

## EXEMPLE D'APPLICATION PROSIM DAC

# PROCEDE TSA ADSORPTION DE DICHLOROMETHANE SUR CHARBON ACTIF

### INTERET DE L'EXEMPLE

Cet exemple traite d'un procédé TSA (Thermal Swing Adsorption) dans lequel du dichlorométhane est adsorbé sur un charbon actif. La régénération thermique du charbon actif est faite par un courant d'azote chaud. Ce procédé est modélisé dans ProSim DAC, le logiciel de simulation dynamique de ProSim dédié aux colonnes d'adsorption gaz-solide.

<b>DIFFUSION</b>	<input checked="" type="checkbox"/> <b>Libre Internet</b>	<input type="checkbox"/> <b>Réservée clients</b>	<input type="checkbox"/> <b>Restreinte</b>	<input type="checkbox"/> <b>Confidentielle</b>
------------------	---	--	--	--

<b>FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT</b>	<b>PSPDYN_EX_FR-COV-TSA.pmp3</b>
---	----------------------------------

*Il est rappelé au lecteur que ce cas d'utilisation est un exemple et ne doit pas être utilisé à d'autres fins. Bien que cet exemple soit basé sur un cas réel il ne doit pas être considéré comme un modèle de ce type de procédé et les données utilisées ne sont pas toujours les plus exactes disponibles. Fives ProSim ne pourra en aucun cas être tenu pour responsable de l'application qui pourra être faite des calculs basés sur cet exemple.*

### Energy

#### Fives ProSim

Siège social : Immeuble Stratège A - 51 rue Ampère - 31670 Labège - FRANCE

Tél. : +33 (0)5 62 88 24 30

S.A.S. au capital de 147 800 € - 350 476 487 R.C.S. Toulouse - Siret 350 476 487 00037 - APE 5829C - N° TVA FR 10 350 476 487

www.fivesgroup.com / www.fives-prosim.com

## TABLE DES MATIERES

<b>1.</b>	<b>MODELISATION DU PROCEDE .....</b>	<b>3</b>
1.1.	Présentation du procédé .....	3
1.2.	Schéma du procédé .....	4
1.3.	Constituants .....	4
1.4.	Modèle thermodynamique.....	4
1.5.	Paramètres opératoires.....	5
1.5.1.	Alimentations du procédé.....	5
1.5.2.	Durée de simulation .....	5
1.5.3.	Colonne d'adsorption .....	5
<b>2.</b>	<b>RESULTATS .....</b>	<b>17</b>
2.1.	Rapport de simulation de la colonne d'adsorption.....	17
2.1.	Profils de la colonne d'adsorption .....	18
2.1.	Profils du courant de sortie .....	19
<b>3.</b>	<b>BIBLIOGRAPHIE .....</b>	<b>21</b>

# 1. MODELISATION DU PROCEDE

## 1.1. Présentation du procédé

ProSim DAC est un logiciel de simulation dynamique pour les colonnes d'adsorption gaz-solide basé sur la résolution des bilans matière et enthalpique. Les étapes d'adsorption et de régénération peuvent être modélisées. Les types de régénération disponibles sont : régénération thermique (co- ou contre-courant), régénération à la vapeur (co- ou contre-courant) et régénération par modulation de pression. Les procédés TSA (Thermal Swing Adsorption), PSA (Pressure Swing Adsorption) ou VTSA (Vacuum Thermal Swing Adsorption) peuvent ainsi être représentés. Un système de gestion d'événements permet de passer d'une étape à une autre suivant des critères choisis par l'utilisateur (durée, taux de perçage, concentration...). Une durée totale de simulation ou un nombre de cycles peuvent être définis. Les caractéristiques (température, pression, débit, compositions) des alimentations (flux à purifier, flux de régénération...) peuvent être constantes ou variables au cours du temps. Les principaux modèles d'isothermes d'adsorption (Langmuir, Toth, Dubinin-Radushkevich, Langmuir étendu, Sips...) sont disponibles. Les coefficients de résistance aux transferts de matière et de chaleur peuvent être spécifiés par l'utilisateur ou calculés par ProSim DAC. Une base de données de charbons actifs et d'isothermes d'adsorption de COV sur des charbons actifs est disponible. Un bilan économique des étapes de régénération peut être généré pour comparer différentes solutions.

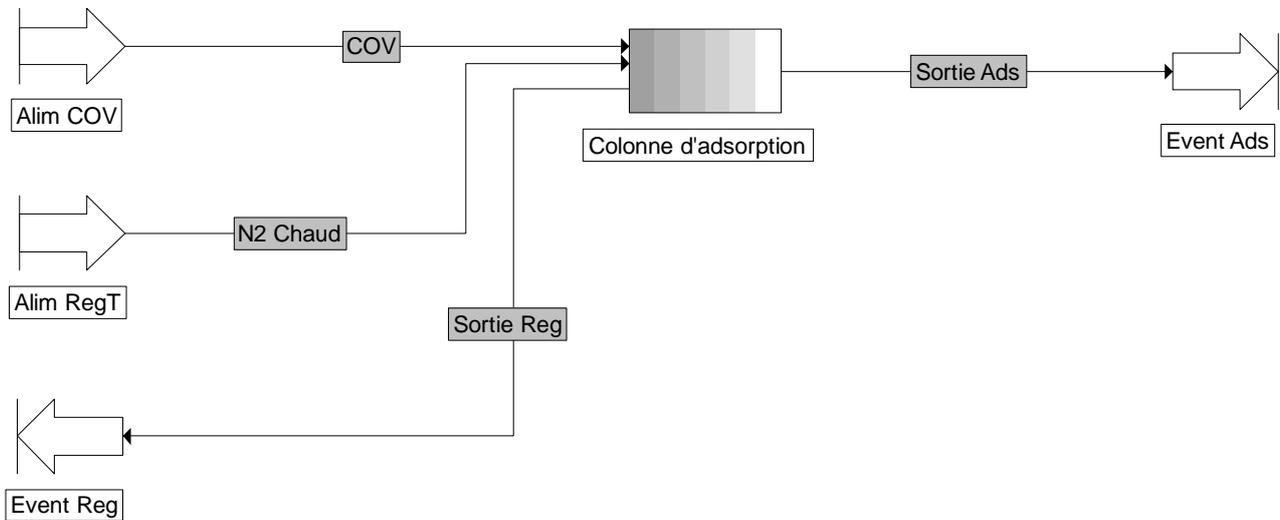
Dans cet exemple, du dichlorométhane est adsorbé sur un charbon actif. La régénération de l'adsorbant est faite par un flux chaud d'azote pur à contre courant du flux d'adsorption (procédé TSA).

