d'utiliser la POD comme méthode d'analyse physique des données pour réaliser une étude approfondie des différents mécanismes de transferts couplés de chaleur et de masse.

### Références

- [1] Table ronde du Grenelle de l'Environnement "Lutter contre les changements climatiques", Programme "Moderniser le bâtiment et la ville", (2007).
- [2] Jacob Van Berkel, Solar thermal storage techniques, Research commissioned by The Netherlands Agency for Energy and the Environment NOVEM, project # 143.620-935.8 (Octobre 2000).
- [3] S. Marteau, Adsorption, ed4263 INRS, 23(39), (2005).
- [4] W. Chekirou, Etude et analyse d'une machine frigorifique solaire à adsorption, Thèse de Doctorat en Sciences en Physique, Université de Mentouri-Constantine, (2008).
- [5] Y.I. Aristov, Challenging offers of material science for adsorption storage of thermal energy, Eurotherm Seminar n°93, (16-18 Novembre 2011).
- [6] L.Z. Zhang, Solar Energy, A three-dimensional non-equilibrium model for an intermittent adsorption cooling system, *Solar Energy*, (2000), 69(1), 27-35.
- [7] L. M. Sun, N. Ben Amar et F. Meunier, Numerical study on coupled heat and mass transfer in an adsorber with external fluid heating, *Heat Recovery Systems & CHP*, (1995), 15(1), 19-29.
- [8] N. Ben Amar, L.M. Sun, F. Meunier, Numerical analysis of adsorptive wave regenerative heat temperature pump, *Applied Thermal Engineering*, (1996), 16(1), 405-418.
- [9] S. Hamdi et al., Method of lines/example implementation/dss044, *Scholarpedia*, 2(10) : 2859, doi : 10.4249/scholarpedia.5401, (2007), [http://www.scholarpedia.org/article/Method\\_of\\_lines](http://www.scholarpedia.org/article/Method_of_lines).
- [10] L.F. Shampine, M.W. Reichelt et J.A. Kierzenka, Solving Index-1 DAEs in MATLAB and Simulink, *SIAM Review*, (1999), 41, 538-552.
- [11] A. Sempey, C. Inard, C. Ghiaus, C. Allery, Fast simulation of temperature distribution in air conditioned rooms by using proper orthogonal decomposition, *Building and Environment*, (2009), 44(2), 280-298.
- [12] L. Sirovich, Turbulence and the dynamics of coherent structures, Part 1 : Coherent structures. Part 2 : Symmetries and transformations. Part 3 : Dynamics and scaling. *Quarterly of Applied Mechanics*, (1987), 45, 561-590.

### Remerciements

Ces travaux ont été en partie financés par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) au travers du programme Habitat intelligent et solaire photovoltaïque (projet SIMINTHEC n°ANR-08-HABISOL-011).