Deux flux d'alimentation sont utilisés dans cet exemple : le courant « COV » et le courant « N2\_Chaud ». Lors de l'étape d'adsorption, seul le courant « COV » est employé. Il s'agit du flux de gaz à purifier (c'est dire dans lequel le dichlorométhane doit être éliminé). Durant l'étape de régénération, seul le flux « N2\_Chaud » est utilisé. Ce courant, composé d'azote pur chaud, sert à régénérer le lit d'adsorbant. L'enchaînement des étapes est fait automatiquement via la définition d'événements de fin d'étapes.

Les paramètres de la colonne (taille, comportement thermique...), les isothermes d'adsorption, le type de cycle (TSA, VTSA, PSA), les événements d'arrêt (taux de perçage, température, concentration...) sont définis directement dans le module « Colonne d'adsorption ».

Cet exemple est adapté de [RAM11].

## 1.2. Schéma du procédé



## 1.3. Constituants

Les constituants pris en compte dans la simulation, leurs formules chimiques et numéros CAS<sup>1</sup> sont présentés dans le tableau ci-après. Leurs propriétés de corps pur sont extraites de la base de données standard livrée avec ProSim DAC [ROW11].

Constituant	Formule chimique	Numéro CAS
Dichlorométhane	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	75-09-2
Azote	N <sub>2</sub>	7727-37-9

## 1.4. Modèle thermodynamique

L'adsorption et la régénération sont faites à la pression atmosphérique et à des températures inférieures à 140°C. Le profil thermodynamique « Idéal » est ainsi sélectionné dans le calculator Simulis Thermodynamics.

<sup>1</sup> Les CAS RN<sup>®</sup> sont la propriété intellectuelle de American Chemical Society et sont utilisés par Fives ProSim SAS avec l'autorisation expresse d'ACS. Les CAS RN<sup>®</sup> n'ont pas été vérifiés par ACS et peuvent être inexacts.

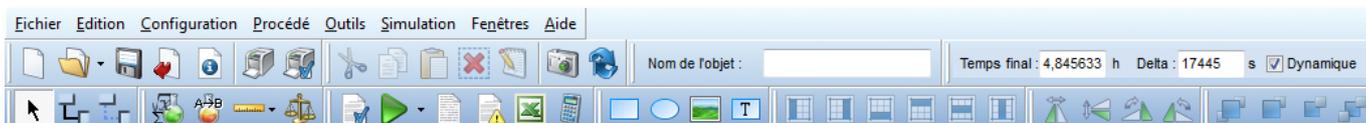
## 1.5. Paramètres opératoires

### 1.5.1. Alimentations du procédé

	Courant de COV	Courant d'azote chaud
Température (°C)	24	170
Pression (atm)	1	1
Débit total (kmol/h)	0,08399	0,0536
<b>Fractions molaires</b>		
Dichlorométhane	0,0078	0
Azote	0,9922	1

### 1.5.2. Durée de simulation

Le « Temps final » est la durée opératoire réelle de l'opération (adsorption + régénération en température dans cet exemple). Le « Delta » est la durée durant laquelle le module « Colonne d'adsorption » est en fonctionnement. Un seul module étant présent, le « Temps final » et le « Delta » doivent être identiques. Ces deux valeurs sont renseignées au niveau des barres d'icônes de ProSim DAC :



Durée de simulation	Valeur
Temps final	4,845633 h
Delta	17 445 s

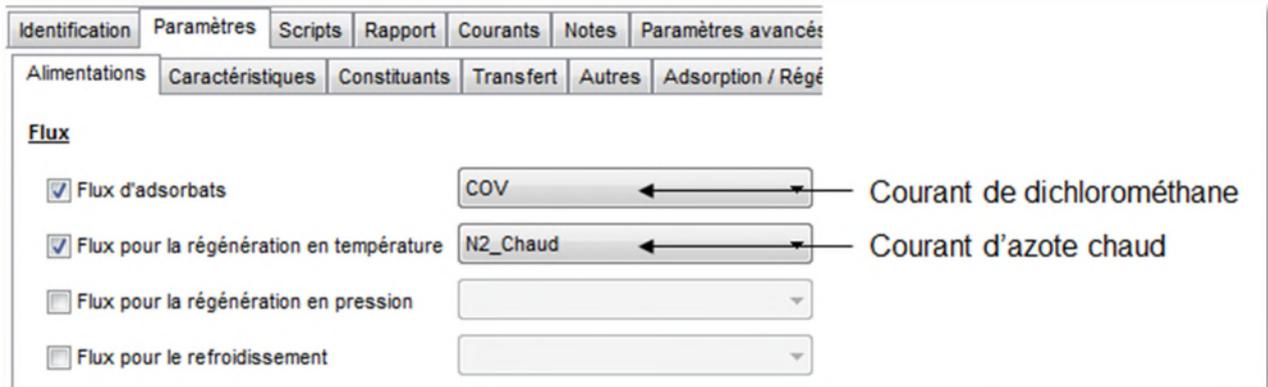
### 1.5.3. Colonne d'adsorption

#### 1.5.3.1. Alimentations

Quatre alimentations sont utilisables dans ProSim DAC :

- ✓ Flux d'adsorbats : Flux à purifier durant l'étape d'adsorption
- ✓ Flux pour la régénération en température : Flux servant lors de la régénération en température (azote chaud, vapeur d'eau...)
- ✓ Flux pour la régénération en pression : Flux servant lors de la régénération en pression (azote à basse pression...)
- ✓ Flux pour le refroidissement : Flux servant à refroidir la colonne en fin d'étape de régénération en température

Seules les deux premières alimentations servent dans cet exemple comme le montre la copie d'écran ci-dessous.



### 1.5.3.2. Sorties

Deux sorties sont utilisables dans ProSim DAC :

- ✓ Etapes d'adsorption : Flux sortant durant l'étape d'adsorption
- ✓ Etapes de régénération : Flux sortant durant l'étape de régénération

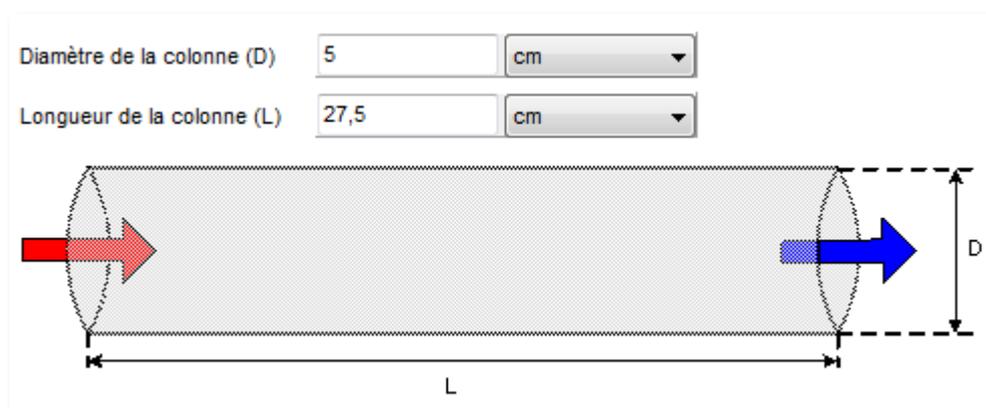
Le flux sortant durant l'étape d'adsorption correspond à la sortie « Sortie Ads » et le flux sortant durant l'étape de régénération correspondant à la sortie « Sortie Reg », comme le montre la copie d'écran ci-dessous :

#### Sorties



### 1.5.3.3. Caractéristiques de la colonne

La colonne utilisée est une colonne à flux longitudinal dont les caractéristiques figurent sur la copie d'écran ci-après. Les dimensions à fournir sont celles du lit d'adsorbant.



Il est à noter que ProSim DAC permet également de modéliser une colonne à flux transversal.

#### 1.5.3.4. Comportement thermique

ProSim DAC permet de modéliser les modes d'échange de chaleur suivant :

- ✓ Echange thermique dans le lit : « Q donnée sans transfert à la paroi »  
Cette possibilité permet de modéliser un fonctionnement adiabatique ou à quantité de chaleur donnée pour chaque étape (échangeur au sein du lit d'adsorbant).
- ✓ Transfert par la paroi + échange thermique dans le lit : « Q donnée et transfert à la paroi »  
L'échange thermique se fait par la paroi de la colonne. La température de la paroi est par défaut constante dans le temps et le long de la colonne. Pour lever cette hypothèse, il est nécessaire d'activer l'option « Prise en compte de l'inertie thermique de la paroi ». Il est possible d'ajouter à ce mode de transfert une quantité de chaleur donnée dans le lit d'adsorption pour chaque étape (par défaut nulle).

Dans cet exemple, le transfert thermique se fait par la paroi de la colonne et sans apport de chaleur direct dans le lit d'adsorbant :

Comportement thermique	
Transfert thermique	Q donnée et transfert à la paroi
Température de la paroi	22°C

#### 1.5.3.5. Caractéristiques du lit d'adsorbant

Caractéristiques du lit	
Degré de vide	0,37

#### 1.5.3.6. Caractéristiques de l'adsorbant

La masse volumique des particules tient compte de la porosité intra-particulaire.

Caractéristiques des particules	
Diamètre	4 mm
Masse volumique	750 kg/m <sup>3</sup>
Chaleur spécifique	1050 J/kg/K
Ratio Surface/Volume	1500 m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup>

#### 1.5.3.7. Conditions des mesures pour les résultats en concentration

L'utilisateur peut spécifier les conditions de température et de pression qu'il souhaite utiliser pour calculer les concentrations volumiques en phase gaz. En effet, la masse volumique est alors nécessaire et celle-ci, particulièrement dans le cas d'un gaz, est sensible à la température et la pression. Dans cet exemple, les concentrations volumiques en phase gaz sont évaluées dans les conditions normales de température et de pression (273,15 K – 101 325 Pa).

Conditions des mesures	Valeur
Conditions	Normales

### 1.5.3.8. Initialisation

Il est nécessaire de définir l'état de la colonne avant sa première utilisation. Dans cet exemple, il est supposé que la colonne a été inertée à l'azote dans les conditions de température et de pression de l'alimentation à purifier.

Initialisation	Valeur
Type	Fournie par l'utilisateur
Pression	1 atm
Température	20°C
Factions molaires	
Dichlorométhane	0
Azote	1

La copie d'écran ci-dessous montre les informations des paragraphes précédents (du paragraphe 1.5.3.3 au paragraphe 1.5.3.8 inclus) saisies dans l'interface du module : onglet « Paramètres », sous-onglet « Caractéristiques ».

The screenshot shows a software interface with the following elements:

- Navigation Tabs:** Identification, Paramètres (selected), Scripts, Rapport, Courants, Profils, Notes, Paramètres avancés.
- Sub-Tabs:** Alimentations, Caractéristiques (selected), Constituants, Transfert, Autres, Adsorption / Régénération, Bilan financier, Impressions, Paramètres.
- Section: Colonne**
  - Type de colonne: Colonne à flux longitudinal
  - Transfert thermique: Q donnée et transfert à la paroi
  - Température de la paroi: 22 °C
- Section: Adsorbant**
  - Degré de vide du lit: 0,37 m³/m³
  - Diamètre des particules: 4 mm
  - Densité des particules: 750 kg/m³
  - Chaleur spécifique du solide: 1050 J/kg/K
  - Rapport surface/volume: 1500 m²/m³
- Section: Conditions (T,P) des mesures**
  - Conditions: Normales
- Section: Initialisation**
  - Type d'initialisation: fournie par l'utilisateur
  - Pression initiale: 1 atm
  - Température initiale: 20 °C
  - Fractions molaires initiales:

1	DICHLOROMETHANE	0
2	NITROGEN	1
  - Sommation: 1,0000

### 1.5.3.9. Isothermes et enthalpies d'adsorption

Le modèle de Langmuir est retenu pour les isothermes d'adsorption du dichlorométhane et de l'azote.

$$q_i = \frac{\left[ q_{m0} \exp\left(\frac{q_{m1}}{T}\right) \right] \left[ K_0 \exp\left(\frac{K_1}{T}\right) \right] P_i}{1 + \left[ K_0 \exp\left(\frac{K_1}{T}\right) \right] P_i}$$

Il est supposé que l'azote ne s'adsorbe pas. Les valeurs des paramètres avec leurs unités sont regroupées dans le tableau suivant.

Dichlorométhane		Azote	
Isotherme	Langmuir	Isotherme	Langmuir
<b>q<sub>m0</sub> (mol/kg)</b>	1,094644264	<b>q<sub>m0</sub> (mol/kg)</b>	0
<b>K<sub>0</sub> (atm<sup>-1</sup>)</b>	0,045997002	<b>K<sub>0</sub> (atm<sup>-1</sup>)</b>	0
<b>q<sub>m1</sub> (K)</b>	628,3009558	<b>q<sub>m1</sub> (K)</b>	0
<b>K<sub>1</sub> (K)</b>	2427,456107	<b>K<sub>1</sub> (K)</b>	0

Le phénomène d'adsorption étant exothermique, les valeurs des enthalpies d'adsorption fournies sont négatives. L'azote étant supposé ne pas s'adsorber, son enthalpie d'adsorption est fixée à zéro.

Enthalpie d'adsorption	Dichlorométhane	Azote
Type	Fournie	
<b>ΔH<sub>ads</sub> (kJ/mol)</b>	-51	0

Ces informations sont à fournir dans l'onglet « Paramètres », sous-onglet « Constituants » :

### 1.5.3.10. Transfert de matière

Les options suivantes sont disponibles pour le transfert de matière :

- ✓ Transfert couplé en phase gaz et solide
- ✓ Résistance au transfert de matière (« linear driving force ») en phase gaz et/ou en phase solide, les coefficients de transfert de matière nécessaires pouvant alors être fournis par l'utilisateur ou calculés par ProSim DAC. Il est également possible de négliger les résistances au transfert.

Dans cet exemple, la résistance au transfert de matière a été prise en compte dans les deux phases. Les coefficients nécessaires sont calculés par ProSim DAC pour la phase gaz et spécifiés pour la phase solide. Dans ce cas, ils ont été obtenus par comparaison avec des résultats expérimentaux.

	Valeur
<b>Transfert de matière</b>	
Type	Transfert gaz et solide
<b>Transfert de matière phase gaz</b>	
Type	kf calculé, Petrovic-Thodos
<b>Transfert de matière phase solide</b>	
Type	kf fourni
Dichlorométhane	0,1 s <sup>-1</sup>
Azote	0 s <sup>-1</sup>

### 1.5.3.11. Transfert thermique

Il est possible de prendre en compte les bilans enthalpiques dans ProSim DAC ou de les ignorer. La non-prise en compte des bilans enthalpiques permet de simuler un fonctionnement isotherme. Lorsque les bilans enthalpiques sont pris en compte, les calculs nécessitent la connaissance des coefficients de transfert de chaleur gaz – adsorbant et gaz-paroi. Ceux-ci peuvent être calculés, comme dans cet exemple, ou bien fournis.

Transfert thermique	Valeur
Bilans enthalpiques	Pris en compte
Gaz – Adsorbant	Calculé (Satterfield)
Gaz – Paroi	Calculé (Leva)

La copie d'écran ci-dessous montre les informations des paragraphes 1.5.3.10 et 1.5.3.11 saisies dans l'interface du module : onglet « Paramètres », sous-onglet « Transfert ».

Identification	Paramètres	Scripts	Rapport	Courants	Profils	Notes	Paramètres avancés	
Alimentations	Caractéristiques	Constituants	<b>Transfert</b>	Autres	Adsorption / Régénération	Bilan financier	Impressions	Paramètres

<b>Transfert de matière</b>		<b>Transfert thermique</b>	
Type de transfert	Transfert gaz et solide	<input checked="" type="checkbox"/> Bilans enthalpiques ?	
<b>Transfert de matière phase gaz</b>		Gaz-adsorbant	Calculé (Satterfield)
Type de transfert gaz	kf calculé, Petrovic-Thodos	Gaz-paroi	Calculé (Leva)
<b>Transfert de matière phase solide</b>		<b>Inertie thermique de la paroi</b>	
Type de transfert solide	kf fourni	<input type="checkbox"/> Prise en compte de l'inertie thermique de la paroi	
Coefficients de transfert de matière phase solide (s <sup>-1</sup> )		Masse (paroi)	0 kg
1	DICHLOROMETHANE	0,1	
2	NITROGEN	0	
		Chaleur spécifique (paroi)	0 cal/g/K
		Epaisseur (paroi)	0 m
		Conductivité thermique	0 W/m/K
		Coefficient de transfert paroi-extérieur	Fourni
		Coefficient	4,000000956022? kcal/h/m2/K

### 1.5.3.12. Thermodynamique de l'adsorption

Les modèles thermodynamiques d'adsorption disponibles sont :

- ✓ **Modèle simple :** Ce modèle ne prend pas en compte l'influence des constituants les uns par rapport aux autres, la quantité adsorbée d'un constituant donné étant directement calculée par l'isotherme d'adsorption qui lui a été renseignée.
- ✓ **IAS ou RAS :** Ce modèle prend en compte l'influence des constituants les uns par rapport aux autres, en supposant une phase adsorbée idéale pour le modèle IAS. Le modèle RAS est utilisé si dans le profil thermodynamique du calculator Simulis Thermodynamics un modèle de coefficients d'activité a été sélectionné.
- ✓ **Langmuir étendu :** Ce modèle prend en compte l'influence des constituants les uns par rapport aux autres, il est à utiliser avec les isothermes d'adsorption de corps purs du type « Langmuir étendu ».

Dans cet exemple, le modèle simple est retenu.

Thermodynamique de l'adsorption	Valeur
Modèle d'adsorption	Modèle simple

Le modèle thermodynamique d'adsorption est sélectionné dans l'onglet « Paramètres », sous-onglet « Autres ». La partie gauche de ce sous-onglet sert à spécifier une vanne optionnelle en sortie de la colonne lors de l'étape d'adsorption.

The screenshot shows a software window with several tabs: Identification, Paramètres, Scripts, Rapport, Courants, Notes, Paramètres avancés. Under 'Paramètres', there are sub-tabs: Alimentations, Caractéristiques, Constituants, Transfert, Autres (selected), Adsorption / Régénération, Bilan financier, Impressions, Paramètres. The 'Autres' sub-tab is active and contains two main sections: 'Vanne' and 'Thermodynamique'.  
 In the 'Vanne' section:  
 - There is a checkbox 'Présence d'une vanne en sortie' which is not checked.  
 - 'Etat au démarrage' is a dropdown menu set to 'Ouvrir'.  
 - 'Pression à l'ouverture' consists of a text input '0' and a dropdown menu 'atm'.  
 - 'Coefficient de l'équation' is a text input '1E-6'.  
 In the 'Thermodynamique' section:  
 - 'Modèle d'adsorption' is a dropdown menu set to 'Modèle simple'.  
 In the 'Colonne' section:  
 - 'Pression de sortie' consists of a text input '1' and a dropdown menu 'atm'.

### 1.5.3.13. Séquence

Le sous-onglet « Adsorption/Régénération » de l'onglet « Paramètres » permet de choisir le type de cycle à simuler parmi les cinq disponibles :

1. Adsorption seule
2. Adsorption + régénération en température
3. Adsorption + régénération en pression
4. Adsorption + régénération en pression + régénération en température
5. Adsorption + régénération en température + régénération en pression

Le cycle « Adsorption + régénération en température » est utilisé dans cet exemple pour modéliser un procédé TSA (Thermal Swing Adsorption) comme le montre la copie d'écran ci-après.

Des paramètres optionnels peuvent être définis pour chaque étape (boutons « Paramètres... ») :

- ✓ Adsorption :
  - Température de la paroi différente pour cette étape
  - Quantité de chaleur échangée au sein du lit
- ✓ Régénération en température :
  - Régénération à co- ou contre-courant
  - Préchauffage de la colonne dans le lit et/ou la paroi
  - Refroidissement de la colonne en fin d'étape
  - Temporisation de la colonne en fin d'étape
  - Quantité de chaleur échangée au sein du lit

Identification Paramètres Scripts Rapport Courants Notes Paramètres avancés

Alimentations Caractéristiques Constituants Transfert Autres Adsorption / Régénération Bilan financier Impressions Paramètres

**Adsorption et régénération**

Type de séquence

Adsorption + régénération en température

Adsorption seule

Adsorption + régénération en température

Adsorption + régénération en pression

Adsorption + régénération en pression + régénération en température

Adsorption + régénération en température + régénération en pression

**Adsorption** Paramètres... Événements...

**Régénération en température** Paramètres... Événements...

**Fin de la simulation** Événements...

```

graph TD
    A[A] --> EVA((EVA))
    EVA --> RT[RT]
    RT --> EVT((EVT))
    EVT --> A
  
```

A: Adsorption

EVA: Événements de fin d'adsorption

RT: Régénération en température

EVT: Événements de fin de régénération en température

Chaque étape se termine par un événement. Le premier événement atteint déclenche le début de l'étape suivante. Les événements disponibles sont les suivants (boutons « Événements... ») :

- ✓ Adsorption :
  - Durée de l'étape
  - Taux de percée d'un constituant à une position donnée dans la colonne
  - Concentration en phase gaz d'un constituant à une position donnée dans la colonne
  - Concentration en phase solide d'un constituant à une position donnée dans la colonne
  - Température maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
  - Pression maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
- ✓ Régénération en température et en pression :
  - Durée de l'étape
  - Concentration en phase gaz d'un constituant à une position donnée dans la colonne
  - Concentration en phase solide d'un constituant à une position donnée dans la colonne
  - Température maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
  - Pression maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
  - Quantité produite d'un constituant à une position donnée dans la colonne

- ✓ Fin de simulation :
  - Temps de fin de simulation (voir § 1.5.2) ou nombre de cycles
  - Quantité totale produite d'un constituant à une position donnée dans la colonne
  - Température maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
  - Pression maximale atteinte à une position donnée dans la colonne
  - Quantité totale traitée d'un constituant

Dans cet exemple, la régénération du lit d'adsorbant est une régénération en température faite par un flux d'azote chaud circulant à contre-courant par rapport au flux d'adsorption. Les paramètres par défaut sont retenus pour les deux étapes (adsorption et régénération en température). Ces deux étapes et la simulation sont arrêtées par une durée.

	Valeur
<b>Séquence</b>	
Type	Adsorption + Régénération en température
<b>Adsorption</b>	
Paramètres	Valeurs par défaut
Evénements	Durée = 12 600 s
<b>Régénération en température</b>	
Paramètres	Valeurs par défaut
Evénements	Durée = 4 845 s
<b>Fin de la simulation</b>	
Evénements	Temps de fin de simulation

### 1.5.3.14. Bilan financier

ProSim DAC effectue un bilan financier sur les étapes de régénération. Si l'utilisateur est intéressé, il est possible d'en modifier les paramètres par défaut dans le sous-onglet « Bilan financier » de l'onglet « Paramètres ».

Identification	Paramètres	Scripts	Rapport	Courants	Notes	Paramètres avancés		
Alimentations	Caractéristiques	Constituants	Transfert	Autres	Adsorption / Régénération	<b>Bilan financier</b>	Impressions	Paramètres
<b>Coûts de la régénération en température</b>								
Coût du flux régénérant	<input type="text" value="0,2"/>	€/Nm <sup>3</sup>						
Coût du chauffage du flux régénérant	<input type="text" value="100"/>	€/MWh						
Coût du préchauffage du lit	<input type="text" value="120"/>	€/MWh						
<b>Coûts de la régénération en pression</b>								
Prix de l'électricité	<input type="text" value="100"/>	€/MWh						
Puissance de la pompe à vide	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="kcal/h"/>						

### 1.5.3.15. Impressions

ProSim DAC propose différentes options pour l'impression des résultats du calcul. Les paramètres retenus dans cet exemple sont listés dans le tableau ci-dessous.

Paramètres	Valeur
Impression des fichiers résultats	Fréquence = 60 s
Impression des courbes 3D	Non activée
Impression du courant de sortie avec le pas de temps du module	Activée
Impression des données d'entrée	Activée
Type de résultats	Massique
Détection des inertes	Non activée

La copie d'écran ci-après présente leurs saisies dans l'onglet « Paramètres », sous-onglet « Impressions ».

The screenshot shows the 'Impressions' sub-tab in the 'Paramètres' section. The 'Imprimer' section is active, showing the following settings:

- Imprimer les fichiers résultats
  - Fréquence: 60 s
- Imprimer les courbes 3D
  - Fréquence: 0,1 h
- Impression du courant de sortie avec le pas de temps du module
- Impression des données d'entrée
- Type de résultats: Massique
- Détection des inertes
  - Seuil: 1E-6 kmol

### 1.5.3.1. Paramètres d'intégration, paramètres du modèle et tolérances

ProSim DAC donne accès à un certain nombre de paramètres d'intégration, paramètres du modèle et des tolérances. Seuls les paramètres figurant dans le tableau ci-dessous sont modifiés par rapport aux choix par défaut. L'utilisation du calcul analytique des dérivées permet d'accélérer la résolution du modèle. Le modèle repose sur une intégration numérique temporelle et une discrétisation spatiale. La colonne est ici discrétisée en 7 cellules. Les coefficients de transfert de matière en phase solide (§ 1.5.3.10) sont modifiés pour les étapes de régénération. Ils ont été déterminés à partir de comparaisons avec des résultats expérimentaux.

Paramètres	Valeur
Pas d'intégration maximum	60 s
Dérivées	Calculées analytiquement
Nombre de cellules de discrétisation	7
Transfert solide Type Dichlorométhane Azote	Fourni 0,006 s <sup>-1</sup> 0 s <sup>-1</sup>
Autres paramètres	Valeurs par défaut

La copie d'écran ci-après présente leurs saisies dans l'onglet « Paramètres », sous-onglet « Paramètres ».

Identification
Paramètres
Scripts
Rapport
Courants
Profils
Notes
Paramètres avancés

Alimentations
Caractéristiques
Constituants
Transfert
Autres
Adsorption / Régénération
Bilan financier
Impressions
Paramètres

**Intégration**

Pas d'intégration max.  s

Pas initial d'intégration  s

Méthode d'intégration Matrice creuse, évaluation analytique

Nombre de pas

Dérivées calculé analytiquement

**Tolérances**

	Relative	Absolue
Concentrations partielles	<input type="text" value="1E-5"/>	<input type="text" value="1E-5"/>
Concentrations	<input type="text" value="0,0001"/>	<input type="text" value="0,0001"/>
Températures	<input type="text" value="0,001"/>	<input type="text" value="0,001"/>
Pressions	<input type="text" value="0,001"/>	<input type="text" value="0,001"/>
Enthalpies	<input type="text" value="0,1"/>	<input type="text" value="0,1"/>
Vitesse	<input type="text" value="0,1"/>	<input type="text" value="0,1"/>

**Paramètres du modèle**

Nombre de cellules de discrétisation

Coefficient de dispersion axiale  m<sup>2</sup>/s

$\Delta H_{\text{Régénération}} / \Delta H_{\text{Adsorption}}$  (ratio)

Prise en compte de l'accumulation de chaleur dans le solide

Quantité de chaleur appliquée au Bilan enthalpique gaz

Durée de la spline cubique  h

Transfert solide Fourni

Coefficients de transfert de matière phase solide (s<sup>-1</sup>)

1	DICHLOROMETHANE	0,006
2	NITROGEN	0

## 2. RESULTATS

### 2.1. Rapport de simulation de la colonne d'adsorption

Le rapport de simulation de la colonne d'adsorption (« Rapport ») présente des résultats globaux (intégrés au cours du temps) : caractéristiques initiales de la colonne, quantités adsorbées, quantités récupérées durant la régénération...

La masse d'adsorbant n'est pas fournie directement dans les données d'entrée. Elle est calculée par ProSim DAC en fonction des caractéristiques géométriques du lit et des propriétés de l'adsorbant. Il est alors intéressant de vérifier dans le rapport de simulation que la masse d'adsorbant calculée correspond à celle attendue. Pour cet exemple, la masse d'adsorbant est d'environ 255 g.

#### CARACTERISTIQUES GENERALES DE LA COLONNE

Masse d'adsorbant dans la colonne :	255.132	(G)
Volume de la colonne	: 0.539961	(L)
Volume de solide	: 0.340176	(L)
Volume de vide	: 0.199786	(L)

Avec les paramètres opératoires sélectionnés (voir § 1.5.3.13 entre-autre), le lit d'adsorbant n'est pas totalement régénéré (112 g de dichlorométhane adsorbés et 85 g récupérés lors de la régénération).

#### QUANTITE ADSORBEE (G)

CONSTITUANT	Cycle N° 1
DICHLOROMETHANE	111.894
NITROGEN	-4.235838E-03

#### QUANTITE RECUPEREE DURANT LA REGENERATION EN TEMPERATURE (G)

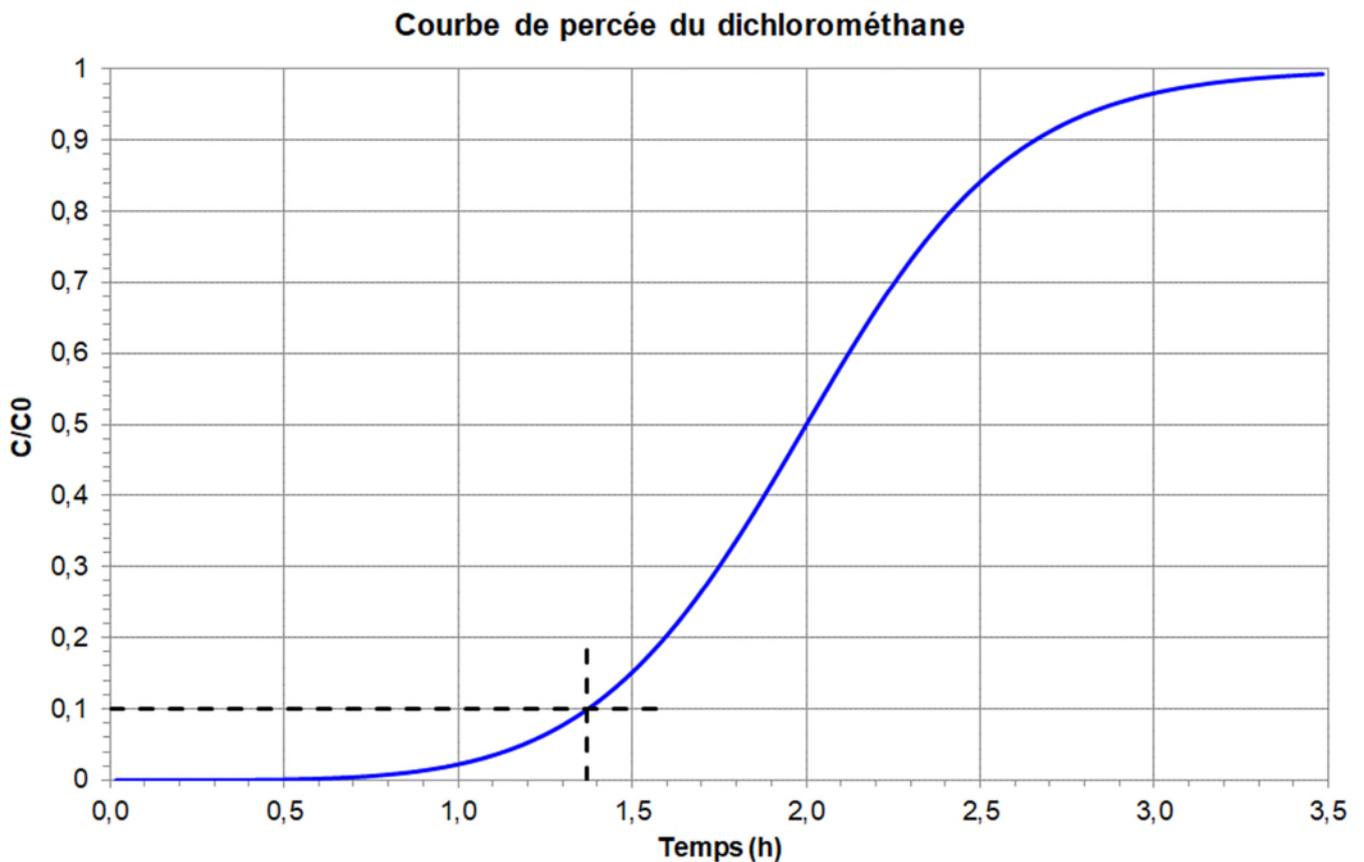
CONSTITUANT	Cycle N° 1
DICHLOROMETHANE	84.7109
NITROGEN	2020.83

La valeur négative pour la quantité adsorbée d'azote correspond à l'écart au bilan matière de la simulation.

## 2.1. Profils de la colonne d'adsorption

Plusieurs profils (températures, pressions, vitesses, concentrations et courbes de percée) dans la colonne d'adsorption sont disponibles à la fin de la simulation dans la fenêtre d'édition (onglet « Profils »).

La figure ci-dessous présente la courbe de percée du dichlorométhane. La percée est supposée atteinte lorsque la concentration en sortie de la colonne est égale à 10% de la concentration en entrée. Elle est atteinte au bout de 1h22min. Le lit d'adsorbant est saturé lorsque la concentration en sortie est égale à celle en entrée. Ceci se produit au bout de 3h30min.



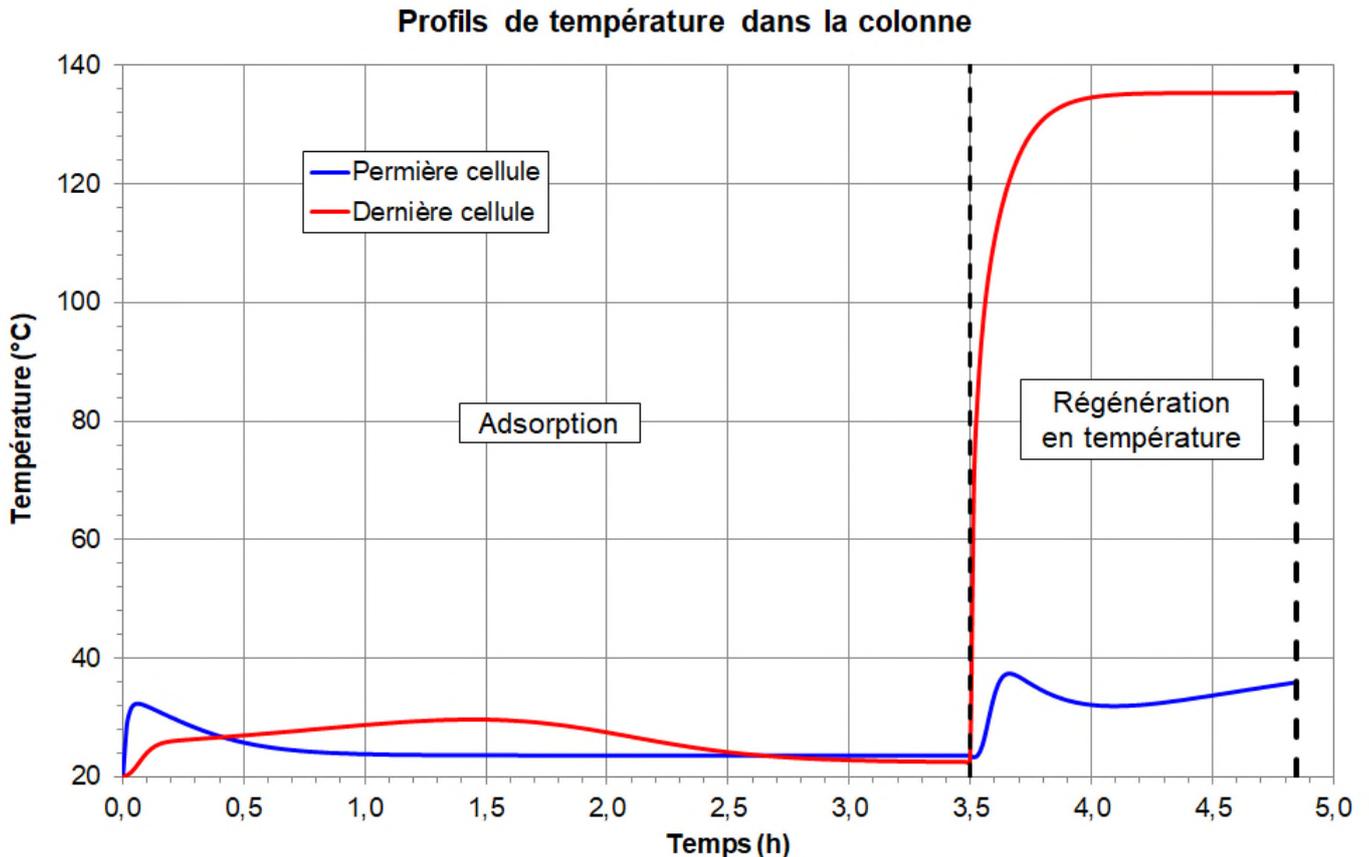
La figure ci-après présente le profil de température dans la première et la dernière cellule de discrétisation. Dans le cas de l'adsorption :

- ✓ Première cellule : Cellule d'entrée de la colonne
- ✓ Dernière cellule : Cellule de sortie de la colonne

La régénération en température se faisant à contre-courant :

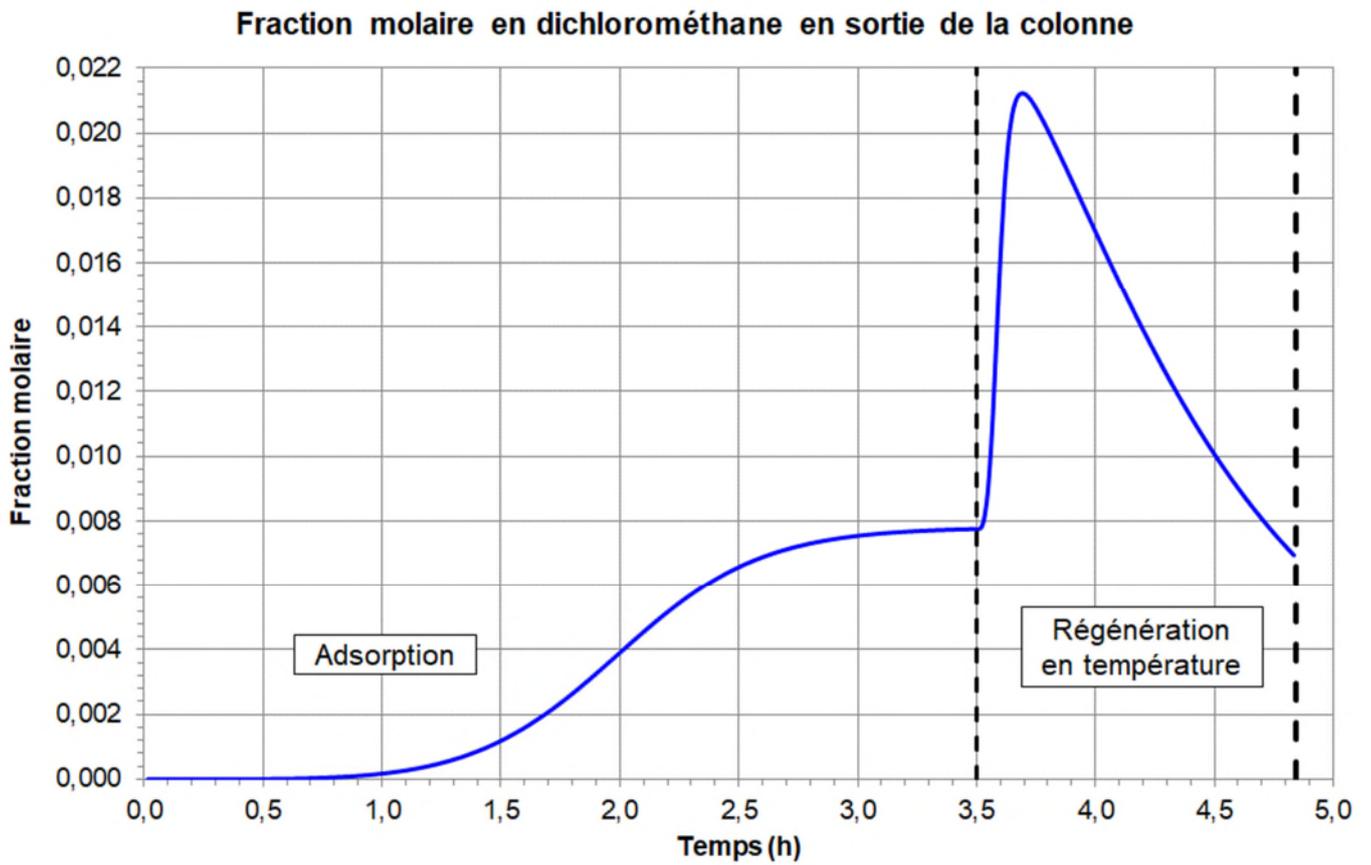
- ✓ Première cellule : Cellule de sortie de la colonne
- ✓ Dernière cellule : Cellule d'entrée de la colonne

Les profils de température lors de l'étape d'adsorption permettent de mettre en évidence le pic de température correspondant. Lors de la régénération en température le gradient de température est plus important. En effet, l'extrémité de la colonne où le gaz chaud entre (dernière cellule) se trouve rapidement en équilibre avec la température du flux entrant (170°C). A l'autre extrémité, la montée en température est moins importante et un équilibre entre la température de paroi de 22°C et le gaz chaud à 170°C a le temps de s'établir.



## 2.1. Profils du courant de sortie

La figure ci-dessous présente l'évolution de la fraction molaire en dichlorométhane en sortie de la colonne. Tant que le perçage n'est pas atteint, l'adsorbant remplit son rôle et la teneur en dichlorométhane en sortie de colonne est nulle. Une fois le temps de percée atteint, le courant de sortie se charge progressivement en dichlorométhane. Dans cet exemple, l'étape d'adsorption se termine sur le temps correspondant à la saturation du lit. Le lit ne retient alors plus le dichlorométhane et sa teneur en sortie est égale à sa teneur en entrée. La régénération en température par un flux d'azote chaud à contre-courant permet de désorber le dichlorométhane retenu dans l'adsorbant. Après un pic correspondant à l'accumulation du dichlorométhane dans le lit, la teneur en dichlorométhane diminue du fait de la régénération du lit. Cette étape s'arrête avant la régénération complète du lit.



Le profil ci-dessus ainsi que d'autres (température, pression, débit, enthalpie, compositions) sont disponibles pour le courant de sortie de la colonne d'adsorption à la fin de la simulation. Ils sont accessibles via le bouton « Résultats tabulés... » de l'onglet « Paramètres » de la fenêtre d'édition du courant de sortie.

### 3. BIBLIOGRAPHIE

- [RAM11] RAMALINGAM S.G. SAUSSAC J., PRE P., GIRAUDET S., LE COQ F., LE CLOIREC P., NICOLAS S., BAUDOUIN O., DECHELOTTE S., MEDEVIELLE A., "Hazardous Dichloromethane Recovery in Combined Temperature and Vacuum Pressure Swing Adsorption Process", J. Hazard. Mater., 198, 95-102 (2011)
- [ROW11] ROWLEY R.L., WILDING W.V., OSCARSON J.L., GILES N.F., "DIPPR® Data Compilation of Pure Chemical Properties", Design Institute for Physical Properties, AIChE, New York, NY (2011)